



教育部高职高专规划教材

物理化学

关荐伊 崔一强 主编
吴晓明 主审



化学工业出版社
教材出版中心

教育部高职高专规划教材

物 理 化 学

关荐伊 崔一强 主编

吴晓明 主审



化学工业出版社
教材出版中心

· 北 京 ·

(京) 新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

物理化学/关荐伊, 崔一强主编. —北京: 化学工业出版社, 2005. 5

教育部高职高专规划教材

ISBN 7-5025-7169-8

I. 物… II. ①关…②崔… III. 物理化学-高等学校: 技术学院-教材 IV. 064

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 054062 号

教育部高职高专规划教材

物 理 化 学

关荐伊 崔一强 主编

吴晓明 主审

责任编辑: 陈有华 蔡洪伟

文字编辑: 林 媛

责任校对: 顾淑云 周梦华

封面设计: 于 兵

*

化学工业出版社
教材出版中心 出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010) 64982530

(010) 64918013

购书传真: (010) 64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

北京云浩印刷有限责任公司印装

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 18½ 字数 446 千字

2005 年 7 月第 1 版 2005 年 7 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-7169-8

定 价: 29.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

教育部高职高专制药技术类专业规划教材 编审委员会

主任委员	程桂花					
副主任委员	曹克广	陈炳和	丁志平	金长义	乔德阳	王爱广
	杨宗伟	于兰平	袁红兰			
委 员	陈文华	崔一强	丁敬敏	关荐伊	韩忠霄	黄一石
	雷和稳	冷士良	李丽娟	李晓华	刘 军	陆 敏
	申玉双	苏建智	孙乃有	王炳强	吴晓明	吴英绵
	辛述元	薛叙明	杨瑞虹	杨永杰	叶昌伦	于淑萍
	于文国	张宏丽	张素萍	张文雯	张雪荣	张正兢
	张志华	周长丽	(按姓氏汉语拼音排序)			

出版说明

高职高专教材建设工作是整个高职高专教学工作中的重要组成部分。改革开放以来,在各级教育行政部门、有关学校和出版社的共同努力下,各地先后出版了一些高职高专教育教材。但从整体上看,具有高职高专教育特色的教材极其匮乏,不少院校尚在借用本科或中专教材,教材建设落后于高职高专教育的发展需要。为此,1999年教育部组织制定了《高职高专教育专门课程基本要求》(以下简称《基本要求》)和《高职高专教育专业人才培养目标及规格》(以下简称《培养规格》),通过推荐、招标及遴选,组织了一批学术水平高、教学经验丰富、实践能力强的教师,成立了“教育部高职高专规划教材”编写队伍,并在有关出版社的积极配合下,推出一批“教育部高职高专规划教材”。

“教育部高职高专规划教材”计划出版500种,用5年左右时间完成。这500种教材中,专门课(专业基础课、专业理论与专业能力课)教材将占很高的比例。专门课教材建设在很大程度上影响着高职高专教学质量。专门课教材是按照《培养规格》的要求,在对有关专业的人才培养模式和教学内容体系改革进行充分调查研究和论证的基础上,充分汲取高职、高专和成人高等学校在探索培养技术应用型专门人才方面取得的成功经验和教学成果编写而成的。这套教材充分体现了高等职业教育的应用特色和能力本位,调整了新世纪人才必须具备的文化基础和技术基础,突出了人才的创新素质和创新能力的培养。在有关课程开发委员会组织下,专门课教材建设得到了举办高职高专教育的广大院校的积极支持。我们计划先用2~3年的时间,在继承原有高职高专和成人高等学校教材建设成果的基础上,充分汲取近几年来各类学校在探索培养技术应用型专门人才方面取得的成功经验,解决新形势下高职高专教育教材的有无问题;然后再用2~3年的时间,在《新世纪高职高专教育人才培养模式和教学内容体系改革与建设项目计划》立项研究的基础上,通过研究、改革和建设,推出一大批教育部高职高专规划教材,从而形成优化配套的高职高专教育教材体系。

本套教材适用于各级各类举办高职高专教育的院校使用。希望各用书学校积极选用这批经过系统论证、严格审查、正式出版的规划教材,并组织本校教师以对事业的责任感对教材教学开展研究工作,不断推动规划教材建设工作的发展与提高。

教育部高等教育司

2001年4月3日

前 言

本书是在“全国高职高专制药工程专业教材建设工作会议”上确定的制药类系列教材之一，是根据制药工程教学计划及教学基本要求编写的，可作为全国高职高专制药类及其相关专业物理化学课程的教材，适合课时在 80 学时左右。

本教材以培养高等技术应用型人才为目标，贯彻实际、实践、实用的原则，内容注重与生产实际紧密结合。按照“以应用为目的、必须够用为度”的原则，针对性地选择实用性、应用性较强的内容，删去繁琐的理论推导和说明，融入现代科技新知识、新成果和新技术，拓宽学生的知识面，注重学生创新能力的培养，为学生后续课乃至终身学习奠定基础。

在教材内容的选取上，重概念的建立和结论的应用。重点讲明基本定律与基本公式的物理意义及使用条件，并配以相应的例题、习题和练习题。全书包括五篇内容，第一篇为化学热力学基础，包括气体、热力学第一定律和热力学第二定律；第二篇为化学热力学应用，包括多组分系统热力学、相平衡、化学平衡与电化学；第三篇为化学动力学与催化作用；第四篇为表面现象与胶体化学；第五篇为物理化学实验，包括实验基础知识与实验技术及基本实验。教材结构紧凑，内容简练、全面。为适应各相关专业的需要，编写时力求由浅入深、循序渐进，并适当扩展某些内容。书中标有“*”的为选学和自学内容。

全书共分十三章，其中第一章、第二章、第三章、第十二章、第十三章由太原科技大学逯宝娣编写；第四章、第五章、第六章由河北化工医药职业技术学院崔一强编写；第七章、第八章、第九章由河北工业职业技术学院刘风云编写；绪论、第十章、第十一章由承德石油高等专科学校的关荐伊编写。全书由关荐伊、崔一强统稿，河北化工医药职业技术学院吴晓明主审。参加审稿的还有承德石油高等专科学校马丽雅、刘云鹤等。编者对各位提出的宝贵意见和建议深表谢意。本书的编写得到了化学工业出版社及高职高专制药技术专业规划教材编审委员会的有关领导和同志的关心和指导，在此一并表示衷心的感谢。

限于编者的水平，定有不少错漏，恳请同行和读者批评指正。

编 者

2005 年 3 月

目 录

绪论	1
一、物理化学课程的主要任务	1
二、物理化学与生物技术和制药工程	1
三、物理化学的研究方法	2
四、物理化学课程的内容和学习方法	2
阅读材料 物理化学的发展史	3

第一篇 化学热力学基础

第一章 气体	6
第一节 理想气体状态方程	6
一、理想气体状态方程	6
二、理想气体的微观模型	7
第二节 理想气体混合物的两个定律	7
一、分压定律	7
二、分体积定律	8
三、混合物的平均摩尔质量	9
第三节 真实气体	10
一、真实气体的 p 、 V 、 T 性质	10
二、真实气体状态方程	11
第四节 气体液化	12
第五节 压缩因子	13
习题	15
第二章 热力学第一定律	17
第一节 基本概念	17
一、系统与环境	17
二、状态和状态函数	17
三、热力学标准态	18
四、热力学平衡态	18
五、过程和途径	18
第二节 热力学第一定律	20
一、热和功	20
二、热力学能	21
三、热力学第一定律	21
第三节 恒容热、恒压热及焓	22
一、恒容热	22

二、恒压热及焓	22
第四节 热容	23
第五节 热力学第一定律的应用	25
一、理想气体 p 、 V 、 T 变化过程	25
二、相变过程	28
第六节 化学反应热	30
一、基本概念	30
二、标准摩尔反应焓的计算	33
习题	37
第三章 热力学第二定律	39
第一节 热力学第二定律	39
一、自发过程的特征	39
二、热力学第二定律	40
三、熵函数的引出和熵变的定义	40
四、熵增原理	41
第二节 熵变计算	42
一、理想气体 p 、 V 、 T 变化过程	42
二、相变过程	45
三、化学反应过程	46
第三节 吉布斯函数和亥姆霍兹函数	48
一、吉布斯函数	48
二、亥姆霍兹函数	50
第四节 热力学函数基本关系	51
一、热力学基本方程	52
二、对应系数关系式	52
三、麦克斯韦关系式	52
习题	53
阅读材料 熵的统计意义	54
练习题	55

第二篇 化学热力学应用

第四章 多组分系统热力学	61
第一节 偏摩尔量	61
一、偏摩尔量的定义	61
二、偏摩尔量的集合公式和偏摩尔量之间的关系	63
第二节 化学势	63
一、化学势的定义	63
二、化学势判据	64
三、化学势与温度、压力的关系	64
第三节 气体的化学势	65

一、理想气体的化学势	65
二、实际气体的化学势	65
第四节 理想液态混合物	66
一、组成的各种表示方法及其换算	67
二、拉乌尔定律	68
三、理想液态混合物	69
四、理想液态混合物各组分化学势	70
第五节 理想稀溶液	71
一、亨利定律	71
二、理想稀溶液的定义和化学势	72
三、稀溶液的依数性	74
四、分配定律及应用	78
习题	78
第五章 相平衡	80
第一节 相律	80
一、基本概念	80
二、相律	82
三、相律的应用	82
第二节 单组分系统	83
一、单组分系统相律分析	83
二、单组分系统两相平衡时温度和压力之间的关系	83
三、单组分系统的相图	85
第三节 二组分液相系统	87
一、相律分析	87
二、二组分理想液态混合物系统的相图	87
三、非理想液态混合物系统	89
四、部分互溶的双液系统相图	93
五、二组分完全不互溶液相系统	94
第四节 二组分固-液系统	95
一、简单二组分固-液系统的相图	95
二、形成稳定化合物的简单二组分固-液系统	98
三、相图的应用	99
习题	99
第六章 化学平衡	101
第一节 化学反应的方向与平衡条件	101
一、化学反应的摩尔吉布斯函数	101
二、化学平衡的条件	101
第二节 化学反应等温方程及平衡常数	102
一、理想气体反应的等温方程式	102
二、理想气体反应的标准平衡常数	102

三、平衡常数的其他表示法	103
第三节 平衡常数的测定及相关计算	105
一、平衡常数的测定	105
二、平衡常数的计算	106
三、平衡组成的计算	107
第四节 影响化学平衡的因素	108
一、温度对化学平衡的影响——等压方程式	108
二、压力及惰性介质对化学平衡的影响	110
三、反应物配比对平衡转化率的影响	112
习题	112
第七章 电化学	114
第一节 电解质溶液	114
一、离子的电迁移	114
二、电导及其应用	116
三、强电解质溶液的活度及活度因子	119
第二节 可逆电池电动势	122
一、可逆电池	122
二、电极电势	125
三、可逆电池热力学	128
四、电池电动势的测定及其应用	129
五、生化标准电极电势	133
第三节 不可逆电极过程	134
一、分解电压	134
二、极化作用和超电势	135
三、金属的腐蚀与防腐	138
四、化学电源	139
习题	143
阅读材料 超临界流体萃取技术及其应用	144
练习题	146

第三篇 化学动力学与催化作用

第八章 化学动力学	154
第一节 化学动力学基本概念	154
一、化学反应速率	154
二、基元反应与反应分子数	156
三、反应级数	157
四、反应速率常数	157
第二节 简单级数反应	158
一、一级反应	158
二、二级反应	160

三、 n 级反应	161
* 四、反应级数的确定	162
第三节 温度对反应速率的影响	163
一、范特霍夫规则	164
二、阿伦尼乌斯方程	164
三、活化能	166
四、反应的适宜温度	167
第四节 复合反应	167
一、对峙反应	167
二、平行反应	170
三、连串反应	170
四、链反应	171
* 五、复合反应的近似处理	173
习题	175
第九章 催化作用	177
第一节 催化作用	177
一、催化剂与催化作用	177
二、催化作用的基本特征	177
三、固体催化剂的活性及其影响因素	178
第二节 催化反应	179
一、均相催化反应	179
二、非均相催化反应	181
三、酶催化反应	182
习题	183
阅读材料 电催化	184
练习题	185

第四篇 表面现象与胶体化学

第十章 表面现象	188
第一节 表面张力	189
一、表面张力的概念	189
二、表面张力的影响因素	190
第二节 弯曲液面的特征	191
一、弯曲液面的附加压力	191
二、毛细管现象	192
三、弯曲液面的蒸气压	193
四、亚稳态	194
第三节 溶液的表面吸附	195
一、溶液的表面张力	195
二、吉布斯吸附等温式	196

三、吸附层上分子的定向排列·····	196
第四节 表面活性物质·····	197
一、表面活性物质的分类·····	197
二、表面活性物质的 HLB 值·····	197
三、表面活性物质的临界胶束浓度·····	198
四、胶束的应用——增溶作用·····	199
第五节 润湿现象·····	199
一、润湿·····	199
二、润湿角·····	200
三、润湿现象的应用·····	201
第六节 气-固界面吸附·····	202
一、吸附的概念·····	202
二、固体表面对气体分子的吸附·····	203
习题·····	205
第十一章 胶体化学 ·····	207
第一节 分散系统的分类及其主要特征·····	207
第二节 溶胶的制备与净化·····	209
一、溶胶的制备·····	209
二、溶胶的净化·····	209
第三节 溶胶的性质·····	209
一、溶胶的光学性质·····	209
二、溶胶的动力学性质·····	211
三、溶胶的电学性质·····	213
第四节 溶胶的稳定性与聚沉·····	216
一、溶胶的稳定性·····	216
二、影响溶胶聚沉的因素·····	217
第五节 乳状液·····	219
一、乳状液的类型与鉴别·····	219
二、乳状液的稳定性与乳化·····	220
三、乳状液的转型与破坏·····	222
四、微乳状液·····	223
第六节 高分子溶液·····	225
一、高分子化合物的相对分子质量·····	225
二、高分子溶液的性质·····	226
三、高分子电解质溶液·····	230
四、高分子对胶体稳定性的影响·····	232
五、高分子物质的降解·····	233
习题·····	234
阅读材料 微胶囊·····	235
练习题·····	236

第五篇 物理化学实验

第十二章 实验基础知识与实验技术	237
第一节 实验基础知识.....	237
一、实验目的和要求.....	237
二、实验室安全知识.....	238
第二节 物理化学实验技术.....	240
一、温度测量技术.....	240
二、压力测量技术.....	241
三、电化学测量技术.....	243
四、光学测量技术.....	246
第十三章 基本实验	250
实验一 恒温槽的组装和性能测定.....	250
实验二 燃烧热的测定.....	252
实验三 双液系汽-液平衡相图的测绘	255
实验四 凝固点下降法测定物质的摩尔质量.....	258
实验五 电导率的测定及其应用.....	260
实验六 电池电动势的测定及其应用.....	262
实验七 一级反应——蔗糖水解速率常数的测定.....	264
实验八 二级反应——乙酸乙酯皂化速率常数的测定.....	266
实验九 固体在溶液中吸附的测定.....	269
实验十 溶液表面张力的测定.....	270
附录	274
附录一 某些气体的摩尔定压热容与温度的关系.....	274
附录二 某些物质的标准摩尔生成焓、标准摩尔生成吉布斯函数、标准熵及 热容 (25℃)	275
附录三 某些有机化合物的标准摩尔燃烧焓 (25℃)	278
参考文献	279

绪 论

物质的变化形式包括物理变化和化学变化。任何化学变化的发生，总是伴随有物理变化，例如，化学变化中出现的热、电、光、声等物理现象。反之，物理变化也可能导致化学变化的发生，例如加热、通电、光照、电磁场等又可引起化学变化，或影响化学变化的进程。化学变化和物理变化有紧密的相互联系，人们在考察、研究这种联系的过程中，逐步形成了物理化学这门学科。

物理化学是化学学科的一个重要分支，是从物理变化和化学变化的联系入手，运用物理学的理论和手段探索化学变化的基本规律的一门学科。

一、物理化学课程的主要任务

物理化学课程的主要任务有以下三个方面。

1. 化学反应进行的方向和限度，是化学热力学要解决的问题

在一定条件下，一个化学反应能否发生？向哪个方向进行？进行到什么程度为止？外界条件如温度、压力、浓度等因素的变化对化学反应有什么影响？化学反应的热效应和可利用的能量是多少？这些问题都是化学热力学的研究范畴，它主要解决化学反应的方向和限度的问题，即化学反应的可能性问题。

2. 化学反应的速率和机理，是化学动力学研究的问题

解决化学反应的快慢和实现过程的具体步骤，外界条件（如浓度、温度、压力、催化剂等）对反应速率有何影响？反应的机理（历程）是什么？如何控制反应使之按预期的方式进行等问题。这类问题属于化学动力学的研究范畴，它主要解决化学反应的速率和机理问题，即化学反应的现实性问题。

3. 物质的结构与其性能之间的关系，是结构化学研究的内容

人们在实践中越来越感觉到仅仅认识物质的性质是远远不够的，只有从本质上弄清楚物质的内部结构与其性质的关系，才能真正理解化学变化的内因。现代生产和科技的发展，要求提供具有各种特定性能的材料，如耐高温、耐低温、耐高压、耐腐蚀性等材料。要解决这些问题，就必须了解物质内部结构与性质间的关系，从而探索、合成具有特殊功能的新材料。关于物质的微观结构的研究，构成了物理化学的第三部分内容，即结构化学。

根据高职制药工程与生物技术专业的要求，本书只涉及前两部分内容。

二、物理化学与生物技术和制药工程

物理化学是一门重要的基础学科，内容严谨，逻辑性强，是研究化学变化规律的科学。在生物、电子和计算机时代，物理化学所具有的基础性、理论性、先导性和综合性的特点，使之成为生物技术和制药工程发展的一块重要基石，在生物化学、药理学、药物合成反应、药物过程原理与设备、化学制药工艺与反应器、现代药物分离与纯化技术等许多领域中起着

重要的作用。例如生物化学中的生物合成、分解和相互转化中的能量转换规律,生物化学实验中的电泳法进行大分子物质的分离、制备等需要胶体化学知识。相平衡理论为制药过程中的精馏、吸收、萃取、干燥、结晶、冷却等单元操作打下基础。非平衡态热力学的建立为说明生物进化、生命体的变化提供了理论基础。酶催化动力学、药物效应动力学、药物降解动力学、药物代谢动力学、污染物在环境中的运动迁移等研究更是直接采用了物理化学中化学动力学的理论和方法。模拟光合作用、模拟生物固氮等研究为生物技术的发展开辟了新的天地,而这些研究都离不开物理化学。总之,物理化学与制药工程、生物技术相互交叉、渗透、结合,发展出许多边缘学科,有了重大的突破。

三、物理化学的研究方法

物理化学是一门自然科学,一般科学研究的方法对物理化学都是完全适用的。如事物都是一分为二的,矛盾的对立与统一这一辩证唯物主义的方法;实践,认识,再实践这一认识论的方法;以数学及逻辑学为工具通过推理由特殊到一般的归纳及由一般到特殊的演绎的逻辑推理方法;对复杂事物进行简化,建立抽象的理想化模型,上升为理论后,再回到实践中加以检验这种科学模型的方法等,在物理化学的研究中被普遍应用。

热力学是以大量粒子组成的宏观系统作为研究对象,以经验概括出的热力学第一定律、热力学第二定律为理论基础,引出或定义了热力学能、焓、熵、亥姆霍兹函数、吉布斯函数,再加上 p 、 V 、 T 这些可由实验直接测定的宏观量作为系统的宏观性质,利用这些宏观性质,经过归纳与演绎推理,得到一系列热力学公式或结论,用以解决物质变化过程的能量平衡、相平衡和反应平衡等问题。这一方法的特点是不涉及物质系统内部粒子的微观结构,只涉及物质系统变化前后状态的宏观性质。实践证明,这种宏观的热力学方法是十分可靠的,至今未发现过实践中与热力学理论所得结论相反的情况。

化学动力学所用的方法则是宏观方法与微观方法的交叉、综合运用,用宏观方法构成宏观动力学,用微观方法则构成微观动力学。

四、物理化学课程的内容和学习方法

物理化学是化工、轻工、石油、冶金、材料、医药、环境、铸造和地质等专业的一门重要基础理论课。对于培养工程技术应用人才的高职高专院校来说,化学热力学和化学动力学应当是物理化学的两个重要内容,是解决生产实践和科学实验中有关化学过程的方向、限度、速率和机理问题所必需的基础知识。因此,热力学基础和化学动力学仍将在物理化学课程中占有相当重要的分量。化学平衡和相平衡是化学热力学原理对化学变化和相变化的具体应用,它们通过研究化学能与热能之间的转化规律解决这两种变化的方向和限度的问题。研究化学现象与电现象之间关系的内容是电化学。物质当其处在两相界面或处于高度分散状态时,将表现出许多特殊的性质,这些现象已被广泛应用于化工、石油、轻纺、生物、制药和环境科学等领域。界面科学和胶体化学将介绍界面现象与分散现象的理论和实践。物理化学课程的上述内容主要涉及宏观领域的变化。近代自然科学的发展驱使物理化学从宏观深入到微观,以便逐步揭示宏观现象的微观本质。

与其他几门基础化学课相比,学生们普遍感到物理化学难学。其实,只要找到正确的学习方法,学好物理化学也是不难的。现针对本课程的特点,提出几点学习方法供读者参考。

(1) 要准确理解基本概念 物理化学涉及很多概念,这些概念都是十分严格的。只有准

确理解其真实含义和数学表达式,了解它们的使用范围才能正确加以应用。

(2) 要区别对待重要公式和一般公式 物理化学的公式比较多,学习时要区别哪些是重要公式,哪些是一般公式。重要公式是需要记住的,对一般公式只需理解它的推导过程,了解公式的适用条件,不要求强记。

(3) 正确对待数学推导 物理化学相对于其他基础化学课来说,要较多地用到数学知识,应当始终明白,数学推导在这里仅仅是一种工具,不是目的。为了得到一个重要公式,一些数学上的演绎是必不可少的。但是,一定不要被推导过程所迷惑。重要的是搞清推导过程所引入的条件,因为这些条件往往就是最终所得公式的适用范围和应用条件,它比起推导过程本身要重要得多。

(4) 认真进行习题演算 如果只阅读教科书而不做习题是学不好物理化学的,演算习题不仅可以帮助学生记住重要公式和熟悉其适用条件,锻炼运用公式的灵活性和技巧,更重要的是可加深对物理化学概念的理解。物理化学的某些概念是很抽象的,单靠文字定义很难理解它的含义。习题演算可以把抽象的概念具体化,而且同一概念可以在不同类型的习题中从多个角度去深入而全面地加以理解。因此,必须重视习题演算这一培养独立思考能力的环节。

(5) 重视物理化学实验 物理化学是理论与实验并重的学科。实验课可进一步培养学生分析、解决实际问题的能力和独立工作能力,进而加深对抽象理论的理解。有的学校已将物理化学实验单独设课,足见其重要性。

物理化学的学习方法还很多,这里不再赘述。读者可以在学习实践中总结一套适合自身特点的方法。

【阅读材料】

物理化学的发展史

人类有史以来,就有了“冷”与“热”的直觉,但对“热”的本质的认识始于19世纪中叶,在对热与功相互转换的研究中,才对热有了正确的认识,1840~1848年迈耶(J. R. Mayer)和焦耳(J. P. Joule)的实验工作为此做出了贡献,从而为能量守恒定律即热力学第一定律的实质的认识奠定了实验基础。此外,19世纪初叶蒸汽机已在工业中得到广泛应用,1824年法国青年工程师卡诺(S. Carnot)设计一部理想热机,研究了热机效率,即热转化为功的效率问题,为热力学第二定律的建立奠定了实验基础。此后(1850~1851年)克劳修斯(R. J. E. Clausius)和开尔文(L. Kelvin)分别对热力学第二定律作出了经典表述;1876年吉布斯(J. W. Gibbs)推导出相律,奠定了多相系统的热力学理论基础;1884年范特霍夫(J. H. van't Hoff)创立了稀溶液理论并在化学平衡原理方面做出贡献;1906年能斯特(W. Nernst)发现了热定理进而建立了热力学第三定律。至此已形成了系统的热力学理论。进入20世纪以来化学热力学已发展得十分成熟并在化工生产中得到了广泛应用。如原料的精制、反应条件的确定、产品的分离等无不涉及化学热力学的理论。20世纪60年代以来,计算机技术的发展为热力学数据库的建立以及复杂的热力学计算提供了极为有利的工具,并为热力学更为广泛的应用创造了条件。20世纪中叶开始,热力学从平衡态向非平衡态迅速发展,逐步形成了非平衡态热力学理论。

化学动力学的研究始于19世纪后半叶。19世纪60年代,古德堡(C. M. Guldberg)和瓦格(P. Waage)首先提出浓度对反应速率影响的规律,即质量作用定律;1889年阿伦尼

乌斯 (S. Arrhenius) 提出活化分子和活化能的概念及著名的温度对反应速率影响规律的阿伦尼乌斯方程, 从而构成了宏观反应动力学的内容。这期间, 化学动力学规律的研究主要依靠实验结果。20 世纪初化学动力学的研究开始深入到微观领域, 1916~1918 年, 路易新 (W. C. M. Lewis) 提出了关于元反应的速率理论——简单碰撞理论; 1930~1935 年, 在量子力学建立之后, 艾琳 (H. Exring)、鲍兰义 (M. Polanyi) 等提出了元反应的活化配合物理论, 试图利用反应物分子的微观性质, 从理论上直接计算反应速率。20 世纪 60 年代, 由于计算机技术的发展以及分子束实验技术的开发, 把反应速率理论的研究推向分子水平, 发展成为微观反应动力学 (或称分子反应动态学)。20 世纪 90 年代, 快速反应的测定有了巨大的突破, 飞秒 (10^{-15}s) 化学取得了实际成果。但总的来说, 化学动力学理论的发展与解决实际问题的需要仍有较大的差距, 远不如热力学理论那样成熟, 有待进一步发展。

物质在通常条件下, 以气、液、固等聚集状态存在, 当一种以上聚集态共存时, 则在不同聚集态 (相) 间形成界面层, 它是两相之间的厚度约为几个分子大小的一薄层。由于界面上不对称力场的存在, 产生了与本体相不同的许多新的性质——界面性质。若将物质分散成细小微粒构成高度分散的物质系统或将一种物质分散在另一种物质之中形成非均相的分散系统, 则会产生许多界面现象。如, 日常生活中人们接触到的晨光、晚霞, 彩虹、闪电, 乌云、白雾, 雨露、冰雹, 蓝天、碧海, 冰山、雪地, 沙漠、草原, 黄水、绿洲等自然现象和景观以及生产实践和科学实验中常遇到的纺织品的染色、防止粉尘爆炸、灌水采油、浮选矿石、防毒面具防毒、固体催化剂加速反应、隐形飞机表层的纳米材料涂层、分子筛和膜分离技术等, 这些应用技术都与界面性质及分散性质有关。总之, 有关界面性质和分散性质的理论与实践被广泛地应用于石油工业、化学工业、轻工业、农业、农学、医学、生物学、催化化学、海洋学、水利学、矿冶以及环境科学等多种领域。现代物理化学已从体相向表面相迅速发展。