

# 物质结构

上册

徐光宪编著

694

人民教育出版社

高等学校試用教科书



物 質 結 构

WUZHI JIEGOU

上 册

徐 光 宪 編 著

人民教育出版社

本书是编者根据他在 1959 年编写，由高教出版社出版的“物质结构”一书，对绪论、第一章、第二章改写而成的。原书为一册，现分上、下册出版。上册包括有：绪论，量子力学基础和简单原子的状态函数，原子的电子层结构和原子光谱，电子衍射法和分子中原子的空间排布，分子的电性和磁性，化学键理论（双原子分子结构）等六章。下册共四章：化学键理论（多原子分子结构），分子间和分子内键与键间的作用力，分子光谱（双原子分子光谱，多原子分子光谱）。

本书可作为综合大学及高等师范学校化学各专业“物质结构”课程的教材。

本书原有附录——本书各章学习目的和要求——因分册的关系改排在上册前面。

## 物 质 结 构

上 册

徐 光 瑞 编 著

北京市书刊出版业营业登记证字第 2 号

人民教育出版社出版（北京景山东街）

人民教育印刷厂印装

新华书店北京发行所发行

各地新华书店经售

统一书名号：13010·961 开本 800×1108 1/16 印数 911/16 档次 1  
字数 2442000 印数 25,001—40,000 定价(6)元 0.95  
1959年12月合订本第1版 (7,000 册)  
1961年8月第1版 1962年3月北京第3次印刷

## 序 言

教育部曾委托吉林大学唐敖庆同志，厦门大学卢嘉錫同志，复旦大学吳征鎧同志和北京大学徐光宪同志根据 1956 年审定的綜合大学化学系的物质结构教学大纲编写教材，并曾在 1957 年暑假完成了初稿的一半。当时合编的初稿内容要比教学大纲规定的分量多得多，并且包括了結晶化学和量子力学，实际上是参考书的性质，字数估计将近百万，但以后总抽不出一个共同的时间来完成初稿的另一半，而各方面又等待着早日出版一本簡明教材；因此以北京大学过去六年来所用的物质结构讲义为基础，由徐光宪同志負責赵深同志协助，进行整理修訂，編成本书以供目前的需要。

在本书編成后，唐敖庆同志曾在百忙中抽出时间审閱全稿，提出了好些宝贵意見，作者深表感謝。

本书匆促写成，且限于作者的学識和水平，书中一定有許多缺点、遗漏、甚至錯誤，希望讀者随时指正。

編者

1959年6月1日

# 上册目录

序言.....	viii
本书各章学习目的和要求.....	1
<b>第一章 緒論 .....</b>	<b>4</b>
§ 1-1. 物質結構科學的內容、發展、目的和學習方法.....	4
1. 物質結構課程的內容.....	4
2. 物質結構科學的發展.....	4
3. 學習物質結構的目的.....	6
4. 學習物質結構的方法.....	7
§ 1-2. 物質和運動.....	9
1. 物質和運動的不可分割性原理.....	9
2. 物質及其運動的永恒性原理的自然科學基礎.....	11
3. 物質運動的各種形態.....	13
4. 物質的兩種基本形態.....	17
習題.....	18
問題.....	19
<b>第二章 量子力学基礎和氫原子的狀態函數 .....</b>	<b>20</b>
§ 2-1. 从經典力学到舊量子論.....	20
1. 經典力学的適用範圍.....	20
2. 經典力学向高速度領域的推廣——導向相對論力學.....	21
3. 經典力学向微觀領域的推廣——導向量子論.....	22
4. 光能的不連續性——光电效應和光子學說.....	23
5. 康普頓效應.....	26
6. 原子能量的不連續性——氫原子光譜和波爾理論.....	28
7. 舊量子論的衰落.....	32
§ 2-2. 从舊量子論到量子力学.....	32
1. 關於光的本性的形而上學觀點的破壞.....	33
2. 關於光的本性的辯證唯物主義觀點的建立.....	34
3. 電子和其他實物微粒的波動性.....	38
4. 量子力学的基本方程——薛定諤方程.....	43

§ 2-3. 氢原子或类氢离子的状态函数.....	47
1. 氢原子或类氢离子的薛定谔方程.....	47
2. 氢原子或类氢离子的基本.....	48
3. 表示电子云几率分布的几种方法.....	50
4. 氢原子或类氢离子的其他 s 态.....	52
*5. 氢原子或类氢离子的薛定谔方程的一般解.....	53
6. 氢原子或类氢离子的电子云分布.....	57
*§ 2-4. 量子力学的进一步讨论.....	67
1. 薛定谔方程的算符表示式.....	67
2. 用量子力学计算电子绕核运动的角动量.....	69
3. 多质点体系的薛定谔方程.....	74
4. 包含时间的薛定谔方程.....	75
5. 测不准关系式.....	75
参考书刊.....	77
习题.....	77
问题.....	78
<b>第三章 原子的电子层结构和原子光谱.....</b>	<b>79</b>
§ 3-1. 原子的电子能级——屏蔽效应和有效核电荷.....	79
§ 3-2. 核外电子的配布——电子自旋和保里原理.....	83
§ 3-3. 离子的电子层结构.....	91
*§ 3-4. 无机化合物的颜色和离子的电子层结构等因素的关系.....	95
1. 颜色的产生.....	95
2. 离子的颜色和离子的电子结构间的关系.....	96
3. 离子的极化和无机化合物的颜色的关系.....	97
4. 組合物形成对颜色的影响.....	99
5. 无机化合物的颜色与温度的关系.....	99
6. 分散度对颜色的影响.....	99
*§ 3-5. 离子极化和无机化合物的溶解度.....	100
*§ 3-6. 原子的电离能，电子亲合能和电负性.....	103
*§ 3-7. 电离能的近似计算法——改进的斯来脱(Slater)法.....	107
*§ 3-8. 原子的量子数、能级图和原子光谱.....	101
1. 单电子原子的量子数.....	110
2. 单电子原子的能量图。塞曼效应.....	113
3. 多电子原子的量子数.....	115
4. 原子光谱项.....	116

5. 原子能级图和洪特规则	120
*§ 3-9. 原子光谱及其应用	120
1. 碱金属原子的光谱	120
2. 原子光谱的超精细结构	125
3. 研究原子光谱的仪器——摄谱仪	128
4. 原子光谱的应用——光谱分析	129
参考书刊	130
习题	131
問題	132
<b>第四章 电子衍射法和分子中原子的空间分布</b>	133
§ 4-1. X射线衍射和电子衍射的比較	133
§ 4-2. 气体电子衍射法的实验装置	134
§ 4-3. 衍射强度公式及其应用	136
1. Wierl 的气体衍射强度公式	136
2. 同核双原子分子的衍射强度公式的证明	137
3. 衍射强度公式的应用	139
§ 4-4. 电子衍射法在测定分子构型方面的应用	142
§ 4-5. 化学键的键长和共价半径	144
参考书刊	146
习题	146
問題	147
<b>第五章 分子的电性和磁性</b>	148
§ 5-1. 分子的电性	148
1. 电介质的介电常数	148
2. 偶极矩和极化率	149
3. 极化率与介电常数间的关系	151
4. 偶极矩测定法的原理	153
5. 偶极矩与分子结构	155
6. 偶极矩的应用	162
7. 从分子折射度与分子结构	166
§ 5-2. 分子的磁性	170
1. 磁化率	170
2. 磁化率的测量	171
3. 分子的磁矩	172

4. 分子磁矩与磁化率.....	173
5. 顺磁磁化率与分子结构.....	176
6. 反磁磁化率与分子结构.....	178
*§ 5-3. 核磁共振与顺磁共振.....	181
1. 核磁矩.....	181
2. 拉比的分子束核磁共振法.....	183
3. 核磁共振法的原理和实验装置.....	185
4. 核磁共振在化学中的应用.....	187
5. 顺磁共振法测定顺磁磁化率的原理.....	190
6. 顺磁共振谱的超精细结构及其应用.....	193
参考书刊.....	197
习题和问题.....	198
<b>第六章 化学键理论(一)双原子分子结构.....</b>	<b>200</b>
§ 6-1. 一般介绍.....	200
1. 化学键理论的历史发展.....	200
2. 柏尔齐留斯的二元学说.....	200
3. 杜马的取代学说和热拉尔的类型论.....	201
4. 开库勒和古柏的结构理论.....	202
5. 布特列洛夫的化学结构理论.....	204
6. 化学结构理论的唯物主义内容.....	206
7. 化学结构理论的发展.....	207
8. 雷尔纳的配位理论.....	210
9. 原子价的电子理论.....	211
10. 现代的化学键理论.....	212
11. 化学键的定义和它的各种类型.....	213
12. 本章和第七章各节内容的简单介绍.....	216
*§ 6-2. 离子键的静电吸引理论.....	217
1. 离子键的形成.....	217
2. 离子键与共价键的区别.....	220
§ 6-3. 氢分子离子的结构.....	227
1. 氢分子离子的薛定谔方程式.....	227
2. 薛定谔方程式的近似解法——变分法.....	230
3. 变分函数的选择.....	231
4. 氢分子离子的两种状态.....	232
5. 氢分子离子的能量曲线.....	235
6. 氢分子离子的状态函数.....	237

*7. 氢分子离子的高級近似處理法和精确解法.....	239
*8. 积分 $S_{ab}$ , $H_{ab}$ 和 $H_{ab}$ 的意义.....	240
*§ 6-4. 氢分子的結構 .....	245
1. 氢分子的薛定諤方程式和海特勒-倫敦解法.....	245
2. 电子的等同性和保里原理.....	251
3. 王守竟法和其他高級近似解法.....	254
4. 分子軌道法.....	256
*§ 6-5. 共价鍵理論——电子配对法和分子軌道法 .....	256
1. 电子配对法的要点.....	257
2. 分子軌道法的基本假設.....	259
3. 原子軌道的線性組合.....	263
4. $\sigma$ 軌道与 $\sigma$ 鍵.....	267
5. $\pi$ 軌道与 $\pi$ 鍵.....	270
6. 分子軌道的能量次序.....	272
*7. 表示分子軌道的两种符号.....	273
*8. 分子軌道与原子軌道的相关图.....	276
*§ 6-6. 典型共价双原子分子的結構 .....	281
1. 总論.....	281
2. 反磁性分子的結構.....	288
3. 顺磁性分子的結構.....	290
- *4. 共价双原子分子結構的总结.....	295
参考书刊 .....	301
問題 .....	301

# 本书各章学习目的和要求

这里提出来的学习目的和要求，是对授課 75 学时左右的数学計劃安排的。①如授課为 50 学时左右，则各章要求应适当降低，并将带有 \* 号部分取消。又这里提出来的目的和要求和学时数不尽全面恰当，且各校具体情况不同，仅供教师参考。

## 第一章 緒論

1. 明确学习物质结构的目的和方法。
2. 正确认识物质结构科学的发展与生产实践及阶级斗争的关系。
3. 正确理解质能联系定律和质能守恒定律，能够掌握对唯能论的错误进行分析批判的要点。
4. 通过本章的学习体会到自然科学工作者学习毛泽东思想，树立辩证唯物主义世界观的重要性。

## 第二章 量子力学基础和氢原子的状态函数

1. 正确掌握关于光的本性的辩证唯物主义观点——微粒性和波动性的矛盾统一，电子波动性的实验根据，实物和光的波粒二象性的区别和联系。
- \*2. 了解量子力学的实验基础，薛定谔方程的物理意义及得来的线索。
3. 了解量子力学处理氢原子的主要结果——主量子数，角量子数，磁量子数的物理意义，以及  $s$ 、 $p$  和  $d$  电子云的径向分布和空间分布。

## 第三章 原子的电子层结构和电子光谱

1. 熟练掌握核外电子的排布。
2. 了解核外电子的排布与无机化合物的性能的关系。

① 本书目录中打有 \* 号的各章节，在学时为 75 左右的課程中可不讲授，只供参考之用。目的和要求中打有 \* 号的部分在学时为 50 左右的課程中可删去。

3. 了解电离能, 电子亲合能, 电负性, \*原子光谱项, \*塞曼效应及原子光谱的应用。

## 第四章 电子衍射法和分子中原子的空间分布

1. 了解电子衍射法的原理, 实验装置及其应用范围。
2. 了解电子衍射法与x射线衍射法的异同。

## 第五章 分子的电性和磁性

1. 了解克劳修斯-莫索第-德拜方程的意义。
2. 了解偶极矩的测定方法, 偶极矩矢量加和的四面体规律以及偶极矩在研究分子结构中的应用。
3. 了解磁力天平的原理和应用, 了解顺磁磁化率与不成对电子的关系, 反磁磁化率与分子结构的关系。
- \*4. 了解顺磁共振与核磁共振的原理及应用。

## 第六章 双原子分子结构

- \*1. 了解变分法处理  $H_1^+$  和  $H_2$  结构问题的方法概要。
2. 了解电子配对法和分子轨道法的要点。
3. 了解σ轨道和π轨道的特点。
4. 了解  $O_2$ 、 $N_2$ 、 $CO$ 、 $NO$  等分子的结构。

## 第七章 多原子分子结构

1. 了解杂化轨道理论的基本要点, 成键能力和夹角公式, 熟悉  $sp^3$ ,  $sp^2$ ,  $sp$ ,  $dsp^2$  和  $d^2sp^2$  等杂化轨道的几何构型。
- \*2. 能够灵活分析一般分子中采用杂化轨道的情况。
3. 了解大π键的生成条件, 大π键的各种类型, \*能够灵活分析一般分子中有否大π键的情况, 了解共轭效应及其应用。掌握批判共振论的要点。
4. 了解过渡元素的络合物结构, 共价配键和电价配键的区别, 及其对络离子的几何构型氧化还原性能等的影响。
- \*5. 了解  $d-p$  配键和无机含氧酸强度的规律性。

6. 了解  $B_2H_6$  的结构。

## 第八章 范德华引力和氢键

1. 了解范德华引力的特性，了解静电力、诱导力、色散力的意义和它们的大小与分子偶极矩及极化率的关系，能够用范德华引力初步说明某些化合物的沸点和熔点的高低及溶解度的大小。
2. 了解氢键的本质，氢键的各种类型。能够初步分析氢键的形成对于化合物的物理性质和化学性质的影响。

## 第九章 双原子分子光谱

1. 了解分子光谱的一般情况，如紫外光谱相应于电子光谱，近红外光谱相应于振动光谱等。
2. 了解用刚性转动模型处理转动光谱的步骤和结果及偏差原因，\*能够根据实验数据求出双原子分子的键长。
3. 了解用谐振子与\*非谐振子模型处理振动光谱的结果及应用，\*能够根据实验数据求出分子的振动频率  $\nu$ 、弹力常数  $k$ 、非谐系数  $x$ ，并估计双原子分子的高离能。
- \*4. 了解振动转动光谱的情况一般构造，P 支、Q 支和 R 支的意义。
- \*5. 大致了解综合散射光谱的特性及其与吸收光谱的区别。

## 第十章 多原子分子光谱

1. 了解比尔-兰勃脱定律及第 510 页表中名词的意义。
2. 了解光电式紫外及可见分光光度仪的简单构造，紫外及可见吸收光谱与生色基和助色基的关系，分光光度法在分析化学和结构测定方面的应用。
3. 了解单光束棱镜近外光谱仪的简单构造，掌握特徵振动频率与红外光谱的关系，熟悉红外光谱在分析化学和结构测定方面的应用。
- \*4. 了解综合散射光谱仪的简单构造，了解综合散射光谱与红外光谱在原理和应用方面的异同。

# 第一章 緒論

## § 1-1 物質結構科學的內容、發展、目的和學習方法

1. 物質結構課程的內容 物質結構是研究物質的微觀結構及結構和性能的關係的科學。物質結構課程內容包括量子力學基礎、原子結構、分子結構和晶體結構四部分<sup>①</sup>。本書內容只包括前三部分，其中第一章緒論，第二章首先介紹微觀物質的運動規律——量子力學的基礎。第三章討論原子的電子層結構及其和無機化合物的性能之間的關係。原子核的結構將在放射化學中講授，不在本課程的範圍之內。第四、五、九、十章討論研究分子結構的實驗方法，例如測定分子的幾何構型、分子中原子間的距離和夾角、原子和分子的能級、原子和分子的電性、磁性和光學性質等。第六、七、八章介紹關於分子結構和分子間作用力的現代理論——化學鍵理論和范德華引力。

2. 物質結構科學的發展 物質結構的概念起源于古代人們對於自然的來源及其構成的猜想，那時候人們提出了這樣的問題：宇宙間的萬物是由什么东西構成的？宇宙間的萬物是連續而沒有空隙的呢，還是不連續而有空隙的？

最早嘗試回答第一個問題的是我國的陰陽五行之說。所謂五行就是說宇宙萬物是由金木水火土五種元素或屬性經過錯綜複雜的互相結合而構成的。稍後希臘學者提出了宇宙是由火氣水土四元素構成的學說。

對於第二個問題的回答有二派不同的意見。一派意見認為萬物內部沒有空隙，是連續的，可以無限止地分割下去。例如我國戰國時代的哲學家惠施（公元前四世紀）就有這樣的看法，他說一尺長的棍子，日取

① 液體結構部分因內容尚未成熟，暫不列入。

其半，万世也取不完。另一派的意見認為物质不能无限制地分割下去。代表这一派意見的是我国偉大的哲学家墨翟（公元前第四世紀）。他認為物质分割下去，有一最小的单位，叫做“端”，到了“端”就不能再分割下去了。希腊哲学家德莫克利特（Democritus，公元前第四世紀）也提出类似的学說。这就是古代朴素的原子論。

原子論的提出冒犯了神权和統治阶级的利益，因而受到了宗教和唯心論哲学家的攻击和非难，在长达十几个世紀的期间，一直受到压抑。直到十八、十九世紀，由于冶金工业、无机和有机化学工业的发展，人們要了解化学变化的定量关系，发现了质量守恒定律、能量守恒定律、定比定律、倍比定律和阿佛加德罗定律等。为了說明这些定律，道尔頓就在十九世紀提出了著名的原子論。在此时期，宗教和唯心論哲学家为了他們本身的阶级利益，仍然否定原子的存在，散布着原子看不见摸不着的不可知論思想。

到了十九世紀末叶和二十世紀初期，由于电气工业的发展促进了关于电的現象的研究，发现了电子、X射線和放射性，不但証实了原子的存在，而且還知道原子有复杂的結構，才使原子論的基础牢固地建立起来。

但是为統治阶级服务的唯心論哲学家，其中也包括某些自然科学家，是不甘心的<sup>①</sup>。他們竭力歪曲二十世紀初关于物质结构方面的許多新发现，例如把質能联系定律曲解为质量变为能量，把正负电子对变为γ光子的发现曲解为“物质化为烏有了”，余下来的只有脱离物质的“能”。既然可以有脱离物质的“能”，就不难想象有脱离物质的“絕對精神”或上帝，从而为唯心主义大开方便之門，为宗教神权作义务掩护。

学习物质结构課程，在培养我們的辯証唯物主义世界觀方面起着重要的作用，因为它以具体的内容充实着辯証唯物主义关于物质与运动的不可分割性，关于物质及其运动形态的多样性，关于物质及其运动的永恒性，和物质在所有运动形态的完全可以认识性等基本原理。我

<sup>①</sup> 例如馬赫主义的創始人馬赫和阿芬那留斯，德国的化学家和哲学家、“唯能論”的創始人奧斯德瓦尔德，以及法国的物理学家、馬赫主义者杜恒等。

們在學習過程中應該對形形色色的唯心觀點和機械論觀點給予揭露和批判，從而培養自己的辯證唯物主義世界觀。

其次，從物質結構科學的發展歷史可以看出，它是以生產的發展為前提的，同時它的发展又大大推動了生產的發展。例如十九世紀中有机化學工業有了很大的發展，人們從生產實踐中總結出無數經驗和規律，因而迫切要求理論上的總結和提高。波特列洛夫的化學結構理論就是在這樣的基础上產生和發展起來的。結構理論的發展反過來大大推動了合成有機工業的發展。現在我們已經能夠合成人造橡膠、人造染料、人造香料、人造維生素、人造藥劑、人造燃料、人造油脂、人造纖維、以及其他許多合成制品。除了合成天然產品以外，我們已經提出更進一步的要求，即發明自然界沒有的、性質預先加以規定的新產品，~~如~~如解除人類各種疾病痛苦的特效藥，最有效率的肥料，刺激植物生長的促進劑，噴氣機和火箭的高能燃料，耐高溫的塑料，耐低溫的潤滑油，性能良好的半導體，選擇性好的離子交換劑、萃取劑和分析試劑等。

**3. 學習物質結構的目的** 物質結構課程是在學生學過高等數學、普通物理、無機化學、分析化學和有機化學等課程的基礎上，進一步講授微觀物質的運動規律——量子力學基礎，原子結構、分子結構和晶體結構，研究物質結構的現代實驗方法，以及物質結構和性能之間的關係。其目的在於配合其他課程共同總結解釋化學現象的規律，如化合物的酸鹼性、顏色、溶解度、氧化還原性能以及化學反應性能等，培養學生具有牢固的基本理論知識；同時使學生掌握研究物質結構的現代實驗方法的基本原理和適用範圍。例如分子光譜和分光光度法可用于絡合物的研究、有機化合物的功能基的測定、分子組成的定性和定量分析，原子光譜可用于鋼鐵分析、礦石分析，螢光光譜可用于半導體或其他超純物質中杂质的分析，順磁共振可用于自由基及高分子聚合反應機構的研究，電子衍射法可用于催化劑表面結構的研究等。這樣可以為進一步學習放射化學、高分子化學及某些專門化課程（例如有機結構理論、半導體化學、絡合物化學、希有元素化學、儀器分析、輻射化學、有機催化理論等課程）準備好必要的理論基礎。

其次，物質結構課程應該在培养辯証唯物主義的世界觀方面起一定的作用，這在前節中已詳述。

最後，學習和研究物質結構科學的目的是為了利用物質結構的知識幫助解決具有巨大國民經濟意義的化學問題，推動生產的發展，例如研究半導體的性能和結構的關係，為合成廉價的無機和有機半導體找出途徑，研究無機高分子的性能和結構的關係，為合成耐高溫和低溫的特殊材料提供線索，研究作為高能燃料的要求，以及哪些類化合物能滿足這些要求，可以解決火箭中的燃料問題等。

**4. 學習物質結構的方法** 學習物質結構也和學習其他課程一樣，在處理某一問題時首先要注意問題是怎樣提出來的，解決問題可用什麼方法，根據什麼實驗或理論，問題解決以後得到什麼結果，有什麼實踐意義，然后再去研究中間的推導過程。例如要掌握氫原子的量子力學處理問題，首先注意氫原子的薛定諤方程是怎樣提出來的，它的根據是什麼，然後抓主要結果，以及這些結果在研究原子和分子結構問題中的重要性。這樣就能對問題的全局有所了解，在自己的頭腦中就有了關於這一問題的輪廓或骨架。有了骨架以後，然后再去掌握中間的具體的數學步驟，好象在骨架上長上血肉。退一步講，即使數學處理暫時不懂，主要的骨架已經抓住了，繼續學習以後的章節就沒有問題。反之如果不先弄清問題的來龍去脈，不是站在高處先把全局看一看，就容易迷失在繁複的數學式子之中，不知道這些數學式子究竟要解決什麼問題。即使一步步地跟下去，也只能知其然而不知其所以然，好象沒有骨架，使血肉無所依附；同時也可能在一個數學步驟上發生困難，使整個章節學不下去。

學了一個章節，抓住了它的骨架以後，在學習第二章節時，一定要把這兩個章節的骨架用一條紅線彼此聯繫起來，找出它們之間的共同性和差異性。例如，學習分子光譜時應與原子光譜比較研究。原子光譜與分子光譜都是由於原子或分子的運動能級改變而產生的。分子與原子的不同是在於原子只有一個原子核，而分子有多个原子核，所以在

原子中只有电子相对子原子核的运动<sup>①</sup>，而在分子中除了电子相对于原子核的运动以外，还有各原子核之間的相对运动即轉動和振动。因此，原子光譜只是原子的电子光譜，而分子光譜則除电子光譜外，还有振动光譜和轉動光譜，这种把新学到的知識和已掌握的知識对比起来学习的方法，最便于巩固記憶和深入了解，有时候且能从中找出矛盾，发现未研究过的領域，推动科学的发展。

在学习中要随时注意實踐—理論—實踐的公式，任何理論都有它的實踐基础，但有时候在教材或講堂中为了叙述的簡洁，沒有——提出来。同时任何有价值的理論也一定有指导實踐的意义，但不一定对某一具体生产过程起直接指导作用，也可能某一理論的實踐意义暂时还看不出来。从物质结构理論发展的过程可以說明人类認識客观世界的規律是由淺入深，由低級到高級，由片面到全面，由感性到理性，由實踐到理論又回到實踐的反复过程。例如原子論的发展就經過下列各阶段：(1)古代朴素的原子論，(2)17世紀的原子論，(3)18世紀罗蒙諾索夫的原子—分子論，(4)19世紀道爾頓的分子論，(5)卢瑟福的原子有核模型，(6)波尔的原子模型，(7)量子力学的原子結構理論。其中每后一阶段都比前一阶段的認識要更深入一层，同时每一个新的理論的出現，都是前一理論在實踐的考驗中发现矛盾，解决矛盾的过程。例如卢瑟福的原子有核模型是建筑在电子的发现， $\alpha$ 粒子的散射等实验的基础之上的。但这一模型不能說明从原子光譜获得的大量实验結果，波尔的模型就是为了解决这一矛盾而提出来的，但波尔模型也还有許多缺点，直到最新的量子力学理論建立起来，才能满意地解釋大部分已知的实验事实。由此可見，由于實踐的发展，認識的深化，今人一定能胜过前人，而后人一定胜过今人。所以，一方面要認識到現有理論决不是完善无缺的，它还有待于进一步发展与改进，另一方面也要認識到現有理

① 原子核本身的运动和整个原子的平移运动都与原子光譜无关。