

高等学校教材



大学化学

全克勤 张长水 主编

李 平 郑英丽 副主编

时清亮 主审

DAXUE
HUAXUE

200

250

200

150

250 ml

100

50



化学工业出版社

河南科技大学教材出版基金资助

高等学校教材

大 学 化 学

全克勤	张长水	主 编
李 平	郑英丽	副主编
时清亮		主 审



化学工业出版社

· 北 京 ·

本书是根据大学化学课程的性质和教学目标编写的,编者重视理论联系实际,突出了化学知识的科普性和应用性。书中介绍了化学学科的基本理论知识,选编了化学电源、环境、材料、生活等人们普遍关注的重要学科相关的化学知识,并吸收了一些化学在工程技术中应用的新成就。通过本书的学习,使非化学化工类各专业学生对化学学科的特点及其重要作用有一概括性的了解,从而达到开阔视野、提高科学素养和解决问题能力的目的。

本书可作为高等学校非化学化工类各专业的大学化学教材,也可供工程技术人员参考使用。

图书在版编目(CIP)数据

大学化学/仝克勤,张长水主编. —北京:化学工业出版社, 2015. 8

高等学校教材

ISBN 978-7-122-24277-8

I. ①大… II. ①仝…②张… III. ①化学-高等学校-教材 IV. ①O6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 128545 号

责任编辑:宋林青

文字编辑:李锦侠

责任校对:王素芹

装帧设计:史利平

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印 装:大厂聚鑫印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张13 彩插1 字数320千字 2015年9月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价: 26.00 元

版权所有 违者必究

根据国家对 21 世纪工程技术人才培养的需要, 针对“大学化学”的课程教学目标和非化学化工类专业学生学习化学的特点, 结合该课程教学学时少、内容涉及专业面广的具体情况, 汇集编者多年的教学经验, 我们编写了这本《大学化学》教材, 供非化学化工类各专业使用。

本书具有以下特点:

① 简明扼要地介绍了化学基本理论和基本概念, 简化了相关化学计算, 增加了材料、环境、能源和生命等学科的内容, 充实了应用性和科普性化学知识, 使学生了解化学与其他学科相互交叉渗透的关系及化学在科技进步和社会发展中的作用。

② 本书将化学基础理论集中在第 1、2、3、4 等章节中讲述, 自成系统, 相关的工程技术专题紧跟其后, 形成化学理论和专业实际的有机结合, 保持了化学知识的系统性和逻辑性。

③ 在内容编排上, 增加科技新成果, 以开拓学生视野、启发创新。

④ 本书有较大的专业覆盖面, 以供不同专业选讲。

⑤ 采用我国法定计量单位与国际纯粹与应用化学联合会 (IUPAC) 的有关规定, 选录了较新的数据和常数。

本书由仝克勤和张长水任主编, 李平、郑英丽任副主编, 时清亮任主审。第 1 章、第 2 章由李平编写、第 3 章、第 7 章由张长水编写, 绪论、第 4 章、附录等由仝克勤编写, 第 5 章、第 6 章由郑英丽编写。全书由时清亮详细审阅并提出许多宝贵的修改意见, 仝克勤、张长水通读并定稿。本书在编写过程中得到了河南科技大学教务处和化工与制药学院的大力支持和帮助, 在此表示衷心的感谢。

本书参考了同类教材和相关文献中的有关内容, 在此向有关作者表示深切的谢意。

由于编者的学识和水平有限, 书中难免有疏漏和不足之处, 敬请同行批评指正, 欢迎读者多提宝贵意见和建议。

编 者

2015 年 6 月于洛阳

绪 论	1
0.1 化学与人类社会进步	1
0.2 大学化学课程的内容	2
0.3 学习大学化学的意义	3
思考题	4
第 1 章 化学反应的基本原理	5
1.1 化学反应基本概述	5
1.1.1 物质的量	5
1.1.2 化学反应进度	6
1.1.3 系统和环境	7
1.1.4 相	7
1.1.5 状态函数	8
1.1.6 热力学能	8
1.2 恒压热效应与焓变	9
1.2.1 恒压热效应	9
1.2.2 焓与焓变	10
1.2.3 反应的标准摩尔焓变	11
1.2.4 反应的标准摩尔焓变的计算	12
1.3 化学反应的方向	13
1.3.1 自发过程与非自发过程	13
1.3.2 自发反应方向的判断标准	13
1.3.3 熵和熵变	14
1.3.4 吉布斯函数与吉布斯函数变	15
1.3.5 过程自发方向的判断	16
1.3.6 吉布斯函数变的计算	17
1.4 化学平衡	20
1.4.1 化学平衡和平衡常数	20
1.4.2 化学平衡的移动	23
1.5 化学反应速率	24
1.5.1 浓度的影响和反应级数	25
1.5.2 温度对反应速率的影响和阿仑尼乌斯公式	26
1.5.3 活化能	27

1.5.4 催化剂对反应速率的影响	28
思考题	29
习题	30

第2章 溶液 34

2.1 溶液的通性	34
2.1.1 溶液的蒸气压下降	34
2.1.2 溶液的沸点升高和凝固点降低	35
2.1.3 渗透压	35
2.1.4 稀溶液的依数性	36
2.2 弱电解质的解离平衡	37
2.2.1 酸碱概念	37
2.2.2 弱酸、弱碱的解离平衡	38
2.2.3 缓冲溶液和 pH 值的控制	41
2.3 难溶电解质的多相离子平衡	43
2.3.1 溶度积	43
2.3.2 溶度积规则	44
2.3.3 溶度积规则的应用	44
2.4 配离子的解离平衡	47
2.4.1 配位化合物	47
2.4.2 配离子的解离平衡	47
2.5 表面活性剂	48
2.5.1 表面现象与表面活性剂	48
2.5.2 表面活性剂的特点和分类	49
2.5.3 表面活性剂的作用原理	50
2.5.4 表面活性剂的功能	51
2.5.5 表面活性剂的应用	53
思考题	54
习题	55

第3章 氧化还原反应与化学电源 59

3.1 氧化还原反应	59
3.1.1 氧化数	59
3.1.2 氧化还原电对	60
3.2 氧化还原反应的能量转化	60
3.2.1 氧化还原反应及其能量转化	60
3.2.2 原电池	60
3.3 电极电势	62
3.3.1 双电层理论	62
3.3.2 标准电极电势	62

3.3.3 影响电极电势的因素	64
3.4 电极电势的应用	66
3.4.1 比较氧化剂和还原剂的相对强弱	66
3.4.2 计算原电池的电动势和氧化还原反应的吉布斯函数变	66
3.4.3 判断氧化还原反应自发进行的方向	67
3.4.4 衡量氧化还原反应进行的程度	68
3.5 化学电源	69
3.5.1 干电池	70
3.5.2 蓄电池	71
3.5.3 燃料电池	73
思考题	75
习题	75

第4章 物质结构基础..... 77

4.1 核外电子运动的特性	77
4.1.1 氢原子光谱和玻尔理论	77
4.1.2 微观粒子的波粒二象性	78
4.2 核外电子运动状态的近代描述	78
4.2.1 波函数和原子轨道	78
4.2.2 电子云	80
4.2.3 四个量子数	81
4.3 原子核外电子结构	83
4.3.1 原子轨道的能级	83
4.3.2 核外电子分布原理	84
4.3.3 核外电子分布式和价电子层分布式	85
4.4 原子电子层结构与元素周期表的关系	87
4.4.1 原子的电子层结构与周期数	87
4.4.2 原子的电子层结构与族数	88
4.4.3 原子的电子层结构与元素分区	88
4.5 原子结构与元素性质的关系	88
4.5.1 原子半径	89
4.5.2 电离能和电子亲和能	90
4.5.3 元素的金属性和非金属性与元素的电负性	91
4.5.4 元素的氧化值	92
4.6 化学键	92
4.6.1 离子键	92
4.6.2 共价键	94
4.6.3 杂化轨道和分子结构	96
4.7 分子间力与氢键	99
4.7.1 分子的极性和分子的极化	99
4.7.2 分子间力	100

4.7.3 氢键	102
4.7.4 分子间作用力对物质性质的影响	102
4.8 晶体结构简介	103
4.8.1 晶体的特征	103
4.8.2 晶体的基本类型	104
思考题	107
习题	108

第5章 环境的化学污染与保护 111

5.1 大气污染与保护	111
5.1.1 大气圈的结构与组成	111
5.1.2 大气污染源与一次污染	112
5.1.3 二次污染与四大环境问题	115
5.1.4 大气污染的防治	118
5.2 水体污染及保护	119
5.2.1 水中的污染物	119
5.2.2 水体污染的控制与治理	122
5.3 土壤污染与保护	123
5.3.1 土壤污染	123
5.3.2 土壤污染的防治	124
5.4 绿色化学	125
5.4.1 绿色化学防止污染的基本原则	126
5.4.2 原子经济反应	126
5.4.3 绿色化学的研究内容	126
5.4.4 绿色化学研究实例	127
思考题	130
习题	130

第6章 化学与材料 132

6.1 概述	132
6.2 金属材料	132
6.2.1 金属单质	133
6.2.2 合金	133
6.3 无机非金属材料	135
6.3.1 传统的无机材料	136
6.3.2 先进的无机材料	138
6.4 有机高分子材料	140
6.4.1 高分子化合物基本概念	140
6.4.2 塑料	145
6.4.3 合成橡胶	147

6.4.4	合成纤维	148
6.4.5	功能高分子	150
6.4.6	复合材料	154
6.4.7	高分子材料的老化与防老化	156
思考题		157

第7章 化学与生活 158

7.1	生物体中的化合物	158
7.1.1	糖类	158
7.1.2	蛋白质和氨基酸	159
7.1.3	核酸	164
7.2	化学元素与人体健康	167
7.2.1	组成生物体的化学元素	167
7.2.2	几种必需元素的主要功能	169
7.2.3	氧自由基的生理作用及清除	172
7.3	食品营养与科学保健	173
7.3.1	营养素	173
7.3.2	平衡营养与人体健康	175
7.3.3	几种功能性食品简介	176
7.4	食品添加剂	177
7.4.1	防腐剂	177
7.4.2	食品着色剂(食品色素)	177
7.4.3	食品香料	178
7.4.4	鲜味剂	178
7.4.5	抗氧化剂	178
7.4.6	食品营养强化剂	178
7.5	珍爱生命, 远离毒品	179
7.6	化学与安全用药	180
7.6.1	药物的概念	180
7.6.2	常用药物举例	181
7.7	车用油品	183
7.7.1	汽油的使用性能及改良	183
7.7.2	柴油的使用性能及改良	184
7.7.3	燃料油添加剂	186
7.7.4	机油	187
思考题		190
习题		190

附录 191

参考文献 200

绪 论

0.1 化学与人类社会进步

世界是由物质构成的，构成世界的物质永不停息地运动、变化着，变化是一切物质的根本属性。众所周知，每一种生物的发展都经历着生长、壮大、衰老、死亡的自然变化，对于工农业产品、原材料、仪器、设备，也都经历着产生、损耗、老化、报废的变化过程。化学变化是物质的主要变化形式，也是化学学科研究的主要内容。通过化学研究，人类利用化学变化的原理，把空气、煤炭和水制成化肥；利用矿石生产钢铁、铝镁合金等金属材料；从石油中提炼出各种化工原料，并通过化学加工生产出塑料、纤维、橡胶等数以千计的化工产品，为提高人类的生活和生产水平创造了物质条件。

人类在逐步认识物质世界的过程中，建立和发展了自然科学。不同学科在不同层次、不同范畴研究物质和物质的变化。化学学科是在原子、分子的层次上研究物质的组成、结构、性质、来源和化学变化规律的科学，通过化学变化可以使原子重新排列组合，从而制造新分子和具有非凡活性的化合物。因此，在创制和开发新物质、新产品方面，化学的巨大潜力是其他学科难以比拟的。因此，化学被认为是一门“核心的、有用的和具有创造力的科学”。

化学的发展改变着人们的生活。化学合成纤维把人们打扮得更加多姿多彩，使用化学助剂使衣着更加舒适，而且还可以有抗静电、阻燃等功能。在食品加工过程中添加的化学物质——食品添加剂，改善了食品质量和结构，增加了食品的功能和作用，提高了食品的加工效率，人们的饮食不再仅仅是维持生存的初级食品，而是品质更加优良，种类多样，营养丰富，方便易用，从而满足了人们适应快节奏现代化生活的要求。由多种化学物质配合而成的油漆、涂料以及各种新型建筑材料在美化着家庭居室，装扮着城市建筑。由煤化工、石油化工炼制出来的燃料油、润滑油、沥青等，满足了各种交通工具和工业生产的能源动力需求，铺平了一条条公路大道。用于美化生活的各种洗涤剂、化妆品以及其他日常生活用品，如炊具、餐具等无一不是化学的最终产品。尤其是 20 世纪 60 年代以来，彩色荧光粉 $\text{Y}_2\text{O}_2\text{S}:\text{Eu}^{3+}$ （红粉）、 $\text{Y}_2\text{O}_2\text{S}:\text{Tb}^{3+}$ （绿粉）和 $(\text{Ca}, \text{Sr})_{10}(\text{PO}_4)_6\text{Cl}_2:\text{Eu}^{3+}$ （蓝粉）的发现，带动了彩色电视的生产和发展，极大地丰富了人们的现代文化生活。氟氯烃化合物（CFC）的应用推动了电冰箱、空调机的问世，新型制冷剂又成功地取代了 CFC，使环保冰箱和空调机进入家庭。由此可见，没有化学的发展就没有现代生活。

化学不仅对满足人们的现代物质文化生活需求功不可没，而且也推动了科学技术的发展和进步。20 世纪 30 年代， $\text{ZrO}_2(\text{YSZ})$ 以及 $\text{Na}-\beta\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的合成，开发出燃料电池等新类型的化学能源。20 世纪 60 年代发展起来的新型工程材料聚氨酯弹性体，具有耐油、耐磨、耐低温和耐老化等特殊性能，广泛用作飞机、汽车、拖拉机和纺织工业的高速传动部分。1986

年, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7\sim 8}$ 的合成开创了高温超导技术。对信息技术来讲, 化学可谓微电子技术的基础, 以制造集成电路块为例, 从制板、晶体生长、晶体取向附生、扩散, 到蚀刻等, 要运用很多化学处理工序, 才能达到亚微米级精度, 同时还要为之提供超纯试剂、高纯气体、光刻胶等精细化学品。

20 世纪 70 年代, 化学家利用石灰与水的反应原理, 研制成功了“静破碎剂”, 可在短时间内将高山岩石和钢筋混凝土等高大建筑物无声安全拆除。20 世纪 80 年代化学家开发的片状碳酸钙, 创造出中性造纸法新工艺, 不仅使纸张的白度高达 99% 以上, 百年不泛黄, 而且大大提高了纸的不透明度、手感和印刷质量。由于表面活性剂的开发利用, 使肥皂发展成洗涤剂, 不仅方便了衣物的清洗, 也使机械行业清洗由单纯使用汽油擦洗, 改用金属清洗剂喷洗, 大大提高了除油率。化肥、农药、植物生长调节剂等农用化学品的使用, 使农、林、牧、渔业高产增收, 而且大大降低了农民的劳动强度。

20 世纪高分子化学得到迅速发展, 获得了具有高强度、高绝缘性等性能的特种高分子材料, 满足了现代航天、军工、计算机等技术发展对特种材料的需求。具有分离功能的高分子材料被广泛用于电子工业用超纯水的制备, 气、液体混合物的分离, 各种贵金属和稀有金属的富集回收, 血液中有毒物质的离析等。医用高分子材料如假牙、假肢、人造血管、人工心脏、接触眼镜、液体手套、人工心肺机、血液透析机等给病人带来了新的生命和活力。高分子药物的合成, 实现了药物在人体内施药的部位定向和逐步释放的长效性。运载火箭、人造卫星、航天飞机、中继站等大量采用蜂窝结构、泡沫塑料、玻璃钢、高强高模的复合材料、密封材料等, 材料的制备或连接, 都离不开化学黏合剂。

化学的成果、化学的突破数不胜数。从最古老的化学工艺(酿酒、造醋、制药、染色、烧制陶瓷), 到现代最先进的科学技术, 处处都记载着化学的功绩。

21 世纪将是化学进一步施展才能的黄金时代。它将在生物探秘, 创制新材料, 解决全球最迫切解决的环境、能源、人口、粮食、资源等重大问题中做出贡献。新世纪对化学的最大挑战是探索生命现象的奥秘进而“制造生命”。即将出现的神经化学, 将认清大脑的功能, 记忆的特性, 从而能够积极处理诸如吸毒上瘾、精神病、嗜好、发怒、紧张、人类智慧和学习过程等方面的问题。材料技术、能源技术、电子技术、生物技术被列为未来的经济支柱, 其中材料是发展能源、电子、生命技术的物质基础, 而化学对材料具有非凡的开发创造能力。无论金属、非金属或是复合材料, 化学科学可以根据需要设计新分子、修饰或合成新物质, 加工成新材料。化学正在加紧开发新的化学电源和新的太阳能利用技术, 这些新能源的开发利用将会减轻温室效应、光化学烟雾、酸雨和臭氧层破坏四大环境问题。绿色化学将致力于发展不产生污染的新化学反应和化学产品, 实现污染物的“零排放”和无毒无害的生产条件。化学将通过基因工程发展可用海水灌溉的植物品种, 使之能在地球上更广阔的地区内种植, 为人类提供丰富的食品。化学还将把植物的光合作用变成实验室及工厂中的反应, 彻底改变粮食的生产方式, 免除农药对环境的污染。总之, 化学将在发展中再创辉煌, 为人类做出更多的贡献。

0.2 大学化学课程的内容

“大学化学”是高等工程教育中实施化学教育的基础课程, 是培养“基础扎实、知识面宽、能力强、素质高”的现代高级工程技术人才所必需的高等化学教育, 是高等院校非化工

类专业必修的一门公共基础课。

对于非化工类专业的大学生，在以后的工作中不涉及化工生产和化学研究。为此编者在大学化学教材的内容安排上，化学基本理论部分内容简洁，例题丰富多样、联系实际生产、语言精练；微观物质结构部分，阐述各个物质结构层次分明，层层深入，图文并茂；相关学科部分注重化学的先进性、科学性、新颖性和实用性。学生在学习现代化学（语言和观点）的基础上，明确化学基本概念和理论，熟悉化学与其他学科之间的密切关系，通过大学化学课程的学习，全面提高学生的化学素养，为其今后创新发展开拓新的思路。

(1) 化学基础理论

① 宏观化学反应原理：通过热力学的简单计算，明晰化学反应中的能量关系，判断化学反应自发进行的方向和程度；了解外界条件对反应方向、程度及速率的影响；掌握水溶液中几种化学反应规律及电化学基础知识。

② 微观物质结构基础：阐述物质内部原子、分子晶体结构及其与物质性质的关系；了解电子运动的规律及物质发生化学变化的本质。

(2) 相关交叉学科

重点介绍化学与当今世界普遍关注、发展迅速的重大学科如材料、能源、环境、生命等之间的交叉渗透和应用，突出化学在社会发展和科技进步中的地位和作用。

(3) 化学技能训练

大学化学实验是培养工科学生科学素质和能力的一个重要环节，编者针对培养和提高学生的实验技能方面，另编写有《基础化学实验》指导书。通过系统的化学实验训练，不仅可以加深、巩固学生对所学理论知识的理解，还可以提高学生的动手能力和实验技能，在实验过程中培养学生观察记录实验现象，用化学理论分析实验现象，总结、撰写实验报告，全面培养和提高学生的科学素养。

0.3 学习大学化学的意义

化学是人类在生活、生产活动中应用最广泛的学科，化学应用早已渗透到人们的衣食住行中，工业、农业、国防等各个领域的生产以及现代高新技术的发展都离不开化学。进入高效现代化生活，日益提高的生活品质，要求我们必须懂得化学。如何正确选择医药、清洗剂、化妆品、油漆、涂料、胶黏剂，保证我们生活在安全的环境中；如何科学地合理饮食，使我们营养平衡、增力增智、健康长寿；如何合理使用日用品，有效防止金属器皿的锈蚀，以延长它们的使用期。只有具备丰富的化学基本知识，才能使我们科学地安排生活，提高生活质量。

现代科学技术在高层次上走向综合化和整体化，交叉科学将不断涌现，化学将更加广泛深入地与各个工程技术学科相互渗透，并相互促进发展。现代社会发展的三大支柱：材料、能源和信息，以及生命科学和环境科学，都涉及十分广泛的化学知识。例如：用化学加工代替机械加工可获得精美的工程材料和零部件；用化学方法可以改变原材料的内部组成，从而提高工程材料的强度、韧性、塑性等性能；使用少量化学活性物质可以使润滑油、燃料油等各种工业用油获得优良的使用性能，等等。学习大学化学，掌握物质发生化学变化的规律，改变物质的性能，使一些物质变无用为有用，变废为宝，化害为利，从而充分利用自然资

源，创造出更多更好的新产品。化学是全面发展的工程技术人才知识、素质和能力结构中必不可少的重要组成部分。

工科大学生学习大学化学的目的在于：使非化工类大学生了解现代化学语言，树立全面正确的化学观点，在中学化学基础上进一步了解或掌握化学基本理论、知识和技能，了解化学科学技术与其他科学技术的交叉渗透和相互促进关系，能以化学观点观察、解释工程技术实际和现代生活实际中出现的物质变化现象，懂得利用化学方法改进物质的性能，开发利用新资源和新能源，改善人类生存环境和条件，对一些涉及化学的工程技术问题有初步分析解决的能力。初步了解化学在科技进步和社会持续发展中的作用，建立工程技术领域必备的化学知识结构，为今后继续学习和工作创新打下必要的化学基础。



思考题

1. 为什么说化学是一门富有创造力的自然科学？
2. 为什么说化学改变了人们的生活？举例说明。
3. 化学研究的对象和目的是什么？
4. 非化学化工专业的大学生为什么也要学习化学？
5. 大学化学的基本内容有哪些？

第 1 章

化学反应的基本原理

1.1 化学反应基本概述

化学反应是物质发生化学变化的根本原因，也是我们进行创新、制造新物质、开发新能源的理论根据。在了解化学反应之前，我们需要了解化学反应过程中涉及的一些化学基本概念。

1.1.1 物质的量

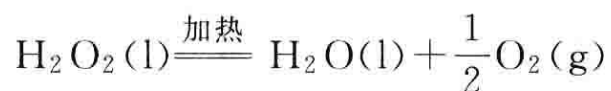
在一个化学反应中，参与化学反应的反应物和生成物的量不断地发生变化，需要选择一个基本量来进行化学计量。

1971 年，第 14 届国际计量大会 (CGPM) 选择“物质的量”作为衡量物质的基本物理量，用计量原子、分子、电子等微粒的多少来表示物质质量的多少，称为“物质的量”。规定：当一系统中所包含的微粒数目与 12g 碳 ($^{12}_6\text{C}$) 的原子数目相等时，则该系统物质的量为 1 摩尔，物质的量的单位为摩尔，用符号 mol 表示。

物质的质量、物质的量与摩尔质量之间有下列关系：

$$\frac{\text{物质的质量(g)}}{\text{摩尔质量(g}\cdot\text{mol}^{-1})} = \text{物质的量 (mol)}$$

如果用 n 表示物质的量，用 m 表示物质的质量，用 M 表示物质的摩尔质量，上式可表示为 $m/M=n$ 。在化学反应中，根据反应方程式中反应物和有关生成物的物质的量的关系，及相应分子的摩尔质量，计算某生成物的质量。物质的量的引入给化学计算和应用带来了很大便利。例如过氧化氢是一种火箭燃料的高能氧化剂，根据化学反应，很容易计算反应过程中所产生的氧气量。不难得出 34kg 过氧化氢完全分解时，产生 16kg 的氧气。



物质的量/mol	1	1	0.5
摩尔质量/kg·mol ⁻¹	34	18	16

在使用物质的量时，必须明确其基本含义。

① 物质的量是衡量物质多少的基本物理量，单位是 mol，与摩尔数概念不同，所以物质的量不能用“摩尔数”来代替。我们知道：量=数值×单位。“物质的量”是衡量物质多少的基本量，“摩尔数”是物质的量的单位所表示的数值，它们之间是“量”、“数值”和“单位”的关系，所以，物质的量≠摩尔数。

② 用单位“摩尔”时，须表明“物质的量”所对应的物质的基本单元。这些基本单元可以是分子、原子、电子、基团、粒子等，也可以是一些粒子的特定组合，如 H_2O_2 、 FeSO_4 、 $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ 、 $(\text{Ag} + \frac{1}{2}\text{O}_2)$ 等。

判断“氧的物质的量”、“氧化铁的物质的量”等描述正确吗？答案是不正确。因为物质的量的基本单元的表述不明确，氧的基本单元可以是氧气 O_2 ，也可以是氧原子 O 或其他如 2O ；同样氧化铁的基本单元可以是 FeO ，也可以是 Fe_2O_3 或 Fe_3O_4 。

物质的量的基本单元可以是特定组合，在实际应用时常常选择一个化学反应式作为一个特定组合，在应用过程中给我们带来了很大便利。例如铁和氧的化学反应中，以“ $4\text{Fe} + 3\text{O}_2 = 2\text{Fe}_2\text{O}_3$ ”为一个基本单元，当 4mol Fe 和 3mol O_2 生成 $2\text{mol Fe}_2\text{O}_3$ 时，可以看出整个反应是按 1mol 组成的，称“ 1mol 反应”；如果以 $2\text{Fe} + \frac{3}{2}\text{O}_2 = \text{Fe}_2\text{O}_3$ 为基本单元，反应物质的量仍然是 4mol Fe 和 3mol O_2 反应生成 $2\text{mol Fe}_2\text{O}_3$ 时，不难看出对于 $2\text{Fe} + \frac{3}{2}\text{O}_2 = \text{Fe}_2\text{O}_3$ 这个反应来说，反应是按 2mol 组成的，称该反应是“ 2mol 反应”。

1.1.2 化学反应进度

对于一般化学反应，由于化学反应中各种物质的计量系数不同，反应物的消耗量与生成物的生成量在数值上不等同。例如铁的氧化反应中：



当 Fe 消耗 0.4mol ， O_2 消耗 0.3mol ， Fe_2O_3 增加 0.2mol 时，从这些数值看不出该反应进行的情况，没有统一的数值表示该反应进行的程度。

1982 年我国国家标准用“反应进度”定量描述化学反应进行的程度。对于任一化学反应：



$$0 = d\text{D} + g\text{G} - a\text{A} - b\text{B}$$

$$0 = \sum \nu_{\text{B}} \text{B}$$

式中， B 表示物质， ν_{B} 表示反应物或生成物的化学计量数，并规定： ν_{B} 对于反应物取负值，生成物取正值。反应进度用 ξ 表示，单位为 mol ，可用下式描述。

$$\xi = \frac{\Delta n(\text{B})}{\nu(\text{B})}$$

上述铁的氧化反应 $4\text{Fe} + 3\text{O}_2 = 2\text{Fe}_2\text{O}_3$ ，可变为：

$$0 = 2\text{Fe}_2\text{O}_3 + (-4\text{Fe}) + (-3\text{O}_2)$$

当 Fe 反应损耗 0.4mol ， O_2 消耗 0.3mol ，生成 0.2mol 的 Fe_2O_3 时，按定义式计算反应进度 ξ 为：

$$\xi = \frac{\Delta n(\text{Fe})}{\nu(\text{Fe})} = \frac{-0.4\text{mol}}{-4} = 0.1\text{mol}$$

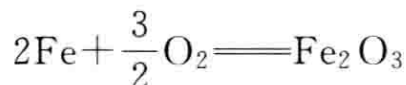
$$\xi = \frac{\Delta n(\text{O}_2)}{\nu(\text{O}_2)} = \frac{-0.3\text{mol}}{-3} = 0.1\text{mol}$$

$$\xi = \frac{\Delta n(\text{Fe}_2\text{O}_3)}{\nu(\text{Fe}_2\text{O}_3)} = \frac{+0.2\text{mol}}{2} = 0.1\text{mol}$$

由计算结果可知，上述反应无论用反应物还是用生成物来表示该反应的反应进度，反应进度

ξ 均为 0.1mol, 即表示反应进行的程度是: 当 Fe 消耗 0.4mol 时, O_2 消耗量为 0.3mol, 此时生成 0.2mol 的 Fe_2O_3 。

当铁的氧化反应以下面的反应式表示时



反应进度为:

$$\xi = \frac{-0.4\text{mol}}{-2} = \frac{-0.2\text{mol}}{-3/2} = \frac{0.2\text{mol}}{1} = 0.2\text{mol}$$

同一化学反应, 化学计量式不同, ν_B 数值不同, 化学反应按 1mol 进行时, 所对应反应物和生成物的量的变化有差别, 致使 ξ 的数值有别。所以反应进度 ξ 的数值与反应式的写法有关。因此, 在计算反应进度时, 必须表明反应进度所对应的具体反应式。

1.1.3 系统和环境

化学是以物质为研究对象的, 物质和物质不是孤立存在的, 物质和其周围的其他物质也存在着相互联系。为了方便研究, 将人为划分出来的作为研究对象的那部分物质, 称为系统(或体系), 而把系统之外并与之有联系的其他物质叫做环境。

系统与环境之间存在一定关联, 常常有能量或物质的交换, 根据系统和环境之间的联系情况, 把系统分成三种类型。

(1) 敞开系统

系统与环境之间既有能量交换, 又有物质交换。例如一杯开着口的热水, 将水杯中的热水选作系统, 则此系统就是敞开系统。

(2) 封闭系统

系统与环境之间只有能量交换而无物质交换。例如将上述盛热水的水杯加密封塞, 仍然以热水为系统, 该系统就是封闭系统。

(3) 孤立系统

系统与环境之间既没有能量交换, 又没有物质交换。例如将上述盛有热水的水杯外面加上绝热材料, 此系统即为孤立系统。

在科研中封闭系统最为常见, 如无特殊说明, 本书讨论的均为封闭系统。

1.1.4 相

组成系统的物质可以呈现不同的形态、性质和分布, 系统中任何物理性质和化学性质都完全相同且均匀的部分称为一相, 根据物质的某些性状和种类的不同将系统分为单相系统和多相系统。一般相与相之间有明确的界面, 为了进一步了解相的概念, 还要注意以下几种情况。

① 构成同一相的物质不一定是一种物质。任何气体, 无论是单组分或是多组分的混合气体, 都是一相, 称为气相; 组成液相的物质可以是纯液态的也可以是溶液。例如: 空气、氯化钠水溶液都是一相, 它们组成的系统又称单相系统。

② 聚集状态相同的物质不一定组成单相。例如, 油和水都是液态, 它们共存组成的系统却是两个相, 硫黄粉和石灰粉虽然都属固态, 但它们的混合物在显微镜下可以清楚地看到硫黄粉和石灰粉的相界面, 所以它们是两相。含有两相或两相以上的系统称为多相系统。

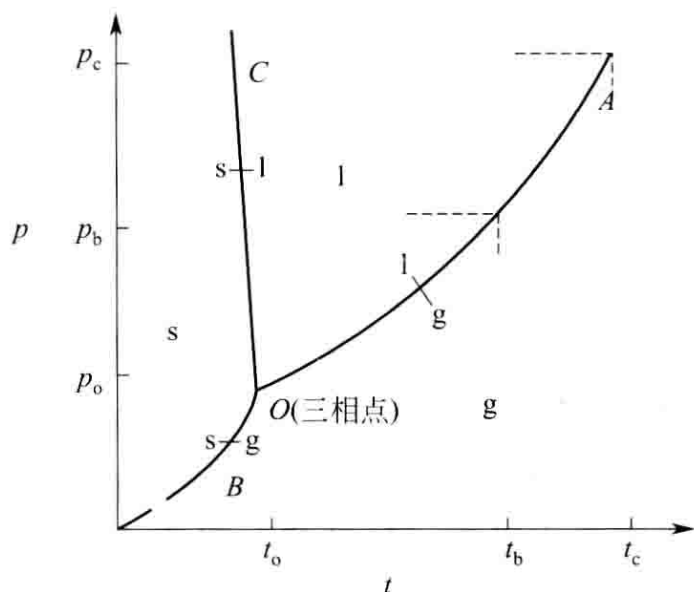


图 1-1 水的三相点示意图

③ 晶型或晶态结构不同的物质属于不同的相。例如碳可以有三种不同的固态形式，即石墨、金刚石和固态 C_{60} ，它们是三种异形体，将它们混合在一起则组成一个三相系统；又如具有体心立方结构的 α -Fe 和具有面心立方结构的 γ -Fe 在一起，构成的是两相。晶型不同，相结构不同，对固体材料的性能有着很大的影响。

④ 聚集状态不同的同一种物质可以组成多相。水、冰、水蒸气具有相同的分子，属同一种物质，在不同的温度下，呈现出气、液、固三种不同的形态，三种形态的物理性质不同，故它们共存组成不相同的相。实验证明，在 0.611kPa 和 0.01℃ 条件

下，冰、水、水蒸气三相达到平衡，可以长期共存，把这个压力、温度条件称为水的三相点，见图 1-1。

1.1.5 状态函数

选定一个化学反应为研究对象，该反应中的反应物和生成物就组成一个系统。要研究选定的对象，首先要确定它所处的状态，一般情况可以用系统所处条件下的物理性质和化学性质来综合表现。例如选定气体作为研究对象，则气体具有的物质的量 n 、压力 p 、温度 T 、体积 V 等这些用来描述该气体的物理量就有一确定的值，根据这些物理量就可以确定此时该系统所处的状态；如果是一理想气体，则符合理想状态方程式 $pV=nRT$ ，像这种用来描述系统状态的各种性质的物理量之间的相互依赖的函数关系，称为状态函数。如果用来表述系统所处状态的性质之一发生变化，系统就会从一种状态变到另一种状态。变化前的状态称为始态；变化后的状态称为终态。每一个状态函数皆可表示为另外几个状态变量的函数，如

$$p = f(V, n, T) = \frac{nRT}{V}$$

任何一个系统，状态确定，状态函数就有确定的数值。状态不变，所有状态函数都保持原有的数值，状态函数的值只取决于状态。当状态改变时，状态函数也发生改变，状态函数的变化量由始态及终态决定，与变化过程的具体途径无关。例如温度是状态函数，将一杯 20℃ 的水变为 80℃ 的水，无论采用何种途径，水温的改变量都等于 60℃。

1.1.6 热力学能

系统的内能也叫热力学能，是系统内部能量的总和，即系统内部分子的平动能、转动能、振动能、分子间势能、电子运动能、核能等总和，用符号 U 表示。在一定条件下，系统的热力学能与系统中物质的量成正比，即热力学能具有加和性。热力学能只取决于状态，所以，热力学能是一个状态函数。

能量不会自生自灭，只能从一种形式转换为另一种形式，在转换过程中能量的总值不变，这就是能量守恒定律，即热力学第一定律。虽然参与反应的物质各种各样，并且反应条件（如 T 、 p 、催化剂等）也千差万别，但任何化学反应都遵守自然界的这一基本规律，即能量守恒定律。在化学反应过程中，系统内部微粒（如分子、原子、电子）的运动动能和粒