

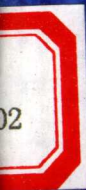
面向 21 世纪 课程 教材
Textbook Series for 21st Century

结构和物性

化学原理的应用

第二版

周公度



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

21 世纪课程教材
Book Series for 21st Century

结构和物性

化学原理的应用

第二版

周公度



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

内容简介

本书是教育部“高等教育面向 21 世纪教学内容和课程体系改革计划”的研究成果,是面向 21 世纪课程教材和教育部理科物理学和天文学“九五”规划教材.本书是在原第一版的基础上修改而成的,保持了原有的风格和特色,但在章、节标题及具体安排上突出了材料、能源和环境等方面的内容.全书包括绪言,原子结构和元素周期性质,化学键和分子结构,氢和氧的化学,碳和氮的化学,能源化学,环境化学,界面化学,晶体和非晶体材料,金属材料 and 磁性材料,光学材料,电学材料,合成高分子材料等十二章.

本书可作为高等学校物理、材料、电子等类专业化学课程的教材,也可供有关专业的教师及广大科技人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

结构和物性:化学原理的应用/周公度.二版.一北京:

高等教育出版社,2000(2003 重印)

面向 21 世纪课程教材

ISBN 7-04-007941-0

I. 结… II. 周… III. 化学-高等学校-教材 IV. 06

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 64393 号

结构和物性: 化学原理的应用 第二版
周公度

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-64054588
社 址	北京市东城区沙滩后街 55 号	免费咨询	800-810-0598
邮政编码	100009	网 址	http://www.hep.edu.cn
传 真	010-64014048		http://www.hep.com.cn
经 销	新华书店北京发行所		
印 刷	国防工业出版社印刷厂		
开 本	787×960 1/16	版 次	1993 年 6 月第 1 版 2000 年 6 月第 2 版
印 张	24.5	印 次	2003 年 5 月第 4 次印刷
字 数	450 000	定 价	25.60 元

凡购买高等教育出版社图书,如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请在所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

第二版前言

“结构和物性”课开设十年来,正值我国高等教育的课程设置进行重大改革,要求大学本科生开拓广阔的知识面,提高科学文化素养,成为具有较高素质的人才.为了适应这一改革的需要,一批供文科学生选修化学用的教材已相继问世.本书是为非化学专业的理工科学生编写的化学教材,使学生能够掌握化学基础知识,了解物质材料的性质及其变化规律.

本书第一版于1993年出版以来,受到了国内大学生和教师的欢迎,许多大学的物理专业和一些其他理工专业采用本书作教材,先后已印刷了3次.在1995年国家教育委员会举办的第三届普通高校全国优秀教材评选中,本书第一版获得“国家教委一等奖”.由于第一版是针对物理专业学生编写的,偏重结构化学基础,内容较深,不能适应广大理工科学生选修化学课程的要求.另一方面,近十年来世界科学技术的迅猛发展以及知识经济的出现都是各学科共同协作、互相推进的结果,我们应介绍化学在其中所起的重大作用.新世纪的来临,人类发展的光辉前景和面临的挑战,也涉及许多化学问题,当代的大学生,特别是理工科大学生应学习化学,使其知识结构比较全面,以适应时代的要求.根据这些情况,作者应高等教育出版社之约,将原有教材全面地加以增补和修订并作为“面向21世纪课程教材”出版.

本书第二版共十二章,内容分为三部分.前四章属于基础化学内容,包括原子结构、化学键和以氢、氧、碳、氮四个元素的化学为主线的无机化学和有机化学的基础知识.第二部分包括能源化学、环境化学和界面化学三章,它们是当前科学技术发展中涉及化学的热点问题,要求了解化学在其中所起的作用.最后五章是和材料科学密切相关的材料化学的内容,包括晶体和非晶体材料、金属材料、磁性材料、光学材料、电学材料以及合成高分子材料等.

在此次修订和编写过程中,作者根据长期从事化学教学的经验以及当前世界科学的最新发展情况,精选内容,力求简明扼要、通俗易懂地提供更多的有用知识,并注意在内容上选用较新的信息和观点.所引用的参考文献大部分是90年代发表的文章和出版的书籍,以为广大读者进一步深入了解各章所涉及的内容提供查找线索.

由于理工科专业很多,不同专业对化学应有不同的要求,作者将内容分三部分编写,其目的就是便于教师根据实际情况和需要选讲部分内容.例如这门课程

按照 36 学时安排,可以用 $2/3$ 的时间讲授前面四章的基础内容,而以 $1/3$ 的时间选讲第二部分和第三部分中与本专业关系密切的章节,其余部分适当引导学生自学或阅读参考。

在北京大学化学学院,张玉芬教授和王哲明副教授从 1993 年起先后为物理系学生开设了“结构和物性”课,他们为本书的修订提供了素材.苏勉曾教授和杨文治教授对书稿进行了认真细致的审阅,提出了许多中肯的修改意见.北京大学物理系赵凯华、高崇寿和王祖铨三位教授在百忙中也对本书作了审定.高等教育出版社陈小平同志为本书出版给予全力支持和帮助,他和杨树东同志一起认真细致地进行了编辑加工.作者对上述诸位的帮助致以衷心的感谢.本书涉及的内容很广,限于作者水平,错误和不妥之处,请广大读者给予指正.

周公度

1999 年 7 月于北京大学中关园

第一版前言

国家教委已将“结构和物性”列为物理学专业和应用物理学专业本科生必修的一门基础课,其目的是为了加强学生对化学原理和物性知识的了解,以适应当前科技发展的需要。

面对浩繁的化学内容及有限的学时,我们考虑其内容应体现化学发展的水平和趋势;应使学生了解化学的基本原理和应用,适应人材的培养;应能体现出化学和物理学的相互联系和相互促进的作用。我和一些有教学经验的教师商讨,选下列三方面内容作为重点:

一是原子结构和元素周期性质,在元素周期表基础上对各族元素的基本性质有较全面了解。二是化学键,包括共价键、离子键、金属键、配位键和氢键等的本质以及分子和晶体中原子的空间排布和相互作用。三是结合现代工农业和现代科学技术(重点是材料科学、生命科学和表面科学)中的一些化学问题,阐述结构和性能的联系及应用。

我们还考虑本书的系统性,以及提供给理、工、师范等校的学生、教师及有关科技人员参考的需要,共编写了十二章。每章之后附有参考文献,为有兴趣进一步深入学习作引导。鉴于学时的限制,建议第一至第五章以及胶体和界面化学、有关配位化合物和催化作用诸节作为教学的基本内容,而其他章节可根据具体情况选讲。

在我从事本课程教学工作中,得到北京大学物理系赵凯华、王祖铨和林纯镇等教授的支持和帮助;在教材编写过程中,有关章节得到北京大学化学系杨文治、赵国玺、马季铭、叶秀林、金声、高盘良、丘坤元和物理系陈熙谋、王国文、钟文定、戴道生、梁静国、夏宗炬、傅春寅、章立源等教授的审阅;全书由严宣申教授主审。有他们的帮助和把关,丰富了教材内容,减少了不少差错,谨向上述诸位表示衷心感谢。高等教育出版社蒋栋成、杨再石、李松岩等领导同志对本书的出版给予积极的支持,陈小平同志为本书进行细致的编辑加工,付出辛勤的劳动,我在此一并表示衷心的感谢。由于我对这门课的教学时间不长,错误和不妥之处,祈请读者给予指正。

周公度

1992年6月于北京大学

第一版序

在自然科学中,物理学和化学都是研究物质的结构和性质的,区别仅在于研究对象的层次不同,其实她们是血缘最近的姊妹学科.很早以前,在物理系的教学计划里就设有普通化学,作为一门大一的必修课.后来因为感到这门课的内容很难选择,浅了与中学的化学课重复,深了又侵入我系的原子物理和热力学课的领域,就名存实亡了.在我主持北京大学物理系的期间里,一直在考虑如何恢复或重建物理系的化学课.起初,我们在高年级试开过一门化学选修课,侧重在实验室的训练,效果不尽令人满意.1989年春节,我校教务长召开了一次教改座谈会,会上化学系周公度教授提出,可以从结构化学的角度为物理系高年级学生定性地讲一讲分子结构与物性之间的关系,在此基础上可以开设一门“结构和物性”课.我们听后感到这个想法很好,有可能解决物理系长期未解决的化学课问题.当即与周先生商定,请他先为我系的学生做一系列报告,为开设这门新课程作准备.1989年春季那个学期,周先生的讲座如期开始了,可惜因故中辍,未能按计划完成.但我们还是决定,1990年为物理系的学生开设这门新的化学选修课.1991年周先生第二遍开此课时改为必修课,并写出一本讲义,这就是本书的前身.

曾经有人批评,物理系开设的课程“有理无物”,意思是说,重视物理规律,理论框架比较多,但忽视物质的具体性质,对物性的讲授不够重视.当然,原因是多方面的,不知怎样讲也是其中之一.因为在物理学中人们已不习惯只作描述性的讲授,然而具体的物质材料所表现出来的性质,其机理往往很复杂,或者现在还无法讲清楚.从《结构和物性》这本书我们看到,物质材料的物理性质是由它们的化学结构所决定的,有些方面的机理可以用结构化学的原理做出定性或半定量的解释.这门课程的增设为解决物理系“有理无物”的问题提供了一种模式,为改善物理系学生的知识结构起到了很好的作用.为此我愿意代表物理界的同人,对周公度教授所做的努力表示感谢.

赵凯华

1992年8月

目 录

绪言	(1)
第一章 原子结构和元素周期性质	(2)
1.1 原子和分子	(2)
1.1.1 原子和元素	(2)
1.1.2 分子和化合物	(5)
1.2 微观粒子运动的描述方法和量子效应	(6)
1.3 氢原子的结构	(8)
1.3.1 单电子原子的 Schrödinger 方程及其解	(8)
1.3.2 量子数的物理意义	(10)
1.3.3 波函数和电子云的图形	(11)
1.4 多电子原子结构	(13)
1.4.1 屏蔽效应和穿透效应	(13)
1.4.2 基态原子的电子排布	(14)
1.5 元素周期表	(15)
1.6 元素性质的周期性	(19)
1.6.1 原子的电离能	(19)
1.6.2 原子的电子亲和能	(21)
1.6.3 原子的电负性	(21)
1.6.4 相对论效应对元素周期性质的影响	(24)
1.7 化合物的周期性质	(27)
1.7.1 化合物中元素的氧化态	(28)
1.7.2 从周期表看化合物的性质	(28)
1.7.3 过渡金属元素化学性质的变化规律	(30)
1.8 原子光谱和电子能谱的应用	(31)
1.8.1 原子光谱	(31)
1.8.2 电子能谱	(32)
习题	(34)
参考文献	(35)
第二章 化学键和分子结构	(37)
2.1 物质的性质和化学键类型	(37)
2.2 H_2^+ 的结构和共价键的本质	(40)
2.2.1 H_2^+ 的 Schrödinger 方程及其解	(40)
2.2.2 共价键的本质	(42)

2.3 分子轨道理论和共价键类型	(43)
2.3.1 共价键的点电子表示	(43)
2.3.2 分子轨道理论	(44)
2.3.3 分子轨道的分布特点和分类	(45)
2.4 双原子分子的结构和性质	(48)
2.4.1 同核双原子分子	(48)
2.4.2 异核双原子分子	(51)
2.5 多原子分子的结构和表示法	(52)
2.5.1 分子的构型和构象	(52)
2.5.2 分子点电子结构式	(53)
2.5.3 价电子对互斥理论	(54)
2.5.4 杂化轨道理论	(56)
2.5.5 原子的共价半径	(57)
2.6 共轭分子中的离域 π 键	(59)
2.6.1 共轭分子及其形成条件	(59)
2.6.2 共轭效应及其对物质性质的影响	(60)
2.7 金属键	(60)
2.8 配位键	(63)
2.8.1 配位键的成键形式	(63)
2.8.2 配位化合物的特征	(65)
2.9 离子键	(67)
2.9.1 离子键和点阵能	(67)
2.9.2 离子半径	(70)
2.10 氢键	(73)
2.10.1 氢键的成键类型	(73)
2.10.2 非常规氢键	(74)
2.10.3 氢键的形成和物质的性能	(75)
2.11 分子间作用力	(77)
2.11.1 概述	(77)
2.11.2 范德华力	(78)
2.11.3 分子识别、超分子和有序高级结构	(80)
2.12 分子的大小和形状	(82)
2.12.1 范德华半径	(82)
2.12.2 分子大小的估算	(83)
习题	(85)
参考文献	(87)
第三章 氢和氧的化学	(89)
3.1 氢	(89)

3.1.1 氢的分布和同位素	(89)
3.1.2 氢的成键类型	(90)
3.1.3 氢气的性质和制备	(92)
3.2 氧	(93)
3.2.1 氧的分布和性质	(93)
3.2.2 氧的成键特征和氧化物	(94)
3.3 水的结构和性质	(97)
3.3.1 水分子和冰的结构	(98)
3.3.2 水的性质	(99)
3.3.3 液态水的结构模型	(102)
3.4 溶液	(104)
3.4.1 溶液浓度表示法	(104)
3.4.2 溶解度	(105)
3.4.3 溶度积常数	(106)
3.5 酸和碱	(107)
3.5.1 酸和碱的定义与常用的酸和碱	(107)
3.5.2 水溶液中酸碱强弱的表示	(109)
3.5.3 酸碱强度的估计	(110)
3.5.4 缓冲溶液	(111)
3.6 氧化还原反应	(113)
3.6.1 氧化反应和还原反应	(113)
3.6.2 电极电势及其应用	(114)
3.6.3 氧化还原平衡	(115)
习题	(116)
参考文献	(117)
第四章 碳和氮的化学	(119)
4.1 碳	(119)
4.1.1 碳的三种同素异形体	(119)
4.1.2 三族有机物的结构特征	(122)
4.1.3 碳的同位素	(123)
4.2 氮	(124)
4.2.1 氮的分布和性质	(124)
4.2.2 氨和铵盐	(125)
4.2.3 氮的氧化物和含氧酸	(126)
4.2.4 1992年明星分子:NO	(130)
4.3 官能团和有机物分类	(132)
4.4 分子的对称性	(136)
4.4.1 对称操作和对称元素	(136)

4.4.2 分子的点群·····	(140)
4.5 手性分子·····	(141)
4.5.1 手性和旋光性·····	(141)
4.5.2 药物分子的构型·····	(144)
4.6 生物有机化学简介·····	(146)
4.6.1 碳水化合物·····	(147)
4.6.2 油脂·····	(148)
4.6.3 氨基酸和蛋白质·····	(149)
4.6.4 核酸·····	(152)
4.6.5 酶·····	(155)
习题·····	(157)
参考文献·····	(158)
第五章 能源化学 ·····	(160)
5.1 能源和能源的利用·····	(160)
5.1.1 能源和能源化学·····	(160)
5.1.2 能源的利用和热力学函数·····	(161)
5.2 键能、反应热和反应性质·····	(164)
5.2.1 共价键键能·····	(164)
5.2.2 反应热和反应性质·····	(166)
5.3 氢能源·····	(167)
5.3.1 储氢材料·····	(168)
5.3.2 激光分离同位素 H 和 D·····	(170)
5.4 石油和天然气·····	(171)
5.4.1 石油的炼制·····	(171)
5.4.2 石油化工·····	(174)
5.4.3 催化反应和催化剂·····	(174)
5.5 煤炭·····	(177)
5.5.1 煤的组成和结构·····	(177)
5.5.2 煤的综合利用·····	(178)
5.6 电池·····	(180)
5.6.1 常用的干电池和蓄电池·····	(180)
5.6.2 燃料电池·····	(182)
5.6.3 金属腐蚀的微电池机理·····	(184)
习题·····	(185)
参考文献·····	(186)
第六章 环境化学 ·····	(188)
6.1 环境问题·····	(188)
6.2 水的环境化学·····	(190)

6.2.1 水的数量和分布	(191)
6.2.2 硬水和海水的处理和利用	(192)
6.2.3 水体的污染	(193)
6.2.4 污水治理	(196)
6.3 大气化学	(197)
6.3.1 大气圈概况	(197)
6.3.2 大气污染物	(199)
6.3.3 大气环境问题	(201)
6.3.4 臭氧层的损耗	(204)
6.4 环境与资源保护	(206)
习题	(208)
参考文献	(208)
第七章 界面化学	(210)
7.1 水溶液的表面化学	(210)
7.1.1 水溶液的表面张力	(210)
7.1.2 表面活性剂	(211)
7.1.3 疏水效应	(214)
7.2 固-气界面化学	(215)
7.2.1 固体表面的结构	(215)
7.2.2 固体表面吸附	(217)
7.2.3 分子筛怎样筛分分子	(218)
7.3 固-液和固-固界面化学	(220)
7.3.1 固体表面的润湿性能	(220)
7.3.2 钎焊:铝材的焊接	(221)
7.3.3 氧化物和盐类在载体表面自发单层分散	(222)
7.4 纳米化学	(224)
7.4.1 纳米材料	(224)
7.4.2 扫描探针显微技术	(225)
7.5 膜的化学	(227)
习题	(230)
参考文献	(230)
第八章 晶体和非晶体材料	(232)
8.1 晶体结构的周期性和点阵	(232)
8.2 晶体对称性和晶体物理性质	(234)
8.2.1 晶体结构的对称元素	(234)
8.2.2 晶系	(235)
8.2.3 空间点阵型式	(235)
8.2.4 晶体学点群	(237)

8.2.5 晶体的点群和晶体的物理性质	(238)
8.3 金属元素的晶体结构	(241)
8.3.1 等径圆球的堆积	(241)
8.3.2 金属单质的结构概况	(245)
8.3.3 金属原子半径	(246)
8.4 离子晶体的结构	(248)
8.4.1 常见的离子晶体结构	(248)
8.4.2 影响离子晶体结构的因素	(252)
8.5 晶体缺陷和晶体材料	(253)
8.6 玻璃、陶瓷和准晶体	(255)
8.6.1 玻璃	(255)
8.6.2 陶瓷	(257)
8.6.3 准晶体	(259)
8.7 液晶	(260)
习题	(262)
参考文献	(264)
第九章 金属材料 and 磁性材料	(266)
9.1 钢铁	(266)
9.1.1 钢铁的冶炼	(266)
9.1.2 钢铁的相组成和性能	(266)
9.2 新型金属材料	(269)
9.2.1 非晶态合金	(270)
9.2.2 形状记忆合金	(271)
9.3 配位场中金属原子的能级和未成对电子数	(272)
9.4 物质磁性的起源和分类	(277)
9.4.1 原子的磁性	(277)
9.4.2 物质磁性的分类	(278)
9.5 磁性材料	(285)
9.5.1 永磁材料	(285)
9.5.2 软磁材料	(287)
9.5.3 磁信息材料和特种磁性材料	(288)
习题	(289)
参考文献	(290)
第十章 光学材料	(291)
10.1 光和颜色	(291)
10.1.1 光和颜色的关系	(291)
10.1.2 颜色的起因	(292)
10.2 发色的化学机理和色料	(293)

10.2.1 原子激发和分子振动	(293)
10.2.2 过渡金属原子的能级在配位场中的变化	(294)
10.2.3 共轭效应和有机染料	(294)
10.2.4 电荷转移效应和颜料	(297)
10.2.5 电子在固体能带间跃迁产生颜色	(298)
10.2.6 变色材料	(299)
10.3 发光材料	(301)
10.3.1 概述	(301)
10.3.2 发光材料基质的晶体结构	(303)
10.3.3 发光材料的应用	(307)
10.4 非线性光学晶体	(310)
习题	(313)
参考文献	(313)
第十一章 电学材料	(315)
11.1 物质的结构和导电性能	(315)
11.1.1 金属键:能带结构和电导	(315)
11.1.2 共价键:离域 π 键和非金属导体	(316)
11.1.3 离子键:离子晶体缺陷和电导	(317)
11.2 半导体材料	(318)
11.2.1 本征半导体和掺杂半导体	(318)
11.2.2 p-n 结及其应用	(321)
11.3 超导材料	(323)
11.4 固体离子导体	(327)
11.4.1 α -AgI	(328)
11.4.2 β -氧化铝	(330)
11.4.3 固体氧离子导体	(331)
11.5 压电材料	(332)
11.6 铁电材料	(334)
习题	(337)
参考文献	(338)
第十二章 合成高分子材料	(339)
12.1 高分子材料的发展、合成和结构特点	(339)
12.1.1 高分子工业的发展	(339)
12.1.2 高分子的合成——聚合反应	(340)
12.1.3 高分子的结构特点	(343)
12.2 功能高分子材料	(344)
12.2.1 医用高分子材料	(345)
12.2.2 导电高分子材料	(346)

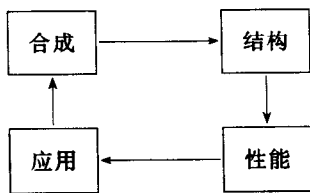
12.2.3 高吸水性高分子材料	(346)
12.3 热塑性材料	(348)
12.3.1 塑料和纤维	(348)
12.3.2 若干热塑性高分子的结构、性质和应用	(350)
12.4 热固性材料	(352)
12.5 弹性体材料	(354)
12.6 复合材料	(357)
习题	(359)
参考文献	(360)
附录 I 单位、物理常数和换算因子	(361)
附录 II 部分习题答案	(364)
索引	(369)

绪 言

“结构和物性”是从物质的微观结构及其与宏观性质间的关系,阐述化学的基础知识、基本原理和基本规律.通过学习本课程的内容,可了解化学及其与其他科学的关系,加强基础、开拓视野、提高科学文化素质.

化学是在原子和分子的水平上研究物质的结构、性质和变化的科学,是自然科学的基础学科之一.化学涉及存在于自然界的一切物质以及由人类创造的新物质,它还涉及存在于自然界的许多变化以及由化学家发明和创造的新变化.

化学的基本任务是根据社会的需求和应用的要求,合成制备出具有特定化学组成和结构的产品.由于物质的结构决定了物质的性能,性能提供物质具有应用价值的基础,而生产和科学的发展不停顿地要求提供具有特定性能的材料,为化学合成提出新的课题和要求,所以化学科学可用下面这个简单的循环,示意地表示她的螺旋上升、不断发展的过程:



现代文明的三大支柱:能源、信息和材料,都和化学密切联系.例如,新材料被视为新技术革命的基础和先导,而材料的研究、开发、生产和应用,正是沿着上述循环进行的.

化学关系到人们的衣食住行、工农业生产、环境的污染和治理等各个方面.在人类多姿多彩的生活中,化学无处不在.化学不仅是化学工作者的专业知识,也是广大人民群众普及科学知识的重要内容.对理工科大学生来说,学习“结构和物性”,从物质的结构本质上理解物质的性质,有利于扩充知识面、扩展思考问题的途径,有利于全面素质的提高.

第一章 原子结构和元素周期性质

1.1 原子和分子

1.1.1 原子和元素

原子是由一个原子核和若干个核外电子形成的体系.原子核由带正电的质子和不带电的中子组成,核外有若干个带负电的电子,它们所带的负电荷可以大于、等于或小于核所带的正电荷,在讨论原子问题时,既包括中性原子也包括正、负离子在内.

从 1803 年 J. Dalton(道尔顿)提出原子论开始,经过近两个世纪,人们对原子的结构和性质进行了多方面的研究和探索,与现代科学发展水平相适应,有关原子结构的知识,已成为自然科学的重要基础之一.近年来,利用扫描隧道显微镜(STM)清楚地看到了原子的形象.图 1.1.1 示出辉钼矿(MoS_2)中硫原子的排列情况.

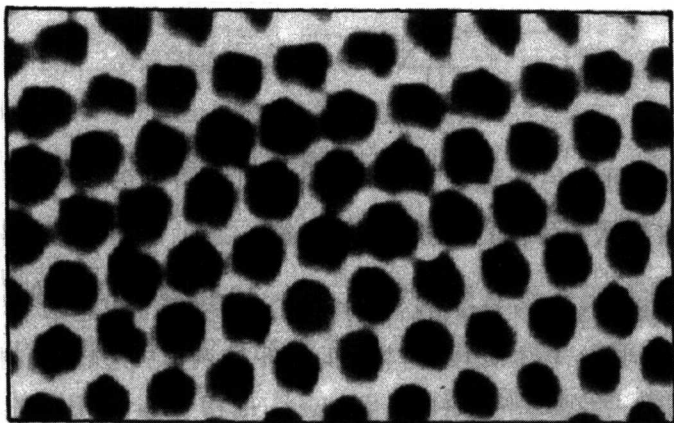


图 1.1.1 辉钼矿(MoS_2)中(001)面上硫原子的扫描隧道显微镜图象,黑点即为硫原子

现在,人们不仅可以看到原子,而且还可以移动单个原子.图 1.1.2 示出在超高真空中利用扫描隧道显微镜技术,在硅单晶体(111)面上移动 Si 原子而形