

化学教学

HUA XUE JIAO XUE



1980

3

征登广告启事

我部编辑的《化学教学》主要是面向广大中学化学老师的丛刊,向全国各省市发行。

自本年度第四辑(约于12月份出版)开始,征求刊登广告业务,欢迎经营中学教学用具、设备(如模型、仪器、化学药品等)的单位来函与我部联系。

联系地址:上海市中山北路366号上海师范大学《化学教学》编辑部。

电话:548461 转 140 分机

上海师范大学《化学教学》编辑部

化 学 教 学

1980年 第3辑 1980年8月出版

编 辑	上海师范大学《化学教学》编辑部
	上海中山北路
出 版	上海教育出版社
	上海永福路123号
印 刷	上海新华印刷厂
发 行	新华书店上海发行所

印数 1—81,500 本 统一书号: 7150·2265-3 定价: 0.24 元

化学教学

目 录

量子化学浅说(二).....潘道邰 钮泽富(1)

谈谈部编高二化学教材的
 几个问题梁英豪(8)

开展有关摩尔问题的讨论(续)

 怎样讲清“摩尔”概念.....郑克良(12)

 物质的数量单位——摩尔.....袁炯明 王鸣鹤(13)

 也谈“摩尔”.....张 允(14)

 对新教材“摩尔”概念提法的一点意见.....谢开荣(14)

 引进“摩尔”概念的教学.....冯德福(15)

谈谈提高课堂教学质量的体会陈志诚(17)

当量定律的数学表达式.....奚福庆(19)

元素周期系中的斜线关系李 彬(21)

盐类的水解徐义佳(23)

怎样上好绪言课.....姜明堂(25)

利用幻灯进行初中化学绪言课的
 教学 上海市长宁区化学中心教研组(26)

T字计算法李 蕾(29)

绘制溶解度曲线的探讨和建议杨启富(30)

怎样培养学生设计化学实验郭春生(31)

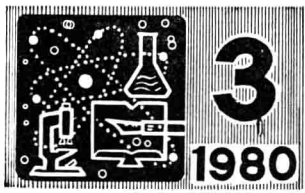
《碱金属及其化合物的性质》实验课的
 教法和体会蔡爱莉(33)

纸上层析的演示实验程育德(35)

燃氢法制取氮气的实验.....柴盛枋(32)

“绒面教学板”的运用
 上海市第五十一中学化学教研组(36)

化学晚会.....韩三鱼(39)





量子化学浅说(二)

上海师范大学 潘道吨 钮泽富

求解薛定谔方程

上面介绍了薛定谔方程得来的线索,所得方程是个二阶线性偏微分方程。由于篇幅有限,我们不想一步步推写求解的过程,只想把求解的步骤及有关问题作出简单介绍。

首先,应该根据体系的吸引和排斥作用的基本情况,写出体系的薛定谔方程 $\hat{H}\Psi = E\Psi$ 中哈密顿算符 $\hat{H}$ 的具体形式,然后列出方程。例如,对于氢原子或类氢离子(如 He^+ 、 Li^{2+} 、 Be^{3+} 等),其电子绕核运动的势能 $V = \frac{-Ze^2}{r}$,故得

$$\left(-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi = E\Psi,$$

其中 $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, $\Psi = \Psi(x, y, z)$, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ 。在采用直角坐标系时,要把 x, y, z 三个变量分离开来单独求解是根本不可能的。为使变数能够分离,在求解时利用 $x = r\sin\theta\cdot\cos\varphi$, $y = r\sin\theta\cdot\sin\varphi$, $z = r\cos\theta$ 把 x, y, z 全部换作球坐标 r, θ, φ 。并且假定 Ψ 是三个独立函数 $R(r)$ 、 $\Theta(\theta)$ 、 $\Phi(\varphi)$ 的乘积。然后经过变量分离后,得到三个分别关于 r, θ 和 φ 的独立方程,分别解这三个方程,就得出 $R(r)$ 、 $\Theta(\theta)$ 及 $\Phi(\varphi)$ 的具体形式,以及三个量子数,即主量子数 n 、角量子数 l 和磁量子数 m 。其中 $R(r)$ 代表波函数的径向部分, $\Theta(\theta)$ 、 $\Phi(\varphi)$ 则代表波函数的角度部分。这样,只要 n, l, m (如考虑电子自旋的话,还应有一个自旋量子数)三个量子数的值确定后,这个电子所处的状态也就确定了。

对于分子体系来说,定态薛定谔方程(7)同样可以适用,只不过 $\hat{H}$ 的形式必须是根据分子体系内的各种吸引和排斥因素来写出。然而,对于这样一个二阶偏微分方程,要能精确求得 Ψ 的解,那怕是最简单的体系如 H_2 、 H_2^+ 已经够复杂的了。所以实际上

1. 核固定近似(也叫 Born-Oppenheimer 近似) 根据事实,他们假定在原子核的相对位置发生显著改变所需的时间比电子运动的时间要长得多很多次的循环运动,因而允许我们先就固定的原子核的相对位置来研究电子的运动状况。这样,实际上就将电子的运动和原子核的运动分开了——认为电子作高速运动,而核却相对固定不动。在写 $\hat{H}$ 的形式时,可以不再列入核的动能算符,而核与核之间的相互作用能则认为是一个恒定值。于是,问题就归结为计算运动于一个或多个核的势场中, n 个电子集体的波函数和能量。进行这种近似处理所引起的误差,一般来说是很小的(如计算 H_2^+ 的能量,只有误差 0.02%),可以不必校正。

2. 轨道近似(也叫单电子近似) 在一个含 n 个电子的多电子原子或分子体系中,考虑这个体系的总体薛定谔方程, Ψ 应是体系中所有电子所产生的 Ψ_i 的贡献;所得能量 E 也应是全部电子的动能、全部电子受核吸引的位能以及电子间相互排斥位能的总和。由于电子互相排斥能为 $\sum_{i<j} \frac{e^2}{r_{ij}}$ (r_{ij} 是第 i 个电子与第 j 个电子间距离)。它是与电子 i 和 j 的瞬时坐标有关,而且也无法将这项

严格地分解为分别只与电子 i 和 j 的坐标有关的两部分之和。显然, 这给计算带来了很大的困难。单电子近似认为, 发现电子 i 在 $d\tau_i$ 中的几率同其他 $(n-1)$ 个电子的瞬时位置无关, 都有同样的确定值 $\Psi_i^2 d\tau_i$ 。这就意味着除掉考虑平均场的作用外, 电子的运动彼此毫不相干, 各个电子的运动状况由一系列确定的单电子波函数 Ψ_i 所规定。这样, 就可以借用处理单电子体系——氢原子——中的一个电子的运动状况的方法。不过这时要考虑到分子中所有的原子核都对每一个电子有吸引作用, 同时这个电子又要受到其他各电子的排斥作用。为了计算方便, 轨道近似法又用各电子的统计平均场来计算电子间的排斥作用能。所谓统计平均场就是把各个电子都看成为一个按几率分布而形成的云状物, 这云状物所产生的势场叫做统计平均场。按此, 原来的 $3n$ 个变量的总体薛定谔方程, 可以约简成一组等价的 n 个三变量单电子薛定谔方程。这样, 求薛定谔方程的解就方便多了。在原子中这些单电子波函数叫做原子轨道(AO), 在分子中叫做分子轨道(MO), 统称这个方法为轨道近似。

3. 变分法近似处理 这是薛定谔方程最常用的一种近似解法。按照这种近似法, 只要任意选定某个尝试函数 ϕ (当然 ϕ 应合乎波函数的三个标准化条件), 调整 ϕ 中所包含的各参量 C_i , 以使 ϕ 成为体系状态函数 Ψ 的尽可能好的近似。所得近似结果会好到什么程度, 自然和选择这个尝试函数有关。

在选定尝试函数 ϕ 时, 可以采用已知函数的线性组合, 即

$$\phi = c_1 g_1 + c_2 g_2 + \dots$$

式中 $g_1, g_2, \dots$ 是适当选择的函数, 又叫基函数组, $c_1, c_2, \dots$ 等是参数。当变分函数采用这种形式时, 这种变分法就叫做线性变分法。

那么, ϕ 中的参量 c_i 究竟怎样来调整呢? 主要运用变分原理加以调整。

如果以 Ψ 左乘薛定谔方程的两边, 并对 $d\tau$ 积分, 得到

$$\int \Psi \hat{H} \Psi d\tau = \int \Psi E \Psi d\tau = E \int \Psi^2 d\tau$$

因为 E 是体系的能量, 为一常数, 故可从积分号里提出来。上式也可写成

$$E = \frac{\int \Psi \hat{H} \Psi d\tau}{\int \Psi^2 d\tau}$$

设体系第 i 个状态的真实波函数为 ψ_i , 其能量为 E_i 。这里“态”— Ψ_i — E_i 构成了相应的关系。与 E_i 中能量最低的 E_0 相应的 Ψ_0 , 叫做体系的基态, 即

$$E_0 = \frac{\int \Psi_0 \hat{H} \Psi_0 d\tau}{\int \Psi_0^2 d\tau} \quad (13)$$

变分原理认为与选定的尝试函数 ϕ 相应的能量 $\varepsilon = \frac{\int \phi \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^2 d\tau}$ 恒比体系基态的真实能量 E_0 来得大。

这种能量的计算方法为: 由于 ϕ 是坐标和参量 c_i 的函数, 故经过对 $d\tau$ 积分后, 与 ϕ 相对应的能量 ε 只是 $c_1, c_2, \dots$ 的函数。于是可以通过求极小值的办法, 令 $\frac{\partial \varepsilon}{\partial c_i} = 0$ 来调整 ϕ 中各参量 c_i , 使 ε 取最小值 ε_0 , 这最小值就接近于 E_0 , 即为基态能量的近似值。与这个 ε (即 ε_0) 相对应的波函数就被认为是体系的近似基态波函数。

变分法近似处理是目前化学键理论包括价键法和分子轨道法的基础,也是当今许多量子化学计算方法的主要依据,了解它的基本思想,有助于进一步处理多体问题。

4. LCAO 近似 上面已经提到,用变分原理处理的近似结果会好到什么地步,很大程度上和选择一组好的基函数集合有关。对于分子,考虑中性分子中占据分子轨道 Ψ_i 的一个电子。在某一瞬间,当这电子靠近原子核 A 时,这个区域的势场主要来源于原子核 A 及近旁的其他电子。由于分子是中性,所以这电子所受另一原子核 B 的吸引,几乎被这电子与 B 核周围其他电子之间的排斥作用所对销。因此在这瞬间,这电子的运动犹如分子中其他原子都不存在似的,于是分子轨道 Ψ_i 在核 A 附近必与原子 A 的轨道 ϕ_A 相近。当然,同理可知, Ψ_i 在核 B 附近必与原子轨道 ϕ_B 相近。由于每一原子轨道都只是在它所属原子的核的附近才有较大的值,于是我们就把 Ψ_i 写作个别原子的原子轨道的线性组合 (Linear Combination of Atomic Orbitals), 简称 LCAO, 作为对分子轨道的良好近似。

目前大多量子化学计算方法,即使对于精确度较高的“从头算法”也都建立在 LCAO 近似的基础上。

其他有关的近似处理,例如微扰法近似、自洽场法等,这里就不再介绍了。

最后计算结果是否合理或接近于合理,应该运用维里 (Virial) 定理加以检验。

所谓维里定理,就是指当质点间只有静电吸引力(或排斥力)相互作用时,体系自身处于相对平衡状态的必要条件是平均动能 $\bar{T}$ 等于体系平均位能绝对值的一半,即

$$\bar{T} = -E = -\frac{1}{2}\bar{V} \quad (14)$$

式中 $\bar{V}$ 是平均位能, E 是总能量。也就是说,只有在这个条件下,电子运动动能所产生的排斥作用才能与净余的库仑吸引作用相平衡。如果 $\bar{T} > -\frac{1}{2}\bar{V}$ 时,则说明排斥作用过强,体系中电荷相反的质点就要彼此分离开来使 $\bar{V}$ 增加,同时使 $\bar{T}$ 减少,直到 $\bar{T} = -\frac{1}{2}\bar{V}$ 为止。所以计算结果如果是合理的话,则其平均动能和平均位能间关系应满足维里定理的要求。

一般说来,如由变分法原理求得的近似波函数,若能同时满足维里定理的要求,那么,这一波函数就能较好近似地表示体系的真实状态。

共价键的本性

化学键的本性,特别是其中共价键的成因,一直是化学基础理论的一个重要研究课题。对于我们化学教学工作者来说,也是急待解决的重大问题之一。

长期以来,对于大量有机化合物以及许多同核双原子分子,总弄不清它们究竟是怎样形成的,所以直到 1828 年还是在一种神秘的生命力学说统治下来认识有机物的结构。以后随着从无机物氰酸铵合成有机物尿素的成功以及开库勒 (A. Kekulé) 的碳原子四价学说的建立,特别是到了十九世纪末,电子的发现和原子结构的初步认识,使路易斯 (G. N. Lewis) 第一次提出了共价键是由原子间共享电子对所造成的结果。但是根据当时的电磁学知识,很难解释为什么共享一对电子就可以促使两个原子结合在一起。

自从 1924 年发现了电子的波粒二象性,1926 年建立了薛定谔方程后,1927 年海特勒 (Heitler) 和伦敦 (London) 第一次用量子力学的基本原理——变分法来处理氢分子的问题,成功地解释了氢分子的成因,他们解得了 H_2 。有两种分子轨道,相应地就有两种状态,两种能量曲线(如图 5 所示)。当两个氢原子从远处逐渐接近时,它们之间的相互作用逐渐增大,在较近的距离下,原子间的相互作用由它所含电子的自旋方向而定。如果两个电子自旋是反平行的,那么当两原子在达到平衡距

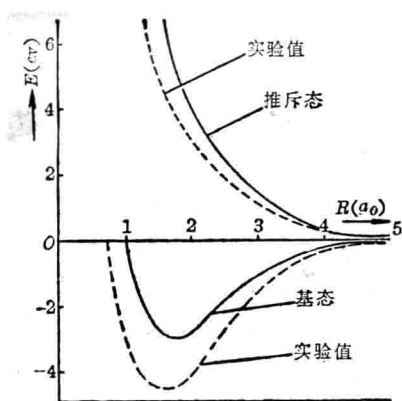


图5 H_2 的能量曲线

离以前时,原子间的相互作用是吸引的,体系的能量随原子间距离 R 的减小而不断降低,到达平衡距离时能量达到最低点。以后随 R 的减小而迅速升高,能量曲线出现“位能谷”, H_2 就振动于平衡距离的附近而稳定地存在。这就是 H_2 的基态。如果电子的自旋是平行的,根据包里(Pauli, W)原理,原子间的相互作用永远是排斥的,不能形成稳定的 H_2 ,这就是 H_2 的排斥态。

那么,在原子形成分子时,又是怎样引起能量降低的?

过去比较传统和流行的看法,认为化学吸引主要来自于电子的“离域”。如由亥尔曼(H. Hellmann)提出的“位箱模型”就是这种观点,它把原子比作一个容纳电子的小位箱,分子比作一个容纳电子的较大位箱,于是原子形成分子时能量的降低,就可比作为“位箱”扩大时电子动能的降低。而许多共振论者认为

“共振”就是“离域”,例如苯分子中 π 电子运动范围的扩大等等。因此,看来当今在化学领域内,把“离域”看成为化学吸引的主要来源的观点是相当普遍的,即认为在形成分子时,原子轨道是不变的,最多只是电子的交换或运动范围的扩大。

自从60年代以来,人们已对 H_2 作了精确的计算——即对原子在形成分子时,由于电荷的重新分配而引起电荷密度变化的精确计算,并应用维里定理对这种计算结果及其发展过程加以分析,认为当两个氢原子逐渐靠近但距离仍大于3个原子单位时,合适的原子轨道发生相互交盖或相互干涉的现象,而且是正的干涉效应(或叫加强性干涉)使电子平均动能降低。随着两原子的不断靠近,这种正干涉效应愈来愈显著。正干涉现象可以促使核两边的电子云向两核中间地区集中,形成“电子桥”,以作为进一步吸引的中心。这实际上却是和上述“离域”相反的一个“定域”过程,正是这种“定域”过程,使两核中间地区的电子云密度远比两个孤立原子的相应区域的电子云密度为大,即使考虑了电子对核的屏蔽作用以后,其净余的吸引势力还是相当大的。并且也正是由于这种“定域”效应,使得两核中间地区电子云分布曲线变得更平坦些,因而使电子的平均动能降低。(在反键轨道中,或 H_2 的排斥态时,非但没有这种定域效应,相反,却有电子云向核外地区分散,也就是更加“离域”,以致使体系的电子的平均动能增加,这种干涉叫做负干涉效应。)当然,如果相互交盖的原子轨道不能满足一定的对称性条件,就不能发生加强性干涉作用。

由于这种正干涉效应引起的“定域”过程,使得电子的平均动能降低,减小了体系的排斥因素,打破了原来体系内电子运动中吸引与排斥相互平衡的关系。这就使得原子轨道发生收缩,将电子云更加紧缩于原子核的紧邻,形成在两核中间地区较为密集的电子云,成为相当强大的吸引中心,克服两核间的排斥力而把两核以一定强度吸引起来。在这同时电子位能大幅度减小,动能增加,以保持动能与位能绝对值的比例重新符合维里定理的要求(为1:2),达成新的吸引与排斥的相对平衡关系。

伴随着干涉效应而来的,除了原子轨道的“收缩”以外,还有轨道的“极化”。因为既然有电子云从核的背面向两核中间地区密集,这就使得原来的电荷发生了重新分配,即原子轨道变形了。这种原子轨道的变形就是轨道的极化。轨道的极化也反过来促进正干涉效应的发生。

当然,对于多电子体系中,还应考虑电子自旋方向的相关效应以及电子相互间库仑排斥的相关效应等因素在形成化学键过程中所起的重要作用,由于篇幅关系,此处不再烦述了。

由此看来,量子化学所分析的化学键本性主要是根据体系内电子的动能、电子之间以及原子核之间的相互排斥作用和电子与原子核之间的相互吸引作用而形成的对立统一。化学吸引赖以形成

的不单是由于电子或轨道的“离域”，而更主要是与之相对立但又与之相互依存的“定域”作用。这种定域作用导致电子桥的形成，作为吸引中心把两核紧密地吸引起来。造成“定域”的因素，有正干涉效应，轨道的“收缩”与“极化”等。而“定域”又反过来促进这些因素的发展。因此，分析化学键的成因，应着重从定域与离域、吸引与排斥的辩证关系出发，特别注意在原子轨道向分子轨道转化时原子轨道所发生的质变，而不能认为分子轨道只是原来原子轨道的简单组合。

从苯分子的“从头计算”结果对苯的电子结构的一些新看法

在有机化合物结构的教学中，苯分子的结构一直是老师们所关心的问题。自从三十年代以来，由于测定分子结构的物理方法的发展以及量子化学价键理论和简单分子轨道理论的经验计算结果，人们已经在经典结构理论基础上，对苯分子的电子结构提出了 sp^2 杂化构成苯环的 σ 键的骨架以及 π 轨道离域的理论，认为苯分子具有较大稳定性的原因是由于价电子中 π 电子系处于扩展于 6 个 C 原子的较大分子轨道（通常称为离域了的分子轨道）。这是继开库勒的苯环理论后对苯分子结构认识的又一次重大进展。但是，这种理论由于完全没有考虑 σ 键的情况，所以在说明芳香族化合物容易起离子型的取代反应方面尚有不足之处——而这正是芳香族化合物区别于脂肪族化合物的最重要特征。最近 x -光电子能谱的实验数据表明，包括苯分子在内的极大多数物质，其内层电子都表现有明显的化学位移。这一点 π -轨道的离域理论是完全没有考虑过的。它意味着人们对苯分子电子结构的认识仍应进一步发展。为此，我们对苯进行了比较严格的 LCAO-MO-HFR-SCF“从头计算”（即以原子轨道线性组合成分子轨道，用 Hartree-Fock-Roothaan 自洽场法进行“从头计算”）。

苯分子共有 42 个电子，占用 21 个分子轨函，最小基函数集合包括 36 个原子轨函，即对每一对 C, H 原子选用 H_{1s} 、 C_{1s} 、 C_{2s} 、 C_{2px} 、 C_{2py} 、 C_{2pz} 诸原子轨函作为基函数集合，并用斯莱脱 (Slater) 型原子轨函 (简称 STO) 加以表示，再对每一个 STO 采用 Pople 的 STO-NG (即用 N 个高斯函数逼近一个 STO) 表示之。其次，将 C_{2px} 及 C_{2py} 旋转 $\frac{(l-1)\pi}{3}$ (l 为 C 原子的标号)，使各成为苯环外接圆的向径轨函及相切轨函 (各用 C_{2R} 及 C_{2T} 表示)，见图 6 所示。这样就可利用苯分子的 C_6 对称性。

在从头计算法中通常认为苯分子已属于“大”分子，认为只有在高速、大贮存量计算机上才能进行其从头计算。我们经过多方面的数学处理，又采用分步计算、中间数据贮存的方法，终于在国产 TQ-16 型中型计算机上计算出来了。根据计算结果，我们对苯分子的电子结构有以下几点新的看法：

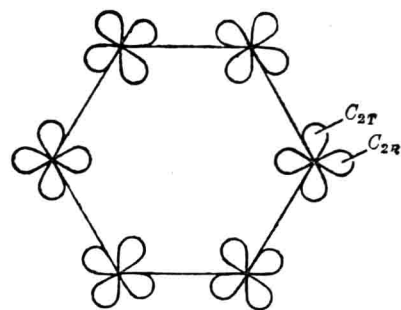


图 6 苯分子中各 C 原子上的相切及向径轨函

1. 不单是过去认为的唯一起作用的价电子轨函参加成键，而且 C 原子的内层电子轨函 C_{1s} 也参加成键轨函 (可占约 3%)，因而对苯分子的稳定性也起有不容忽视的作用。

2. 在由 C 原子及 H 原子形成苯分子时，各原子轨函都要发生明显的收缩现象。不但价轨函如此，C 原子的 $1s$ 轨函也有明显的收缩现象。 C_{1s} 及 C_{2s} 的这种明显的收缩，使其对 C 核的屏蔽作用更加强，故作用于 π 电子的有效核电荷有所减少，使 $C_{2\pi}$ 轨道稍为弥散一点。因而说，在苯分子中 C_{1s} 应比原子态 C_{1s} 有所收缩， $C_{2\pi}$ 则应比 C_{2s} 稍加弥散。这可能也是造成 π 键活动性较大

的原因之一。

3. 不仅在相邻的C原子间有对称性相匹配的原子轨函相互交盖成键,在 $2A_{1g}$ 及 $3E_{2g}$ 这两个分子轨道中,向径轨函的系数均取负值,因而是在苯环的内侧与 C_{2s} 轨函相互加强形成向苯环内侧伸展的不等性 $s\sim p$ 杂化轨函(如图7所示),各C原子的这种杂化轨函可相互交盖,使苯环内侧也有电子云较为密集的现象发生,所以苯环的 σ 键体系实际上也表现有环流键的特点,有其不同于脂肪族 σ 键的特征。

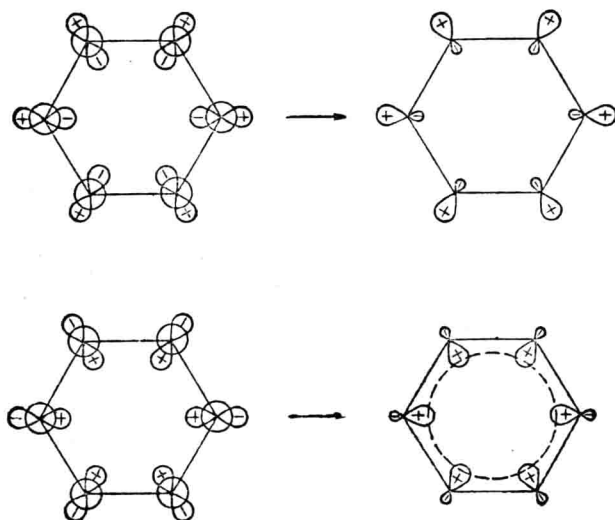


图7 苯环的 sp 不等性杂化

4. 苯环上的C—H键表现有明显的极性。我们曾按慕利肯(Mulliken)建议计算了C、H原子上电子的总集居数。得H原子上电子的集居数为0.83左右,C原子上电子的集居数为6.17左右。这说明尽管由于苯环的对称性,苯分子不具有偶极矩,但每一个C—H键却表现有明显的极性,H原子带有约0.17个正电荷,C原子则带有同数的负电荷。

以上3,4两点,可能是苯分子容易发生离子型取代反应的重要原因,有待进一步研究。

合成氨不用高温高压行吗?

目前量子化学不仅在化学键本性等基础理论研究方面有极重要的意义,就是在探索催化机理、有机合成的规律等方面也有很大的实践意义。就拿研究在温和条件下固氮问题来说。大家知道, N_2 是由2个N原子组成的,每个N原子有3个自旋平行的 $2p$ 电子。近年来,根据光电子能谱的测定以及量子化学的计算,已经得到了 N_2 的全部分子轨道能级数据。这些数据表明, N_2 中的三重键是由两个 π 键和一个 σ 键构成的。而且确证这三个最高被占轨道的能级都很低,其中 $\pi_y 2p$, $\pi_z 2p$ 的能级比 $(\sigma 2p)'$ 的能级更低^[4],也就是说 N_2 难于给出电子而被氧化;反之,其最低空轨道的能级都很高,其中 $(\sigma^* 2p)'$ 的能级比 $\pi_y^* 2p$, $\pi_z^* 2p$ 更高(图8),也就是说 N_2 又难以获得电子而被还原。这就从 N_2 的电子结构说明了它的化学惰性。所以要能使 N_2 和 H_2 反应合成氨必定要使用催化剂,目前所用的铁系催化剂须在高温时才具有催化活性,再加上合成氨反应是一个使体积缩小的反应,高压对反应有利。故工业上目前合成氨就必须采用高温高压的方法,这固然给设备、操作等诸方面带来了苛刻的要求,就是从热力学上合成氨的平衡常数和平衡时氨的含量数据来看,比较合理的条

件也是认为常温常压要比高温高压来得好。因此,如果能找到适宜的催化剂,使 N_2 在温和条件下充分活化,实现常温常压下的固氮,实在是最理想了。

要使 N_2 活化,不外两个办法。一是把 N_2 中成键轨道 $(\sigma 2p)'$ 里的电子拿去,即减小两个 N 原子间的电子云密度,以削弱其间的化学键;另一种是向 N_2 的反键轨道 $\pi_y^* 2p$ 里填充电子,以抵消成键效应,这样也可使 N 原子间的结合减弱。

人们从自然界中某些生物得到启发,例如豆科植物的根瘤菌不需要高温高压,却能固定空气中的氮而使它变成氨,原来在生物体的固氮酶中含有 Mo、Fe 等过渡金属。因此能不能设想把 N_2 络合到适当的过渡金属络合物上去,形成 $\sigma-\pi$ 配键,来使它活化呢?

根据 N_2 的最高被占轨道 $\pi_y 2p$ 、 $(\sigma 2p)'$ 和最低空轨道 $(\pi^* 2p)$ 的轨道图象(图 9),如果络合物是八面体构型的,则过渡金属原子中的 e_g 对称性空轨道(如 d 轨道)可以与 N_2 中的 $\pi_y 2p$ 或 $(\sigma 2p)'$ 的电子形成 σ -配键,这一方面削弱了 N-N 的结合,而同时又使中央金属离子原有的正电荷被中和掉,甚至会带上较大的负电荷(倘若配位体的个数较多时)。这种负电荷的过分聚集又会使中央过渡金属原子以 t_{2g} 对称性的已占领轨道中的电子与 N_2 的 $\pi_y^* 2p$ 反键空轨道形成 π 反馈键(因为电子由中央过渡金属 M 反过来授于配位体 N_2 ,所以叫“反馈”), N_2 的 $\pi_y^* 2p$ 空轨道得到电子后,抵消了 $\pi_y 2p$ 的成键效应,因而使 N-N 的结合减弱了。从而组成了 $\sigma-\pi$ 型配位键(图 10), σ 配位键

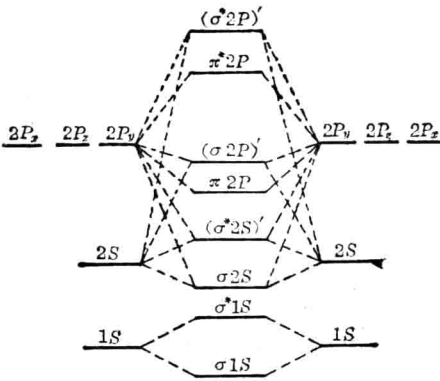


图 8 N_2 的分子轨道能级

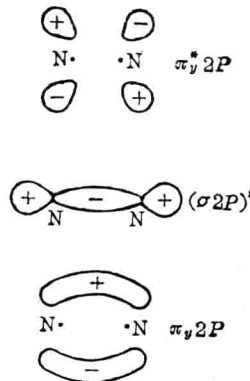


图 9 N_2 的 $\pi_y 2p$ 、 $(\sigma 2p)'$ 、 $\pi_y^* 2p$ 轨道图象

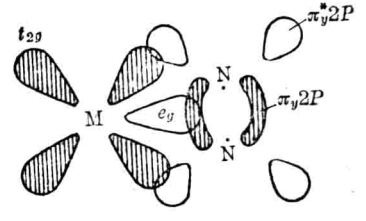


图 10 N_2 和过渡金属间的 $\sigma-\pi$ 配键

和 π 反馈键的这种相互促进的协同作用,使 N_2 和过渡金属之间有较强的结合,而使 N-N 之间的键则有较大程度的削弱,因而使 N_2 得到了充分的活化。剩下的问题,就是如何选择合适的过渡金属和以怎样的络合方式为最好。目前我国的化学工作者在这方面做了大量的工作,已取得可喜的成就。我们深信,在量子化学基本原理及计算方法的指导下,坚持实践第一的观点,定能在弄清温和条件下的固氮规律性、找出合适的催化剂方面取得更进一步的成果,为实现四个现代化作出贡献。

主要参考文献

- [1] 徐光宪编著:《物质结构》(1961年)。
- [2] C. A 柯耳逊:《原子价》(1966年)。
- [3] 吉林大学等校编:《物理化学基本原理》下册(1976年)。
- [4] 刘若庄:化学通报 5,6(1977年)量子化学基础(上)(下)。
- [5] 黄子卿:化学通报 1,2(1973年)配位场理论(上)(下)。
- [6] M. F. O'Dwyer 等:《Valency》(1978年)。

谈谈部编高二化学教材的几个问题

——教育部人教社中学化学组梁英豪同志
在座谈会上的发言

(一九七九年九月十二日于南京)

今天谈谈我们编写全日制十年制学校高二《化学》(征求意见稿)时是怎样考虑的和编写后感到存在的一些问题,提请老师们帮助我们考虑修改。

一、高二化学教材深度、广度和份量问题 高二化学每周4课时,共120课时,其中讲课95课时,实验17课时,复习机动8课时。讲课包括无机化学四章39课时,有机化学四章49课时,土壤农药一章7课时。全日制十年制学校《中学化学教学大纲(试行草案)》是77年编的,当时只花了几个月时间,粉碎“四人帮”后,消除“四人帮”对化学教材的不良影响,编写一个全国统一的大纲是完全必要的,但是毕竟时间紧了,有的地方可能考虑得还不够细致。当时,我们要学习外国的先进经验,但是外国教材进口也少。在外国(除苏联等几个国家外)一般中学中所用的化学教材同时有好几种甚至十多种版本。日本、美国常用的就有十多种。当时对他们各种类型的学校以及分科情况还没有仔细研究,对这些课的历史背景和发展情况几乎不知道。经过两年,进口的外国教材逐渐多了,跟来访的外国中学化学教师也稍有接触,对外国教材的了解也稍多了一些。但是,严格地说来,现在也只是开始研究,还没有系统地、完整地、大量地研究。现在初三、高一教材已成定局,在编写高二教材时,受到一定的约束,特别在牵涉到前后联系的教材时,不宜作较大的改动,但对大纲上规定的某些内容稍微作了修改。考虑到教材的难度和学生的情况,对教材内容作了一些精简,如“高能炸药”(没有收集到新材料)、“EDTA”(太复杂)、“合成树脂粘合剂和涂料”和“离子交换树脂”(塑料部分篇幅已太多)等没有编入外,有的改用小号字排印,如“酸碱质子理论”、“光合作用”、“新型化学电源简介”。有的原来用小号字排印的,如“纤维素的加工原理”和“聚酰胺纤维”也作了精简。即使在大纲的基础上作了一些精简以后,还包括无机化学的电解质溶液、有机化学和土壤农药三大部分,内容还是较多,征求意见稿的篇幅有357页(高一化学是233页)。请老师们考虑,这么多的份量行不行?根据高二化学教学的实际情况、师资水平、实验仪器和药品设备,并考虑到高二还要拿出一定的时间来复习,这样的深度、广度、分量是否教得了?有什么问题?如果教不了,可以精简哪些内容,希望我们怎样修改?删减哪些?精简哪些?哪些可以用小号字排?如果同意这些内容,老师们打算怎样教?

二、这次我们编写课本在基础理论上初步作了些改革和提高 十几年来,由于“闭关自守”,不了解外国中学化学教材改革的情况,看了一些外国资料,知道在化学教材改革方面,有的国家如美国在五十年代初,就有人对中学化学课程的落后表示不满和嘲笑。自从1957年苏联人造卫星上天后,批评就逐渐地增多起来,有人批评当时美国的中学化学教材旧,理论少,描述和静态多,而不是

结构和动态的；更多地注意记忆事实知识，而不是获得概念和发展理解；批评通过化学实验证实已知的知识，记录一些不加解释的现象；无限制地批评平衡化学方程式而不理解作为化学基础的关系或反应机理。美国化学键探讨方案研究会(Cheical Bond Approach Project)和化学教育内容研究会(Cheical Education Material)用了几年时间的试验，编写了两套中学化学教材：《化学体系》(Cheical System)和《化学——一个实验科学》(Chemistry——An Experimental Science)。两套课本大体包括九个主要题目：化学计算、原子性质、分子运动理论、周期性、能量、速度、化学平衡、键、酸碱。两套书的反应都牢牢建立在化学原理的基础上，而不是建立在描述化学的基础上，特别是《化学体系》，强调课程的主题是“化学变化是结构的变化”，选择了化学键贯串在整个课程，并提示主要的解释体系。“建立和破坏这些键就是化学。”能量变化的概念、反应机理和对化学键的理解形成了课程的中心。此外，两个课本还强调了化学实验。在《化学——一个实验科学》里，实验被看作是发展新思想而提出问题的依据，提出化学最令人愉快的部分是实验。《化学体系》有五部分共十八章：(一)化学变化的本性，强调物质间互相反应形成一个体系，相互反应可在实验中看到，为了理解相互反应，引入原子、原子排列成结构、原子量、分子量、化学式、化学方程式。(二)电和物的关系，发展一个基础去理解原子间如何反应形成结构，探讨进行化学反应和发生电能的体系。实验特征指出，电和所有物有关，研究了静电荷相互反应的本质得出结论，原子带电子的结构。(三)帮助解释体系的模型，第一种是电子云的模型，第二种是原子轨道模型。还介绍了焓，分子运动学说。(四)化学体系中的键，还介绍了在一个体系里电子和核的排列，给出了每个物质的三维空间的图画的思维方法。(五)有序、无序和变化，主要讲化学平衡和反应速度。全书几乎全讲理论，没有讲元素化合物的专章。化合物只是作为讲述理论中的一些例子。其它国家的中学化学课本，在理论上都有很大提高。总的趋向是理论加强，向结构、微观，定量方向发展。当然，事物的发展都有曲折。最近又往回摆了一些，也就是趋向从理论上降低一些，加强一些描述性的内容。日本教材理论性也强，分成物质性质、物质状态、物质变化、物质构造四大块，元素化合物知识就贯穿在里面讲。但是最近文部省发了一个文件，提到原子结构仅限于波尔模型的程度，轨道模型不必涉及；关于化学键也不必从电子论的高度加以讲解，理论上的某些内容可能有往回摆的倾向。但是从各国教材这些年的总趋势来看，理论是提高的。

我们从实现四个现代化的需要以及化学科学和化学生产的发展来看，从外国中学教材变化来看，也从“四人帮”对中学化学教材基础理论的破坏来看，都必须加强化学基础理论，主要是物质结构理论、热力学、动力学，但是也要考虑本国情况。我们的教材中物质结构理论在初中只简单介绍了组成物质的微粒，如分子、原子、质子、中子、电子以及原子中有核，核外电子分层排布的初步概念。在高一化学里，比较系统、比较集中地讲了原子结构，分子结构、晶体结构的初步知识。核的组成介绍了同位素的概念；核外电子运动方面介绍了核外电子排布的三条规律、能级交错现象，元素周期表内前 36 种元素原子的核外电子排布；化学键方面介绍了离子键的形成、离子的结构特征和离子晶体的性质；介绍了共价键的形成，共价键的饱和性和方向性，配位键；介绍了键能、键长、键角、电负性、分子极性等概念；介绍了分子间作用力和氢键以及它们对物质的物理性质的影响。物质结构的知识主要是在高一化学里讲。我们考虑高二化学主要是应用和巩固高一化学学过的结构知识。另外，还介绍了少量新的物质结构知识，如金属键、络合物的结构、放射性同位素、烷、烯、炔中碳原子的轨道杂化(σ 键、 π 键、杂化轨道理论)、大 π 键等。某些新补充的东西是高一讲过的内容的引伸和加深，如几种键。关于化学平衡方面，在“电解质溶液”章里运用了只有酸的电离常数、氨水的电离常数，水的电离常数；在羧酸里仅引了一张包括电离常数的表。关于热化学方面，在有机化学部分，如甲烷、乙烯、乙炔的燃烧，从碳化钙制乙炔、乙醇的氧化反应等反应里，化学方程式写

了燃烧热或生成的热量。请老师们考虑,高二化学(征求意见稿)运用过去学过的,主要是高一的理论知识,够不够?能不能起巩固作用?新增的和加深的行不行?写得怎么样?教起来有什么困难?怎样修改才好?

三、关于电解质溶液 这章包括的内容比较集中,包括1963年发布的全日制《中学化学教学大纲(草案)》里高一、高二的一些有关内容,再新增一些内容。围绕电离平衡引出水的电离、 pH 值、盐的水解等,根据溶液中电极上的氧化还原反应引出电池、电解等概念。篇幅较大,内容较多。

在编写大纲时,我们曾考虑把上述内容放在高一化学“物质结构”后讲,或将其中一部分内容如当量浓度等放在高一化学讲,但是又考虑到高一教材里已经有不少内容了(已有三章理论内容),再加,怕学生负担太重,因此就全部放到高二教材里。但是又感到这样编排内容还是较多、较集中,而且在整个中学化学教材中位置较靠后。这样编排不知道老师教、学生学,会有些什么困难?怎样修改才好?

四、关于元素知识的问题(也就是描述性知识的问题) 我们看到的教材里理论和元素知识并重的有西德、比利时等国的一些教材。美国的教材有重视理论而忽视元素知识的,如前面提到的《化学体系》。但是从目前使用最广泛的《现代化学》来看,元素化合物教材的页数约占三分之一。我们的大纲采取理论和元素知识并重,如果元素知识少了,理论就会“空”,但是一并重,分量就多了。高二化学(征求意见稿)里,第二、三、四章讲化学元素。第二章讲主族元素镁、铝,加上初中化学讲的氢、氧、卤素、碱金属,高一化学讲的硫族、氮族、碳族等,整个初、高中化学讲了十个主族,涉及26种主族元素,实际上真正按一种元素讲的,只有14种主族元素。高二化学里过渡元素一章讲了四种副族元素:铜、钛、铬、锰,另一章讲了一种副族元素铁,一共讲了五种副族元素;其他副族元素都是提一下,少的连蜻蜓点水也说不上。解放后,我们在一个很长时间内不讲副族元素,当时的理由是副族元素的结构比较复杂。直到1963年才打破这个框框,编入了副族元素一章(12课时),1966年出版的高三化学课本里编入了铜、铅、锌。

我看到的外国中学化学教材都讲副族元素,如《现代化学》讲了铁、钴、镍、铜、银、金,其中重点讲了铜、铁。当然,这个课本还讲了过渡元素的通性、过渡元素的分族、氧化态、颜色、络离子的形成、顺磁性和过渡元素的相同点等。

美国的《化学——一个实验科学》共二十五章,其中有两章讲过渡元素。第22章“第四周期的过渡元素”,从钪到锌讲了过渡元素的意义(包括电子排布、通性)。络离子中的键、两性络合物、自然界中的络合物,第四周期中过渡元素的特性(钪、钛、钒、锰、铁、铬、镍、铜、锌),其中铬、铁、镍讲的稍多一些,这章共23页。第二十三章“某些第六周期与第七周期的元素”,也就是第55—86,87—103号元素,讲了元素周期表的第六周期(包括镧系元素或稀土元素的存在和制备),元素周期表的第七周期元素(包括第七周期元素的存在,镭后面的元素,核稳定性和放射性,放射性的类型,核能),这章共四十页。

1966年前的课本只讲主族不讲副族,就不能介绍许多在国民经济上有广泛用途的副族元素,而且我国稀土元素的资源很丰富。从各国教材来看,一般都讲一些副族元素,如果我们要多讲,怕学生负担太重,因此只重点讲了铜、钛、铬、锰,另外综合讲了镧系元素和锕系元素。另外也是为了避免加重学生负担和造成重复,不讲金属总论、不知道行不行?

五、关于有机化学教材问题 高二课本里的有机化学教材共四章,讲课时数是49课时,占总课时的20.3%。1963年的大纲里有机化学讲课时数是44课时,占总课时的18%。现在,有机化学内容的比例增加了一些。其中高分子化合物讲课时数是8课时,占有机化学总时数的16%。1963年大纲里有机高分子讲课时数是7课时,占有机化学总时数的16.3%,两者相差不多。

从外国教材来看,我们看了西德、苏、法、日、美、比等国家一些中学化学教材中的有机化学部分,得到的印象之一是西德、法、苏等国的有机化学部分讲的较多,而美国的讲的较少。西德的《Chemie Kemper Flade》一书440页,教材中有机化学有132页,占30%,讲了烷、烯、炔、环、芳、卤代烃、醇、醛、酮、醚、羧酸、胺、糖、蛋白质、核酸高聚物、多元醇、多元酸、多官能团、芳烃等。理论方面有 sp^3 、 sp^2 、 sp 杂化、键角、键长、诱导效应、瞬间诱导、离域能、对映异构体,在氨基酸、羧基酸里讲酒石酸、单糖以及链式、环式和椅式等结构知识。

苏联出版的十年级化学课本里有机化学有202页,授课时数是105课时,占七~十年级350总课时的30%。十年级课本里讲了有机化合物结构学说,饱和烃(烷),不饱和烃(烯、炔)、芳香烃(苯)、醇、酚、醛、羧酸、酯、油脂、糖、胺、氨基酸——蛋白质(未讲核酸);葡萄糖分解步骤里讲氧化产生能量,高能物质; σ — π 键,比较详细地讲杂化,还讲了诱导效应,瞬间诱导;对官能团都从结构说明,单糖环式,蛋白质的螺旋形结构,蛋白质的合成,胰岛素。

法国的一本数学和自然科学组用的化学课本共134页,讲了烷、烯、炔、苯、醇、醛、酮、酯、醚、胺、酰胺、丙三醇、糖、(不讲核酸)蛋白质等;理论上不用 sp^3 杂化,但有甲烷四面体的图和球形模型。从法国发布的大纲来看,毕业班(相当于高三)还有某些分子结构(如 H_2 、 HCl 、 CO_2 、 H_2O 、 NH_3 、 CH_4 、 C_2H_4 、 C_2H_6 、 C_2H_2 、 C_6H_6)用来解释有机化学的某些反应(取代、加成、聚合);通过乙醇的官能团来讲,有机化学中官能团的概念、酯化、酯的水解。总之,法国高三化学课本里还将有机化学的内容进一步提高。

美国《现代化学》共30章,有机化学只讲两章,全书共627页,有机化学占43页,约占7%,只讲了烷、烯、炔、二烯烃、芳香烃、卤代烃、醇、醚、醛、酮、羧酸、酚;在 CO_2 中讲光合作用,不讲蛋白质; sp^3 、 sp^2 、 sp 杂化都有,但是仅用图表示,没有提出 σ 键、 π 键名称,可是又讲了 p - p 电子成键。有机化学的位置放在无机化学的中间,种类不算太少,但讲的简单。

日本现行教学计划,基础理科是必修的,但是化学I、II都是选修的,也可以选化学I,不选化学II。田村三郎等著的日本课本化学I里,有机化学讲得很少,在全书中只占9页,极简单地讲了什么是有机化合物,烃、烷烃、烯烃、炔烃、甲烷、乙烯、乙炔、醇、醛、羧酸、酯,简直象常识性的内容。田村三郎等著的化学II共173页,有机化合物的结构和反应共占51页,高分子化合物里有一些无机高分子化合物占32页,共83页,合计占48%;有机化合物的结构、高分子化合物讲得较多。总的讲,外国中学化学教材里一般都较多地讲了有机化合物。

在1966年前的我国中学化学课本里,有机化学的份量一直不算少。考虑到我国中学生升入大学的较少,绝大部分学生只是在中学里学一点有机化学知识。目前中学里又没有开设有机化学的选修课。我们认为,中学生还是应该具备一定份量的有机化学知识。因此,在课本里编入了一些有机化学的内容。请大家考虑,有机化学的份量总的来看是多还是少?每一章、每一节内容行不行?请提意见。

* * * * *

编者按 据了解,高二化学(征求意见稿)里原来有的而在试用本里未编入的内容有:“同离子效应”、“缓冲溶液”、“干电池”、“蓄电池”、“金属晶体中的原子的配位数”、“铬和锰”、“镧系元素和锕系元素”、“自由基和自由基的反应”、“葡萄糖的氧环式结构”等。原是小号字排,而在试用本未编入的内容有:“酸碱质子理论”、“新型化学电源”、“核酸”等;改用小号字排的内容有:钛、 σ 键、 π 键、杂化轨道理论等。



开展有关“摩尔”问题的讨论(续)

怎样讲清“摩尔”概念

杭州开元中学 郑克良

“摩尔”是国际单位制中七个基本单位之一，对化学工作者来说是一个极重要的概念。但是长期来对它的认识是不清晰的，有人把它看成是质量单位，有人看成是数量单位，有人说既是质量单位又是数量单位。

在第十四届国际计量会议后为摩尔这个旧名称引入了一个新的物理量——“物质的量”，我觉得把这个量的含义讲清了，作为这个量的单位的摩尔的概念也就清晰了。部编高一课本中虽然提到了“摩尔是物质的量的单位”，但是一提而过，对于“物质的量”这四个字作为一个新的物理量丝毫未予以说明，这就会给学生理解摩尔带来困难，因为学生很可能将“物质的量”理解为日常生活中所泛指的事物的多少的意思，这样摩尔就会失掉个性。

所以要讲摩尔就首先要讲清“物质的量”这个新的概念，而不能回避。

因此，《摩尔》这一节的第一个标题就应是1.“物质的量”和它的单位“摩尔”。

怎样引出“物质的量”这个概念呢？可从物质的多少常以质量这个物理量的多少来计量，或以体积这个物理量的多少来计量，如1公斤炭，1公斤氧气，2立方米氢气等等，而且2公斤物质比1公斤物质多，2立方米物质比1立方米物质多，这是常识。但是从化学的眼光来看1公斤炭比1公斤氧气多，就是2公斤氧气仍是比1公斤炭多，这似乎“反常”，但是并不奇怪，对反应 $C + O_2 = CO_2$ 就这两种情况来说，

反应后都是炭有剩余，也就是说从化学眼光看1公斤炭比2公斤氧气多。以体积这个量来计量物质多少时也一样会出现“反常”。

这是为什么呢？因为化学反应时物质间是以一个微粒(原子、分子或离子等)和一个微粒或几个微粒和几个微粒发生反应重新组合为新的物质，而不是1克和1克或1公斤和1公斤或1立方米和1立方米物质互相起反应，所以就化学的眼光来看就要有一个别的物理量来计量物质的多少才比较恰当，这就引出“物质的量”。接下去就要致力于说明这个量的含义。

显然这个量要和一定的微粒数目相联系，那末这“数目”是多少才合适呢？用1个2个吗？显然是不行的，因为原子分子太小了，几个是称量不出的，而且实际的化学反应也不可能只是几个微粒在反应，这样的反应人们也感觉不出来。这样就会想到这个数目总应是“许许多多”。那末这“许许多多”又是多少呢？而且人们当然希望这“许许多多”最好和我们化学上所熟悉的原子量、分子量有密切的联系。为此就指出为纪念意大利科学家阿佛加德罗，1971年第十四届国际计量会议规定：“12克 ^{12}C 原子中所包含的 ^{12}C 原子的个数为阿佛加德罗常数”(这部分可板书而且可推算出常数值等于 6.02×10^{23})，接着就给“物质的量”下定义：“以阿佛加德罗常数个微粒为计量单位的表示物质多少的量叫物质的量”，并指出化学反应中需要采用这个量来计量物质的多少。

为了进一步明确这个量的含义,可以再举下述例子来体会。有两辆卡车装运砂子,当然可以所装载的砂子的质量多少吨来计量来计算,也可以砂子的体积立方米数来计量来计算,但是从化学观点来看就需要计数,数出 6.02×10^{23} 个砂粒为一“堆”,看看有多少这样的“堆”。如果第一辆卡车上装了十万“堆”,而第二辆装了十五万“堆”,那末我们就说第二辆车上装的砂子的“物质的量”比第一辆多。然后强调,一定要破除固有观念,以为只有质量、体积这样的量才可用来计量物质的多少,强调指出在化学反应中是用“物质的量”这样一个量来计量物质的多少的。

明确了“物质的量”这个概念后,摩尔就有

了依据,就好提了,正如质量有单位就是千克,长度有单位就是米,那末“物质的量”作为一个量也得有单位啊,这就是“摩尔”,接下去就写出第2个小标题并下定义“2.摩尔:摩尔是物质的量的单位,某物质如果包含有阿佛加德罗常数个微粒,这个物质的‘物质的量’就是1摩尔”。

很明显,如果不讲清“物质的量”这个概念,摩尔就将处于“皮之不存毛将焉附”的地位。

总之这一节教材要先讲清“物质的量”,这样摩尔、摩尔质量、摩尔数等概念也就迎刃而解了。

这是自己的一点粗浅体会,不当之处,请不吝指正。

物质的数量单位——摩尔

武汉路局浙河铁中 袁炯明 王鸣鹤

全日制十年制学校高一化学课本中引入摩尔的概念,显然摩尔是化学上常用的重要的基本单位,它是以微粒数量来表示物质的量。搞清这个概念,并熟练掌握化学中有关基本量的计算,对学好这门课程有十分重要的作用。

怎样从克原子,克分子引出摩尔原子,摩尔分子的概念呢?

一九七一年有四十多个国家参加的国际权度大会(CGPM)通过关于在国际单位制中增加第七个基本单位的决议,这个基本单位叫做摩尔(mol)。摩尔是表示物质质量的单位,某物质所含的微粒数和0.012千克碳-12(^{12}C)的原子数相同(等于阿佛加德罗常数)这种物质的量就是1摩尔。该微粒可以是原子、分子、离子、电子及其他粒子或是这些粒子的特定组合体。

1摩尔碳原子含有 6.02×10^{23} 个碳原子,

质量是12克/摩尔。

1摩尔氧分子含有 6.02×10^{23} 个氧分子,质量是32克/摩尔。

1摩尔水分子含有 6.02×10^{23} 个水分子,质量是18克/摩尔。

1摩尔氢离子含有 6.02×10^{23} 个 H^+ ,质量是1.0079克/摩尔。从这些例子可以看出,1摩尔任何基本结构微粒(原子、分子或离子等)都含有 6.023×10^{23} 个粒子,但这些粒子的质量都是互不相同的。这好比10个乒乓球和10个篮球质量不同一样。

任何元素1摩尔原子的质量等于以克为单位的该元素的原子量,而分子量又是原子量的加和,所以物质1摩尔分子的质量等于以克为单位的该物质的分子量。摩尔质量的单位是“克/摩尔”。

也谈“摩尔”

唐山市东矿区教育局教研室 张 允

“摩尔”这个概念并不难理解，在国际单位制中给它下了很明确的定义。难以理解的是“物质的量”这个物理量，所以要树立摩尔的概念，搞清楚“物质的量”的涵义是个关键问题。

“物质的量”和“长度”、“质量”等物理量一样，也是基本的物理量，由于它的问世较晚，又由于“物质的量”这个词作为科学名词，从结构和用字上都不够理想，在第十三届国际计量大会上曾有议论。但是由于没有更好的名称为大家所公认，所以单位咨询委员会宁愿保留这个已被采用了的法文 (*quantité de matière*) 和英文 (*amount of substance*) 名称。”(引自化学通报 1978 年第六期中国计量科学研究所姜友陆所写“物质的量及其单位摩尔的概念和应用”一文) 所以至今还未有见到人们给它以更好的解释。我想，能不能这样理解：“物质的量”它也象“长度”、“质量”等物理量一样，是用于计量的，它是用于计量我们肉眼见不到的物质的微观粒子多少的物理量，它是以统计学的方法，一“堆”、一“堆”的去计量，而不是要求一个、一个地去真实地数微观粒子的数目有多少。

这样，我们在搞清楚“物质的量”和“长度”、“质量”等一样是用于计量的物理量之后，就很自然地想到需要有一个单位。“米”是长度单

位，“千克”是质量单位，那么“物质的量”是以什么为单位呢？在国际单位制中规定是以“摩尔”为单位。至此，我们可以清楚地知道，“摩尔”和“米”、“千克”等一样，是一个基本单位，它不是由其他基本单位如长度、质量等单位导出的，而是有它自己独立的量纲。

我们已经知道长度单位——米，质量单位——千克等都是人为规定的，那么物质的量的单位——摩尔也是人为规定的。从国际单位制的规定中，我们可以知道：一物系的“物质的量”所包含的基本单元数目与 0.012 千克碳-12 中的碳原子数相等时，便为一摩尔。

综上所述，“摩尔”是一个基本单位，它是“物质的量”的单位，它既不是质量单位，也不是数量单位。因为“物质的量”和“质量”是涵义不同的两个物理量；“物质的量”虽然是通过“0.012 千克碳-12”中含有的原子数为单位来计量，但“0.012 千克碳-12”中含有的原子数目我们只能测得它的近似值，而不能测得它的真值，因此用这个“近似值”的整数倍、分数倍来表示物质的量的时候，并不能指出结构粒子的真实数目。所以既不能把摩尔说成是质量单位，也不能说成是“数量”或“数目”单位，只能说成是“物质的量”的单位。

对新教材“摩尔”概念提法的一点意见

新疆石河子市一中 谢开荣

新编高中化学第一册关于摩尔概念的提法似有欠缺之处，现提出供参考。

1. 课本第 28 页，摩尔定义：“摩尔是表示

物质的量的单位，某物质如果含有阿佛加德罗常数个微粒，这种物质的量就是 1 摩尔。”这样

(下转第 3-28 页)