

## 内 容 提 要

本书适合作纺织类、化工类及相关专业的高职高专教学用书。全书整合了无机化学、分析化学及物理化学的主要内容,深入浅出,叙词简练,既注重大专阶段与高中阶段内容的衔接,又能为高等职业技术学院毕业生今后的进一步深造打下一定的化学基础。

本书可供精细化工、轻纺染整、食品检测、卫生监督等与化学相关的专业学生使用。

### 图书在版编目(CIP)数据

基础化学.上册/戴桦根主编,陈祝军副主编.—北京:中国纺织出版社,2005.8

全国纺织高职高专规划教材

ISBN 7-5064-3414-8/TS·1994

I.基... II.①戴... ②陈... III.化学—高等学校—技术学校—教材 IV.06

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 070531 号

---

|          |          |
|----------|----------|
| 策划编辑:朱萍萍 | 责任校对:楼旭红 |
| 责任设计:李 然 | 责任印制:黄 放 |

---

中国纺织出版社出版发行

地址:北京东直门南大街 6 号 邮政编码:100027

邮购电话:010—64168110 传真:010—64168231

<http://www.c-textilep.com>

E-mail:faxing@ c-textilep.com

三河新科印刷厂印刷 各地新华书店经销

2005 年 8 月第 1 版第 1 次印刷

开本:787×1092 1/16 印张:20.75

字数:394 千字 印数:1—4000 定价:35.00 元

---

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页,由本社市场营销部调换

# 序

翻开中国教育史,早在 19 世纪 60 年代,在清政府的洋务运动中,就已经孕育出职业教育的萌芽。民国初年,职业教育得到了初步发展。新中国成立之后,我国的职业教育才进入了一个新的历史时期,建立了社会主义职业教育体系,为我国的国民经济恢复、发展和工业基础的奠定做出了历史性的贡献。然而,当时由于对职业教育缺乏准确的界定和社会对职业教育的认可程度不高,阻碍了职业教育的发展。随着我国社会、经济的不断发展和教育改革的逐步深入,职业教育的地位才逐步被社会、国家所重视。特别是 1996 年和 1998 年,当时的国家教委和后来的教育部先后提出“三改一补”和“三多一改”的大力发展高等职业教育的方针,全国高等职业院校才如雨后春笋般地发展起来。

纺织高等职业技术学院就是在这样的背景下建立和发展起来的,目前已发展成为纺织行业各类教育中一支重要的教育体系。

为了使纺织高等职业技术教育健康稳步发展,中国纺织服装教育学会高职高专教学工作委员会按照《教育部关于加强高职高专教育人才培养工作的意见》的有关要求,在制定了纺织高职高专专业目录(指南)的基础上,召开了专门工作会议,成立了 6 个专业教学指导委员会和相关教材编写委员会,并和中国纺织出版社及东华大学出版社一道规划了纺织高职高专首批教材 30 余种。在中国纺织服装教育学会高职高专教学工作委员会的直接领导下,在全国纺织高职高专院校、中国纺织出版社和东华大学出版社的积极支持参与下,在各个教材编写委员会的共同努力下,终于完成了首批纺织高职高专全国统编教材,以期满足纺织高职高专院校教学的需要。

尽管有如此众多的单位、院校、部门和众多的专家、教授、学者的共同努力,但仍不能说这套教材已经尽善尽美,错误及不准确之处在所难免。希望广大同行、教师和使用及时提出宝贵意见,以期提高这套教材的整体质量。

中国纺织服装教育学会  
高职高专教学工作委员会

---

## 全国高职高专染整专业教材编写委员会

---

主任委员 夏建明

副主任委员 杭伟明 蔡苏英

委员 (按姓氏笔画排序)

|     |     |     |     |     |     |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 于松华 | 王 宏 | 王淑荣 | 田 丽 | 刘妙丽 | 杨蕴敏 |
| 李振华 | 李锦华 | 沈志平 | 张 峰 | 陈祝军 | 陈晓玉 |
| 林 杰 | 林细姣 | 杭伟明 | 郑光洪 | 夏 冬 | 夏建明 |
| 曹修平 | 谢 冬 | 路艳华 | 蔡苏英 | 廖选亭 | 戴桦根 |

# 前言

《基础化学》是按中国纺织服装教育学会高职高专教学工作委员会于2004年通过的编写大纲编写的专业教材,本教材共分上、下两册,本书为上册。

本教材共分十七章,整合了轻化工程类专业的无机化学、分析化学及物理化学三门课程的基本内容及实验,力求深入浅出,叙词简洁,切实做到大专阶段与高中阶段内容的衔接,又能为高等职业技术学院毕业生今后的发展打下一定的化学基础,教学时间设计在70~80课时。本书适合化工、轻纺、食品、卫生等与化学相关专业的高等职业技术学院学生使用。最后一章为部分实验内容,使用者可根据专业的需要进行选取。书中用“\*”标注的内容,可供教师根据专业和学时作取舍时参考。此外,本书每章后所附习题中部分习题给出了参考答案,供学生在学习过程中参考。

参加本书编写的均为纺织高等职业技术学院从事染整、化学专业教学工作多年的副高级职称以上人员,对专业课程及基础化学课程较为熟悉,经验丰富。其中第一、第十四章由韩德红老师编写;第二、第三章由戴桦根老师编写;第四、第十章由刘建老师编写;第五、第六章由陆宁宁老师编写;第七、第八章由钱建栋老师编写;第九、第十一章由陈祝军老师编写;第十二、第十三章由罗军老师编写;第十五、第十六章由李淑华老师编写。全书由戴桦根、陈祝军老师统稿,并由浙江理工大学汪澜教授主审。本书参阅了国内许多知名专家和学者的专著,在此向他们表示衷心的感谢。

由于水平有限,书中难免有不妥之处,恳请读者批评指正。

编 者  
2005年5月

# 目录

|     |                          |    |
|-----|--------------------------|----|
| 第一章 | 物质结构 .....               | 1  |
| 第一节 | 物质结构理论概述 .....           | 1  |
| 第二节 | 核外电子的运动状态 .....          | 1  |
|     | 一、微观粒子的波粒二象性 / 2         |    |
|     | 二、微观粒子运动状态的描述——薛定谔方程 / 2 |    |
|     | 三、概率密度与电子云 / 4           |    |
|     | 四、四个量子数 / 5              |    |
| 第三节 | 元素的基本性质与原子结构的关系 .....    | 7  |
|     | 一、有效核电荷数( $Z^*$ ) / 7    |    |
|     | 二、原子半径 / 8               |    |
|     | 三、电离能 / 9                |    |
|     | 四、电子亲和能( $Y$ ) / 10      |    |
|     | 五、电负性 / 11               |    |
|     | 六、元素的金属性与非金属性 / 12       |    |
|     | 七、元素的氧化值 / 12            |    |
| 第四节 | 化学键理论概述 .....            | 12 |
|     | 一、共价键 / 12               |    |
|     | 二、离子键 / 13               |    |
|     | 三、金属键 / 14               |    |
|     | 四、分子间力与氢键 / 14           |    |
|     | 五、晶体结构 / 14              |    |
|     | 思考题与习题 / 15              |    |
| 第二章 | 溶液 .....                 | 17 |
| 第一节 | 溶液的浓度 .....              | 17 |
|     | 一、常用浓度 / 17              |    |
|     | 二、计算举例 / 18              |    |

|                       |    |
|-----------------------|----|
| 第二节 非电解质稀溶液的依数性 ..... | 19 |
| 一、溶液的蒸气压下降 /          | 19 |
| 二、溶液的沸点升高和凝固点下降 /     | 21 |
| 三、渗透现象和渗透压 /          | 23 |
| 第三节 乳浊液与高分子溶液 .....   | 24 |
| 一、表面活性剂 /             | 24 |
| 二、乳浊液 /               | 25 |
| 三、高分子溶液 /             | 26 |
| 思考题与习题 /              | 26 |
| <br>                  |    |
| 第三章 化学热力学 .....       | 28 |
| 第一节 几个基本概念 .....      | 28 |
| 一、体系和环境 /             | 28 |
| 二、状态和状态函数 /           | 28 |
| 三、过程与途径 /             | 29 |
| 第二节 热化学基础 .....       | 29 |
| 一、热和功 /               | 29 |
| 二、热力学第一定律 /           | 30 |
| 三、焓和热化学方程式 /          | 31 |
| 第三节 熵的含义 .....        | 33 |
| 一、化学反应的自发性 /          | 33 |
| 二、混乱度和熵 /             | 34 |
| 第四节 吉布斯自由能 .....      | 35 |
| 一、自由能 /               | 36 |
| 二、标准摩尔生成自由能 /         | 36 |
| 思考题与习题 /              | 37 |
| <br>                  |    |
| 第四章 化学反应速率 .....      | 39 |
| 第一节 化学反应速率与反应级数 ..... | 39 |
| 一、反应速率的定义 /           | 39 |
| 二、反应速率曲线 /            | 40 |
| 三、反应速率的测定 /           | 41 |
| 四、反应级数 /              | 42 |

|                 |                     |    |
|-----------------|---------------------|----|
| 第二节             | 温度与反应速率的关系 .....    | 43 |
| 一、阿仑尼乌斯经验公式     | /                   | 43 |
| 二、活化能           | /                   | 44 |
| 第三节             | 浓度与反应速率的关系 .....    | 46 |
| 一、基元反应与非基元反应    | /                   | 46 |
| 二、质量作用定律        | /                   | 47 |
| 三、零级反应和一级反应的特征  | /                   | 48 |
| 第四节             | 催化作用 .....          | 51 |
| 思考题与习题          | /                   | 52 |
| 第五章             | 化学平衡 .....          | 55 |
| 第一节             | 化学平衡的概念 .....       | 55 |
| 一、化学平衡          | /                   | 55 |
| 二、平衡常数          | /                   | 56 |
| 第二节             | 化学平衡的移动 .....       | 60 |
| 一、浓度或分压对化学平衡的影响 | /                   | 60 |
| 二、总压对化学平衡的影响    | /                   | 61 |
| 三、温度对化学平衡常数的影响  | /                   | 63 |
| 第三节             | 平衡常数与吉布斯自由能 .....   | 63 |
| 思考题与习题          | /                   | 65 |
| 第六章             | 酸碱平衡 .....          | 67 |
| 第一节             | 强、弱电解质溶液 .....      | 67 |
| 一、强电解质          | /                   | 68 |
| 二、弱电解质          | /                   | 68 |
| 第二节             | 弱电解质的电离平衡 .....     | 68 |
| 一、一元弱酸、弱碱的电离平衡  | /                   | 68 |
| 二、多元弱酸的电离平衡     | /                   | 71 |
| 第三节             | 水的电离与溶液的 pH 值 ..... | 72 |
| 一、水的电离          | /                   | 72 |
| 二、溶液的酸碱性和 pH 值  | /                   | 73 |
| 第四节             | 缓冲溶液 .....          | 74 |
| 一、缓冲溶液的组成       | /                   | 75 |

- 二、缓冲作用原理 / 75
- 三、缓冲溶液 pH 值的计算 / 76
- 四、缓冲溶液的选择和配制 / 77
- 五、缓冲溶液的应用 / 78

思考题与习题 / 78

第七章 化学分析 ..... 81

第一节 化学分析概述 ..... 81

- 一、分析方法的分类 / 81
- 二、化学分析和仪器分析 / 82
- 三、定量分析的一般过程 / 83

第二节 误差及实验数据处理 ..... 86

- 一、计量或测定中的误差 / 86
- 二、误差的表征与表示 / 88
- 三、误差的减免 / 90
- 四、有效数字及其应用 / 91
- 五、有限实验数据的统计处理 / 93
- 六、分析结果的处理与报告 / 99

第三节 滴定分析法 ..... 100

- 一、滴定分析法概述 / 100
- 二、滴定分析的主要方法和特点 / 101
- 三、滴定方式和滴定分析法要求 / 102
- 四、基准物质和标准溶液 / 103
- 五、滴定分析的计算 / 104

思考题与习题 / 108

第八章 酸碱滴定法 ..... 110

第一节 酸碱平衡 ..... 110

- 一、基本概念 / 110
- 二、酸碱反应的平衡常数 / 110
- 三、酸碱的强度、共轭酸碱对的  $K_a$  和  $K_b$  的关系 / 111
- 四、酸碱溶液中氢离子浓度的计算 / 111
- 五、酸碱指示剂 / 113

|                     |                  |     |
|---------------------|------------------|-----|
| 第二节                 | 酸碱滴定法的基本原理 ..... | 115 |
| 一、强碱滴定强酸或强酸滴定强碱     | /                | 115 |
| 二、强碱滴定一元弱酸或强酸滴定一元弱碱 | /                | 118 |
| 三、多元酸、混酸的滴定         | /                | 120 |
| 第三节                 | 酸碱滴定法的应用 .....   | 121 |
| 一、常用酸碱标准溶液的配制和标定    | /                | 121 |
| 二、混合碱的分析            | /                | 122 |
| 三、铵盐中含氮量的测定         | /                | 126 |
| 四、某些有机化合物含量的测定      | /                | 126 |
| 五、极弱酸(碱)的滴定         | /                | 127 |
| 六、某些无机物含量的测定        | /                | 127 |
| 思考题与习题              | /                | 128 |
| 第九章                 | 沉淀溶解平衡 .....     | 130 |
| 第一节                 | 溶度积的概念 .....     | 130 |
| 一、难溶电解质的溶解与沉淀平衡     | /                | 130 |
| 二、溶度积定义             | /                | 130 |
| 第二节                 | 沉淀的溶解和生成 .....   | 131 |
| 一、溶度积规则             | /                | 131 |
| 二、分步沉淀及沉淀的转化        | /                | 132 |
| 第三节                 | 沉淀滴定法概述 .....    | 133 |
| 一、沉淀滴定法的条件和银量法      | /                | 133 |
| 二、莫尔法               | /                | 133 |
| 三、佛尔哈德法             | /                | 136 |
| 思考题与习题              | /                | 138 |
| 第十章                 | 配位化合物 .....      | 140 |
| 第一节                 | 配位化合物的基本概念 ..... | 140 |
| 一、配合物的定义            | /                | 140 |
| 二、配合物的组成            | /                | 140 |
| 三、配合物的命名            | /                | 142 |
| 四、螯合物               | /                | 143 |
| 第二节                 | 配位化合物的应用 .....   | 144 |

|                        |       |
|------------------------|-------|
| 一、配位平衡和配合物的稳定常数        | / 144 |
| 二、EDTA 与金属离子的配位反应      | / 146 |
| 第三节 配位滴定法的概述           | 151   |
| 一、配位滴定法                | / 151 |
| 二、配位滴定法的方式             | / 152 |
| 三、金属指示剂                | / 153 |
| 四、EDTA 配位滴定的基本原理       | / 156 |
| 五、提高配位滴定选择性的方法         | / 160 |
| 第四节 配位滴定法的应用           | 162   |
| 一、EDTA 标准溶液的配制与标定      | / 163 |
| 二、EDTA 标准溶液的配位滴定       | / 163 |
| 思考题与习题                 | / 164 |
| <br>                   |       |
| 第十一章 氧化还原与电化学          | 168   |
| 第一节 氧化还原反应及方程式的配平      | 168   |
| 一、氧化还原反应               | / 168 |
| 二、氧化还原方程式的配平           | / 168 |
| 第二节 原电池与电极电势           | 169   |
| 一、原电池                  | / 169 |
| 二、电极电势                 | / 171 |
| 第三节 氧化还原滴定法概述          | 172   |
| 一、氧化还原滴定法的分类特点         | / 172 |
| 二、氧化还原滴定的指示剂           | / 173 |
| 三、高锰酸钾法                | / 174 |
| 四、碘量法                  | / 176 |
| 第四节 氧化还原滴定法应用举例        | 179   |
| 一、双氧水含量的测定(高锰酸钾法)      | / 179 |
| 二、保险粉含量的测定(直接碘量法)      | / 179 |
| 三、次氯酸钠中有效氯含量的测定(间接碘量法) | / 180 |
| 思考题与习题                 | / 181 |
| <br>                   |       |
| 第十二章 吸光光度法             | 182   |
| 第一节 吸光光度法概述            | 182   |

|                  |                     |     |
|------------------|---------------------|-----|
| 第二节              | 吸光光度法的基本原理 .....    | 182 |
| 一、光的基本性质         | / 182               |     |
| 二、物质的颜色及对光的选择性吸收 | / 183               |     |
| 三、光吸收的基本定律       | / 184               |     |
| 四、偏离朗伯-比尔定律的原因   | / 187               |     |
| 第三节              | 显色反应与显色条件选择 .....   | 188 |
| 一、对显色反应的要求       | / 188               |     |
| 二、显色条件的选择        | / 188               |     |
| 三、显色剂            | / 190               |     |
| 第四节              | 分光光度计及测量条件的选择 ..... | 191 |
| 一、分光光度计          | / 191               |     |
| 二、测量条件的选择        | / 192               |     |
| 第五节              | 吸光光度法的应用 .....      | 193 |
| 一、目视比色法          | / 193               |     |
| 二、分光光度法          | / 193               |     |
| 思考题与习题           | / 195               |     |
| 第十三章             | 现代分析仪器简介* .....     | 196 |
| 第一节              | 气相色谱法 .....         | 196 |
| 一、色谱法及其分类        | / 196               |     |
| 二、色谱法的特点         | / 196               |     |
| 三、气相色谱的分析流程      | / 197               |     |
| 四、色谱流出曲线及有关术语    | / 197               |     |
| 五、气相色谱法的分离原理     | / 199               |     |
| 六、气相色谱法的基本理论     | / 199               |     |
| 七、气相色谱法定性分析      | / 200               |     |
| 八、气相色谱法定量分析      | / 202               |     |
| 第二节              | 核磁共振波谱法 .....       | 204 |
| 一、核磁共振的基本原理      | / 204               |     |
| 二、核磁共振仪简介        | / 205               |     |
| 三、化学位移           | / 206               |     |
| 四、核磁共振的应用        | / 208               |     |
| 第三节              | 质谱法 .....           | 210 |

|                        |       |
|------------------------|-------|
| 一、质谱法的基本原理             | / 210 |
| 二、质谱仪                  | / 210 |
| 三、质谱法的应用               | / 211 |
| 第四节 荧光分析法 .....        | 212   |
| 一、荧光分析法的基本原理           | / 212 |
| 二、荧光光谱仪                | / 213 |
| 三、荧光光谱法的应用             | / 214 |
| 第五节 原子吸收光谱法 .....      | 214   |
| 一、原子吸收光谱法的基本原理         | / 214 |
| 二、原子吸收分光光度计            | / 217 |
| 三、定量分析方法               | / 218 |
| 第六节 其他仪器分析法简介 .....    | 219   |
| 一、红外光谱法                | / 219 |
| 二、热分析法                 | / 221 |
| 思考题与习题                 | / 221 |
| <br>第十四章 非金属元素简述 ..... | 224   |
| 第一节 卤素及其化合物 .....      | 224   |
| 一、卤素简介                 | / 224 |
| 二、卤素的单质                | / 224 |
| 三、氯的含氧酸及其盐             | / 226 |
| 第二节 氧硫及其化合物 .....      | 227   |
| 一、氧                    | / 227 |
| 二、硫及其化合物               | / 229 |
| 第三节 氮磷及其化合物 .....      | 233   |
| 一、氮                    | / 234 |
| 二、磷及其化合物               | / 237 |
| 第四节 碳硅及其化合物 .....      | 238   |
| 一、碳及其化合物               | / 238 |
| 二、硅及硅的化合物              | / 240 |
| 思考题与习题                 | / 241 |
| <br>第十五章 金属元素选述 .....  | 244   |

|                   |                   |     |
|-------------------|-------------------|-----|
| 第一节               | 碱金属和碱土金属 .....    | 244 |
| 一、碱金属             | / 244             |     |
| 二、碱土金属            | / 245             |     |
| 第二节               | 过渡金属元素及其化合物 ..... | 247 |
| 一、过渡元素的通性         | / 247             |     |
| 二、铜与银             | / 248             |     |
| 三、锌与汞             | / 250             |     |
| 四、铬与锰             | / 251             |     |
| 五、铁和钴             | / 252             |     |
| 第三节               | 稀土元素 .....        | 255 |
| 一、镧系元素的通性         | / 255             |     |
| 二、稀土元素的资源         | / 256             |     |
| 三、稀土元素的应用         | / 256             |     |
| 思考题与习题            | / 257             |     |
| 第十六章              | 绿色化学简述* .....     | 259 |
| 第一节               | 绿色化学的定义 .....     | 259 |
| 第二节               | 绿色化学的基本思路 .....   | 260 |
| 一、绿色化学的研究内容       | / 260             |     |
| 二、绿色化学的实现途径       | / 261             |     |
| 第三节               | 绿色化学与可持续发展 .....  | 261 |
| 一、绿色化学的特点         | / 261             |     |
| 二、绿色化学是可持续发展的必经之路 | / 262             |     |
| 三、绿色化才能现代化        | / 263             |     |
| 第四节               | 绿色化学的应用方向 .....   | 263 |
| 一、新材料中的绿色化学       | / 263             |     |
| 二、石油中的绿色化学        | / 264             |     |
| 三、造纸工业中的绿色化学      | / 264             |     |
| 四、制革工业中的绿色化学      | / 265             |     |
| 五、染整工业中的绿色化学      | / 265             |     |
| 六、生产铅的绿色化学        | / 265             |     |
| 七、洁净煤技术           | / 266             |     |

|                                                                                                |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 第十七章 实验部分 .....                                                                                | 267 |
| 实验一 一级反应——蔗糖转化速率常数的测定 /                                                                        | 267 |
| 实验二 分析天平称量练习 /                                                                                 | 270 |
| 实验三 电解质溶液 /                                                                                    | 274 |
| 实验四 滴定分析基本操作练习 /                                                                               | 277 |
| 实验五 0.1mol/L 盐酸的标定 /                                                                           | 279 |
| 实验六 工业用水总硬度的测定 /                                                                               | 280 |
| 实验七 过氧化氢含量的测定 /                                                                                | 282 |
| 实验八 工业废水中微量挥发酚的测定 /                                                                            | 284 |
| 实验九 金属元素的性质 /                                                                                  | 286 |
| 附 录 .....                                                                                      | 293 |
| 附录一 常见物质的 $\Delta_f H_m^\ominus$ 、 $\Delta_f G_m^\ominus$ 和 $S_m^\ominus$ 值(298.15K, 100kPa) / | 293 |
| 附录二 常见难溶电解质的溶度积常数 $K_{sp}$ (298K) /                                                            | 297 |
| 附录三 常用缓冲溶液配制方法(298K) /                                                                         | 298 |
| 附录四 标准电极电势表(298.15K) /                                                                         | 298 |
| 附录五 弱酸、弱碱的电离平衡常数 $K_a/K_b$ (298K) /                                                            | 302 |
| 附录六 配离子的稳定常数 $K_f^\ominus$ (298K) /                                                            | 302 |
| 附录七 EDTA 螯合物的 $\lg K_f^\ominus$ (298K) /                                                       | 303 |
| 元素周期表 .....                                                                                    | 304 |
| 主要参考文献 .....                                                                                   | 305 |

# 第一章 物质结构

## 第一节 物质结构理论概述

物质宏观上所表现的物理性质和化学性质是由其内部微观结构决定的。微观结构包括组成物质的不同层次的粒子,如分子、原子、原子核、电子、质子、中子及夸克等。一般的化学反应,在由反应物到生成物的过程中,原子核并未改变,只是核外电子的运动状态发生了变化,所涉及的粒子层次最小到原子核和核外电子。

1897年,电子的发现者、英国物理学家汤姆生(J. J. Thomson)认为,原子是由带正电的连续体和负电子构成,从而打破了道尔顿(J. Dalton)于1803年提出的原子是组成物质的不可分割的最小实心微粒的假说。1911年,卢瑟福(E. Rutherford)提出行星式含核模型的假说,认为原子中心是一带正电荷的原子核,核外有带负电的电子绕核做圆周运动。

19世纪末以来,科学实验证实了原子很小(直径约 $10^{-10}\text{m}$ )却有着复杂的结构。原子是由带正电荷的原子核和绕核运动的带负电荷的电子所组成,原子核又包含带正电荷的质子和不带电荷的中子。元素的原子序数等于原子的核电荷数(即质子数),也等于原子的核外电子数。化学反应不涉及原子原子核的变化,而只是改变了原子核外电子的数目或运动状态。

## 第二节 核外电子的运动状态

人们对原子结构的认识是和原子光谱的实验分不开的。1913年,玻尔(Bohr)在氢原子光谱和普朗克(Planck M)量子论的基础上提出如下假设:

(1)原子中,电子只能沿着具有一定能量的轨道运动,这些轨道称为稳定轨道。电子运动时所处的能量状态称为能级。轨道不同,能级就不同。

(2)电子只有从一个轨道跃迁到另一个轨道时,才有能量的吸收或放出。

玻尔理论成功地解释了氢原子光谱,阐明了谱线的波长( $\lambda$ )与电子在不同轨道之间跃迁时能级的关系。但是该理论不能解释多电子原子光谱、氢原子光谱的精细结构等新的实验事实。其原因是该理论没有完全摆脱经典力学的束缚,电子在固定的轨道上绕核运动的观点不符合微观粒子的运动特性。因此,随着科学的发展,原子结构理论便被原子的量子理论所代替。

20世纪初,受光的本性的启发,人们对微观粒子的特性有了全新的认识,并提出了研究其

运动规律的独特思维方法。

一、微观粒子的波粒二象性

人们在研究光时,惊讶地发现有些物理现象与光的传播有关,例如光的干涉、衍射等现象中,光的波动性突出,光电效应则是光的微粒性的突出表现。

20 世纪 20 年代,人们进而研究实物微粒,如电子等。电子的微粒性早在发现电子时即已被公认。1924 年,德布罗意(de Broglie)受光的波粒二象性启发,大胆地提出具有静止质量的微观粒子,如分子、原子、电子、质子、中子等,同光一样也具有波粒二象性的假设。并且他预言具有质量为  $m$ 、速率为  $v$  的粒子,其波长( $\lambda$ )可根据式(1-1)算出。三者通过普朗克常数( $h$ )联系起来。

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} \tag{1-1}$$

式(1-1)称为德布罗意关系式,它表明了微观粒子的波粒二象性的统一。微观粒子的波与电磁波、机械波不同,是具有统计规律的概率波,又称物质波,它没有直接的物理意义。

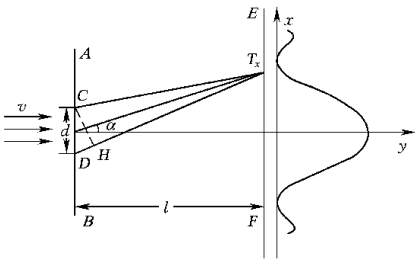


图 1-1 电子束单缝衍射示意图

微观粒子的波粒二象性使之不能同时具有确定的位置和确定的动量。电子束的单缝衍射实验(图 1-1)可证实这个客观事实。以  $\Delta p_x$  表示任一瞬间电子动量在  $x$  方向分量的不确定程度, $\Delta x$  代表同一时刻电子在  $x$  轴上位置的不确定程度,实验结果:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq h \tag{1-2}$$

式中  $h$  表示普朗克常量。

式(1-2)为微观粒子的不确定关系式。

它标志着  $\Delta x$  越小,微观粒子所处的位置越准确, $\Delta p_x$  越大,微观粒子的动量越不确定。对于  $\Delta p_x$  和  $\Delta x$ ,两者中的一个数值变得趋于零,必须以另一个数值趋于无穷大为代价。

综上所述,原子核外电子虽是实物微粒,但却不像子弹、垒球等那样具有确定的运动轨迹,对它的观察也不能像对日出、日落、飞机、火车那样在确定的时间、确切的位置捕捉到它的出现。原子内电子的运动有其自身的规律,即如前所述那样,是具有统计意义的概率波。

二、微观粒子运动状态的描述——薛定谔方程

微观粒子的特性使得对其运动规律的讨论不能像对宏观物体那样用经典的牛顿力学来描

述,而必须用针对微观粒子特性的新的思维模式——量子力学来研究。

量子力学的基本方程之一是薛定谔(Schrodinger)方程,它是由奥地利物理学家薛定谔(1887~1961年)于1926年提出的一个二阶偏微分方程。

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \frac{8\pi \cdot m}{h^2} (E - V) \cdot \varphi = 0 \tag{1-3}$$

式中:  $\varphi$ ——波函数;  
 $E$ ——总能量;  
 $V$ ——势能;  
 $m$ ——电子的质量;  
 $h$ ——普朗克常数;  
 $x, y, z$ ——空间坐标。

薛定谔方程把作为粒子特征电子质量( $m$ )、位能( $V$ )和系统的总能量( $E$ )与其运动状态的波函数( $\varphi$ )列在一个数学方程式中,体现了波动性和微粒性的结合。解薛定谔方程的目的就是求出波函数( $\varphi$ )以及与其对应的能量( $E$ )。求得  $\varphi(x, y, z)$  的具体形式,即为方程的解。它是一个包含  $n, l, m$  3 个常数项的 3 变量( $x, y, z$ )的函数,通常用  $\varphi_{n, l, m}(x, y, z)$  表示。 $n, l, m$  分别为主量子数、角量子数和磁量子数。

波函数( $\varphi$ )是量子力学描述核外电子运动状态的数学函数式,称为原子轨道函数或简称原子轨函,甚至就叫原子轨道。它反映了核外电子运动状态表现出的波动性和统计性规律。波函数( $\varphi$ )是空间坐标( $x, y, z$ )的函数,这种三维空间的波(或说有 4 个变量)很难用适当的图形表示清楚,也很难想像出来。一般处理方法是首先将( $x, y, z$ )表示的直角坐标换成( $r, \theta, \phi$ )表示的球坐标,而后把  $\varphi(r, \theta, \phi)$  分解为用  $r$  表示的径向分布函数[或简称径向分布,  $R(r)$ ]和仅包含角度变量  $\theta$  和  $\phi$  的角度分布函数[或简称角度分布,  $Y(\theta, \phi)$ ]。由于  $\phi$  的角度分布与主量子数无关,且当  $l$  相同时,其分布图总是一样的。图 1-2 为某些原子轨道的角度分布图,图中的“+”、“-”号表示波函数的正、负值。

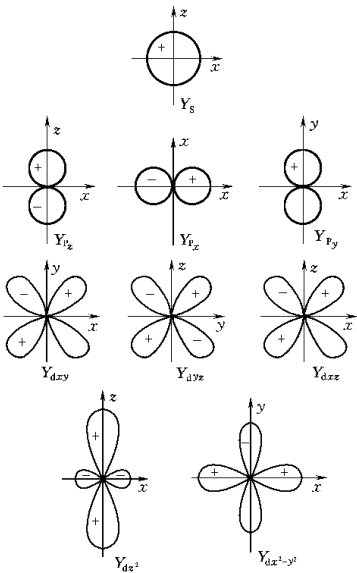


图 1-2 s、p、d 原子轨道角度分布图(平面图)