

# 《结构化学》教学大纲

学时：50 学时

学分：3.0 学分

适用专业：化学教育、应用化学、材料化学

## 一、说明

### 1、《结构化学》课程的性质和任务

《结构化学》是研究原子、分子及晶体的结构，以及结构与性能之间关系的一门基础理论课。设置本课程的目的在于培养学生在建立量子力学基本概念的基础上，掌握微粒运动的基本规律。获得原子、分子及晶体结构的基本理论和实验研究方法，让学生在深入到原子、分子的电子层结构上来掌握物质的微观结构与宏观性质之间的关系。明确“结构决定性能、性能反映结构”这一重要原则，为今后从事教学和科研或继续升造，打下坚实的理论基础。

### 2、《结构化学》课程的基本要求

(1). 在熟悉电子等实物微粒基本特性的基础上，掌握波函数、薛定谔方程及算符等量子力学重要原理、应用量子力学原理来研究原子结构。

(2). 掌握分子轨道理论和配位场理论，应用分子轨道理论深入研究分子结构和配合物结构，了解分子光谱的基本原理和方法。

(3). 掌握晶体的点阵理论，明确各类晶体结构特征及结构与性能之间的关系，理解 x-射线晶体结构分析的基本原理以及联系衍射二要素和晶胞二要素的重要方程。

## 二、正文

### 绪论

《结构化学》主要内容及研究途径、学习方法

## 第一章 量子力学基础和原子结构

### 1. 量子论诞生和量子力学基本原理

经典物理学困难和量子论诞生

实物微粒的波粒二象性及“不确定关系”（重点）

波函数、薛定谔方程、势箱中运动的粒子

定态薛定谔方程的算符表达式

### 2. 氢原子与类氢离子的定态薛定谔方程及其解

方程的直角坐标和球坐标表达式、基态解、变数分离法（难点）

方程解的物理意义讨论、量子数、实复波函数（重点）

波函数和电子云的图形表示

### 3. 多电子原子结构理论的轨道近似模型

中心力场模型和原子轨道（重点）

屏蔽模型、自洽场模型

电子自旋及保里不相容原理

自旋相关效应

思考题见教材 144 页，思考题与习题 3,5,6,9,11 题

## 第二章 共价键理论和分子结构

### 1. $H_2^+$ 中的分子轨道及共价键本质

定核近似和  $H_2^+$  的薛定谔方程

变分原理及线性变分法

线性变分法对  $H_2^+$  的第一步近似处理

第一步近似处理的讨论、离域效应

### 2. 分子轨道理论及其应用

分子轨道理论的要点、概念、LCAO-MO 法（重点）

成键三原则、电子填充三原则（重点）

双原子键和双原子分子结构

饱和分子的离域轨道和定域轨道

### 3. HMO 法和共轭分子结构

HMO 法要点（重点）

丁二烯和苯的 HMO 法处理

电荷密度、键级自由价、分子图

离域  $\pi$  键形成条件及类型

### 4. 分子对称性和分子点群

对称元素和对称操作

群概念和群的阶数

分子点群、分子点群的确定

对称性和分子的物理性质

### 5. 测定分子结构的实验方法

分子光谱的分类及其所在波段

分子的转动光谱

分子的振动光谱

思考题见教材 299 页，思考题与习题 1,2,5,6,7 题

## 第三章 配位场理论和络合物结构

### 1. 晶体场理论

d 轨道能级分裂（重点）

d 轨道中电子的排布——高自旋态和低自旋态

晶体场稳定化能

络合物畸变和姜——泰勒效应

## 2. 络合物的分子轨道理论

理论要点

正八面体络合物中的  $\sigma$ —配键

正八面体络合物中的  $\pi$ —配键

$\sigma$ — $\pi$  配键和羰基络合物、氮分子络合物结构 不饱和烃络合物— $\pi$  络合物结构

思考题见教材 374 页，思考题与习题 1, 2, 3 题

## 第四章 晶体结构

### 1. 晶体的点阵理论

点阵定义、分类

晶胞定义及晶胞的二个基本要素（重点）

晶面和晶面指标

### 2. 晶体的对称性

晶体的宏观对称性：32 点群，7 个晶系 14 种空间点阵

晶体的微观对称性：空间对称操作

### 3. 结晶化学

金属晶体和金属键

离子晶体和离子键

共价键型晶体和混合键型晶体

分子型晶体和分子间作用力

### 4. X—射线晶体结构分析原理

X—射线在晶体中的衍射机理

衍射方向与晶胞参数 Laue 方程 Bragg 方程

衍射强度与晶胞中原子的分布

晶体结构分析方法

思考题见教材 589 页，思考题与习题 1, 2, 4, 5 题

考试方式及方法：举行一次期末闭卷考，时间 2 小时，教考分离。

题目类型有：填空、单项选择、简答及计算题。

### 三、教学参考书：

倪 行等著，《物质结构学习指导》科学出版社 99 年 3 月，第一版

周公度等著，《结构化学基础》北京大学出版社 95 年 9 月，第二版