

结构化学复习

一、大纲及考试范围

1. 量子力学基础

1-1 微观粒子的运动特征

1-2 量子力学基本假设

波函数和微观粒子的状态

力学量和算符

本征态、本征值和薛定格方程 ****

态叠加原理

泡利原理

1-3 势箱中运动的粒子 ***

势箱中运动的粒子(一、二、三维)

2. 原子的结构和性质

2-1 氢原子及类氢离子的 Schrödinger 方程及其解

2-2 量子数的物理意义 ***

2-3 波函数及电子云图形 ***

径向部分图形

径向波函数 $R_{n,l}(r) \sim r$

径向密度函数 $R^2_{n,l}(r) \sim r$

径向分布函数 $r^2 R^2_{n,l}(r) \sim r$

角度部分图形

波函数的角度部分图: $Y \sim \theta\phi$

电子云的角度分布图: $Y^2 \sim \theta\phi$

空间分布图

电子云分布图: 电子云黑点图

2-4 多电子原子结构

2-5 原子光谱项(包括光谱基项) ****

3. 分子结构

3-1 氢分子离子结构

3-2 分子轨道理论

3-3 双原子分子结构 ***

3-4 共轭体系和休克尔分子轨道理论****

3-5 分子对称性 ****

4. 晶体结构

4-1 晶体的点阵结构和晶体的性质

点阵、结构基元和点阵结构 ***

晶胞参数, **分数坐标**

晶面和晶面指标

4-2 晶体结构的对称性

晶体的**宏观**对称性及 32 点群

4-3 金属晶体结构

密置层

立方最密堆积(ccp, A1) ***

六方最密堆积(hcp, A3) ***

体心立方堆积(bcp, A2) ***

金刚石堆积(A4) ***

金属单质晶体结构

4-4 离子晶体结构

离子键

二元离子晶体的若干典型结构型式 ****

离子晶体的结晶化学规律 ***

4-5 其它键型的晶体结构

4-6 晶体的 X 射线衍射—晶体结构分析原理

晶体的 X 射线衍射效应

衍射方向和晶胞参数

劳埃方程

布拉格方程 ****

衍射强度与晶胞中原子的分布(消光规律) ****

多晶衍射法

指标化 ****

二、量子力学基础、原子结构

2.1 量子力学基础

1. 波函数意义：如 $|\Psi(x,y,z,t)|^2 d\tau$ ； $|\Psi(x,y,z,t)|^2$ ； $|\Psi(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2)|^2$ ；
2. Schrödinger 方程：各种体系 Schrödinger 方程的写法，(要求会使用原子单位 a.u.)
如：氢原子、类氢离子、He、 H_2^+ 、 H_2 、一维势箱等
如何写？动能项，势能项
3. 波函数合格解的条件
4. 量子力学算符，算符的本征方程、本征值及本征函数
本征值概念在以下部分应用：①势箱；①类氢轨道 $\Psi(n,l,m)$ 是否是 $\hat{H}\hat{M}^2\hat{M}_z$ 的本征函数、复波函数、实波函数。③光谱项，光谱支项的量子数与本征值。
5. 平均值
6. 态叠加原理

2.2 势箱中运动的粒子(能级公式，波函数)

2.3 氢原子和类氢离子

1. ① 波函数，复函数和实函数
②量子数取值范围
③能级
④角动量平方 M^2 角动量 z 分量 M_z 本征值
量子数与本征值的关系
2. 波函数和电子云图形
①径向和角度图形的规律和意义：节面规律：径向 $n-l-1$ ；角度节面数= l
→可倒推量子数，推出能量和角动量
角度分布图 $s p d$ xyz 轴，图形中正负号
②电子云分布图 黑点图 明确点疏密， $\Psi_{2s} \Psi_{3pz}$

2.4. 原子光谱项

1. 多电子原子整体状态量子数和对应的力学量值， $L M_L S M_s J M_J$
2. 光谱项推求(不要求过程)
 $p^1 - p^5$ $p^2 - p^4$ $d^2 - d^8$ $d^1 - d^9$ 互补态
等价电子 2 个，非等价电子可能多如 $s^1 p^1 d^1$ $p^2 d^1$
3. 光谱基项(不要求过程)：要求对主族元素和第四周期以前的元素(K~Br)
4. 微观状态数
电子组态 $C_{2(2l+1)}^k$
 ^{2S+1}L $(2L+1)(2S+1)$
 $^{2S+1}L_J$ $2J+1$

习题：1.9 1.13 1.17 1.20 1.21 2.5 2.6 2.15 2.18 2.19 2.24 2.26 2.27 2.29

三、分子结构

3.1 H₂⁺结构

原子单位 Schrödinger 方程，了解成键及反键意义

3.2 分子轨道理论：

1. 形成分子轨道三原则：能量相近条件；最大重叠条件；对称性匹配
2. 什么情况能满足最大重叠 沿…轴
3. 类型：σπδ特点
4. 双原子分子分子轨道表示，电子组态(符号、能级次序、电子排布)

同核：H₂⁺ H₂ He₂⁺ He₂ O₂ O₂⁺ F₂ B₂ C₂ N₂ 混杂

异核：CO NO HF

3.3 HMO

1. 根据分子骨架，写久期行列式、久期方程组
2. 小分子求解(需要求解久期行列式,对称性解法)
烯丙基(自由基、正负离子)、环烯丙基(自由基、正负离子)，丁二烯
3. 较大的分子给出波函数(不一定按能级顺序给)
从给出的波函数求能级
4. 离域能
离域能=小π键能量-大π键能量
5. 分子图及应用
可以估计键长，键强度，可判断分子的静态化学活性

3.4 分子对称性和点群

常见简单分子的对称性和点群、偶极矩和旋光性(若分子中的对称元素交于一点，则其偶极矩为零；具有σ和 I 及 S₄ 的分子无旋光性)

习题：3.6 3.7 3.8 3.9 3.10 3.12 3.14 4.6 4.8 6.3 和实习 1

四、晶体结构

模型实习内容为重点

4.1 晶体学基础

1. 晶体的对称性:

宏观外型一点群—晶系(特征对称元素), 国际符号与熊夫利记号的对应关系

2. 点阵/点阵结构

掌握由等同点抽象点阵的方法, 正确确定结构基元;

分数坐标, 晶胞参数, 晶面指标,

4.2 金属晶体

实习内容 A1 A2 A3 A4 A2 A4 两种堆积的空隙不作要求

4.3 离子晶体

1. 典型离子晶体: 实习内容

2. 结晶化学定律: 数量、大小、极化性能

半径比决定配位多面体类型及配位数需记住临界半径比。

$1 > r_+/r_- \geq 0.732$ 配位数 8,

$0.732 > r_+/r_- \geq 0.414$ 配位数 6

$0.414 > r_+/r_- \geq 0.225$ 配位数 4

4.4 X 射线衍射(只要求金属晶体)

1. 衍射方向: 立方晶系 **Brag** 方程

2. 立方晶系系统消光规律

3. 立方晶系衍射图的指标化

习题 7.1 7.16 7.15 8.8 8.17 8.20 9.2 9.8 9.9 9.12 实习 2~5