

# 物质结构与性质.

原子结构: 量子力学中的两个模型

玻尔模型 (基于) H线状光谱.  
波动性  $\lambda = \frac{h}{p}$   
不确定性  $\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi}$   
薛定谔方程.  
用波函数描述 $\psi$ 状态.

针对单电子体系  $Z^* = Z - \sigma$  → 多电子体系

考虑屏蔽与钻穿效应而加以修正

解释. 元素性质 (r, I,  $E_{\text{ea}}$ ,  $X$ ) 的周期性变化.

和反周期律的各种现象.

VSEPR理论 (配合使用) → 预测几何构型

核心: 轨道重叠.

价键理论: 杂化轨道理论 (补充). 共振论 (补)

优势 { 键级与单电子数目 → 磁性.  
电子离域性.

分子轨道理论 → 能带理论.

自由电子模型 → 导电. 热. 延展性

(键) 原子之间 ("分子") 的结构. 的相互作用. 多个原子构成的系统.

<晶格能  $U$ > ←

离子键.

共价键.

金属键.

<特殊> 配位化合物.

键 { 共价性. ~ 价键理论.

离子性. ~ 晶体场理论. → 颜色.

空间结构.

稳定性.

解释磁性.

晶体 (更多原子/分子规则排列)

结构. 依据结构基元之间 "键" 的类型分类.

用晶胞描述/代表.

晶胞单位 (局部点阵) + 结构基元.

金属 → 等径圆球堆积 ( $M^+$ )

离子  $\langle U \rangle$  → 负离子堆积. 正离子填充:  $r^+/r^-$ . {  $\text{CsCl}$ .  $\text{NaCl}$  立方  $\text{ZnS}$  } 型 → 极化

共价/原子. { 范德耳力 { 线型分子. 球型分子 ~ 近似堆积.

分子. → 氢键

混合.

解释.

熔沸点. 硬度. 延展性. 导电性.