



结构化学（一）

主讲：樊建芬

54学时





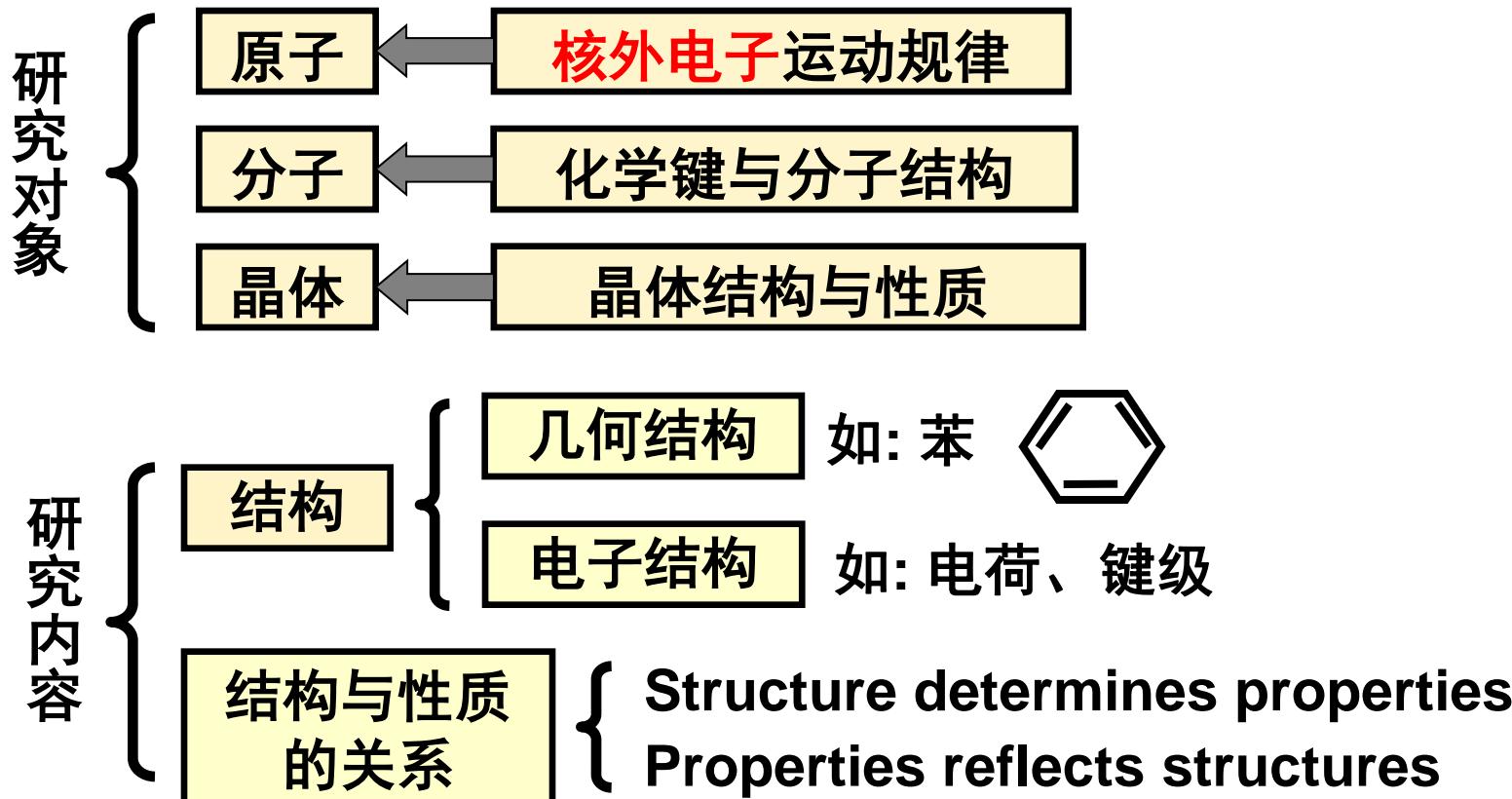
绪论 Introduction

- 一、《物质结构》的任务
- 二、物质结构研究发展简史 ►
- 三、本课程的内容安排 ►
- 四、本课程的主要参考书 ►



一、《物质结构》的任务

《物质结构》主要研究原子、分子及晶体的结构以及它们和性质间的关系。

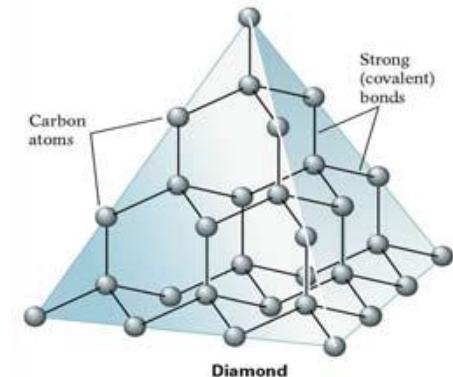




例1：C Crystal Structures

Diamond: Insulator; 共价键型晶体

Graphite: 良好的导电性, 混合键型晶体
片层内Planar C_{sp^2} structure



Structure makes the difference

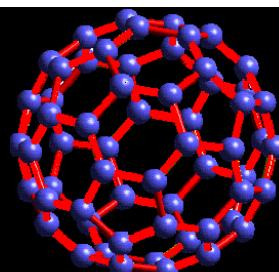
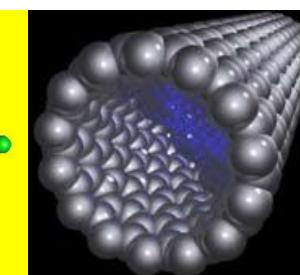
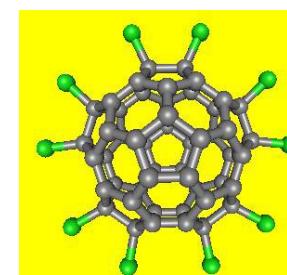
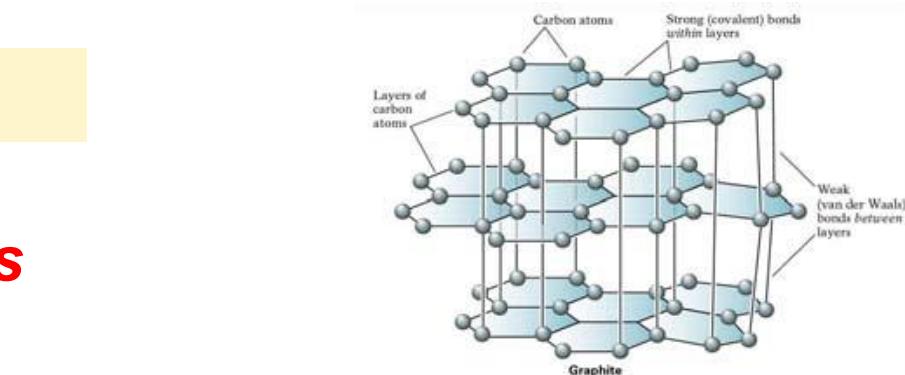
Other Carbon Crystal Structures

“Buckyballs” (C_{60})

“Buckytubes” (nanotubes)

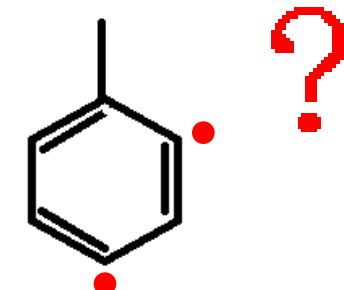
other fullerenes

(富勒烯)





例2：O₂表现为顺磁性，而N₂为抗磁性。



例3：甲苯的临、对位的硝化活性高于间位。

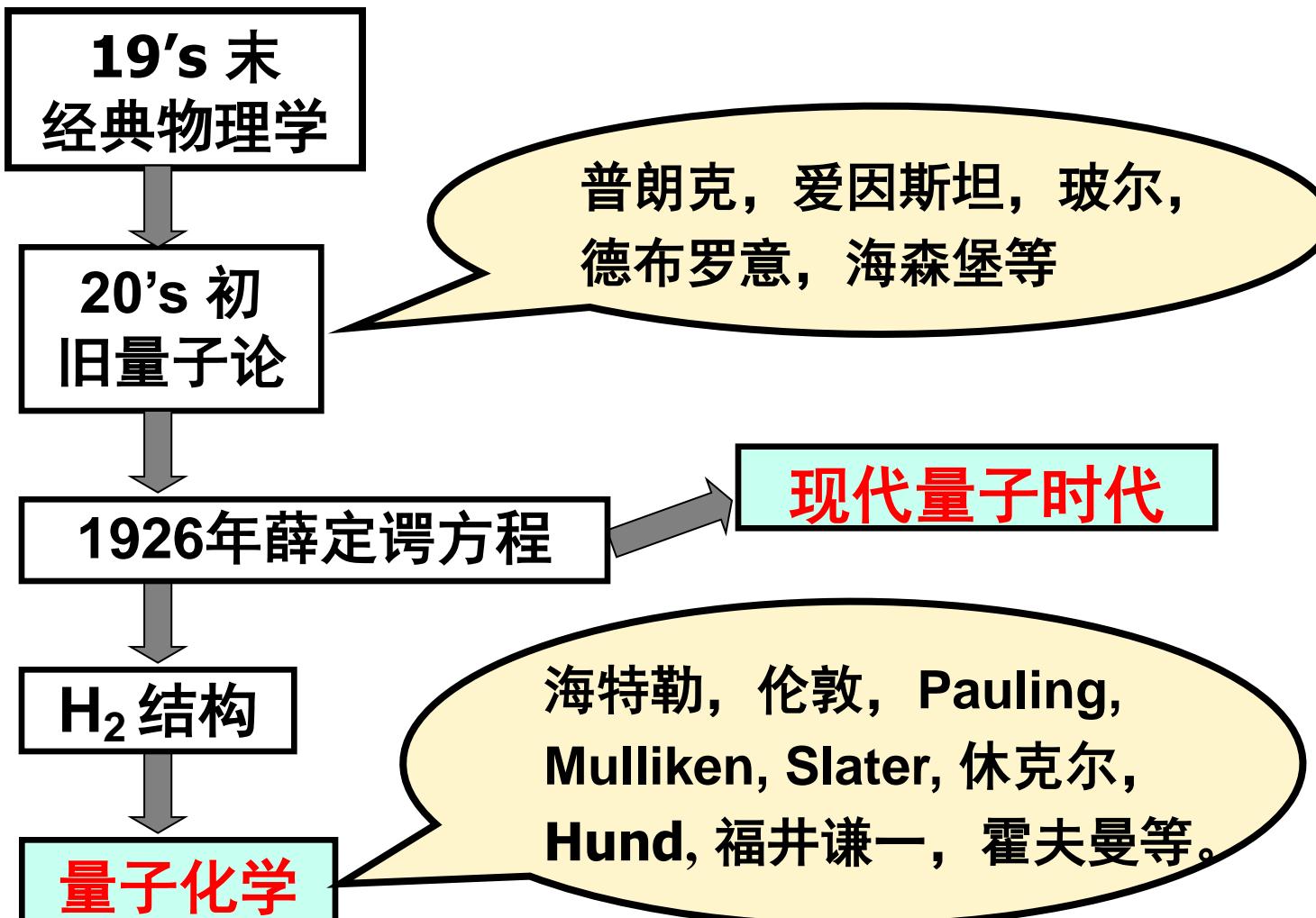
性质 \longleftrightarrow 结构

Objective of Structural Chemistry:

- 1) Determining the structure of a known substance;
- 2) Understanding the structure-property relationship;
- 3) Predicting a substance with specific structure and property.



二、物质结构研究发展简史





量子化学学科的诞生，使得整个化学学科有了可靠而坚实的理论基础，化学由经验科学向理论科学过渡。

1986年的诺贝尔化学奖得主**李远哲**曾说过，化学的规律就是量子力学，所有的化学现象都跟电子运动有关。

1998年度诺贝尔化学奖授予了在量子化学计算领域做出杰出贡献的**Pople**以及在密度泛函理论有开创性贡献的**Kohn**，预示着**量子化学计算**对科学研究带来了前所未有的冲击。



Pople

Kohn



三、本课程的内容安排

第一章 量子力学基础

第二章 原子结构与原子光谱 —— 原子

第三章 分子的对称性和点群

第四章 双原子分子结构与性质

第五章 多原子分子结构与性质

第六章 配位化合物和簇合物的结构与性质

第七章 晶体结构的点阵理论

第八章 晶体的结构与晶体材料

期中考试（待定）

分子

} 晶体



四、本课程的主要参考书

1. 周公度, 段连运, 《结构化学基础》(第五版),
北京大学出版社, 2017
2. 李炳瑞, 《结构化学(多媒体版·第二版)》,
高等教育出版社, 2016
3. 林梦海, 林银钟, 《结构化学》, 科学出版社, 2005
4. 陈启明, 高剑南, 倪行, 《物质结构学习指导》(第二版),
科学出版社, 2013
5. 潘道皑, 《物质结构》(第二版), 高等教育出版社, 2008
6. 周公度, 段连运, 《结构化学基础习题解析》(第五版),
北京大学出版社, 2017
7. 李炳瑞, 《结构化学学习指导与习题解答》,
高等教育出版社, 2015



蘇州大學

SOOCHOW UNIVERSITY

《结构化学》绪论 樊建芬

Thank you for your attention!



目录

