



苏州大学

SOOCHOW UNIVERSITY

《结构化学》绪论

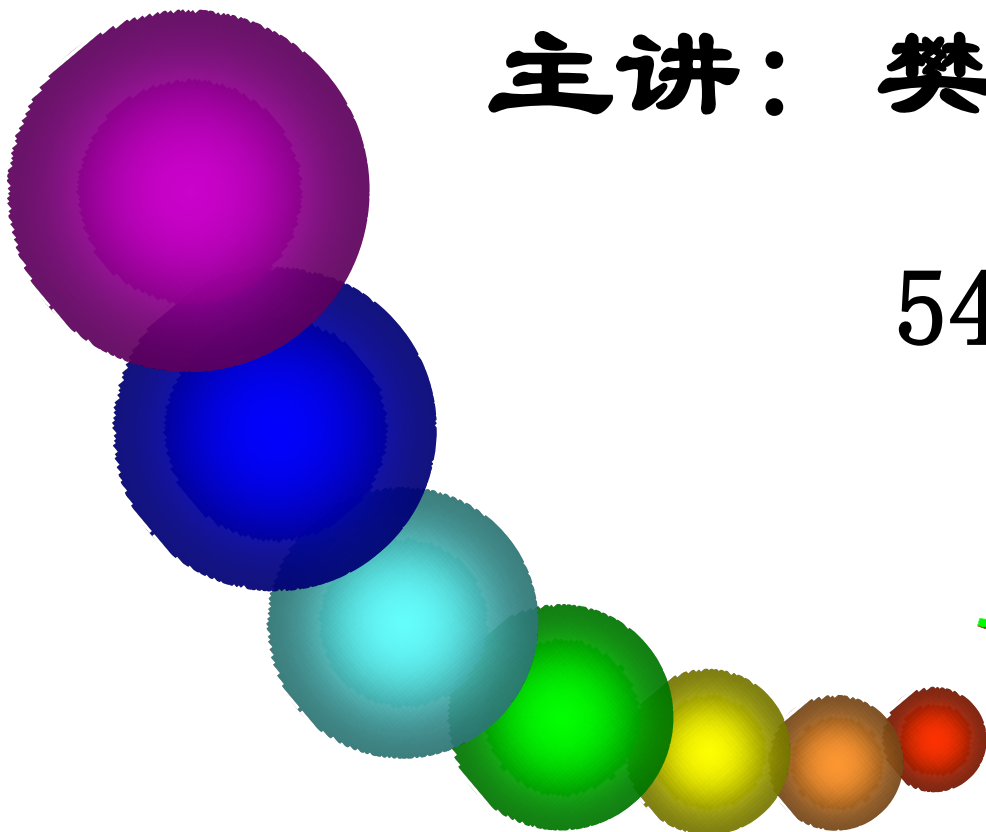
樊建芬

结构化学(一)

主讲：樊建芬

54学时

$$\hat{H}\psi = E\psi$$





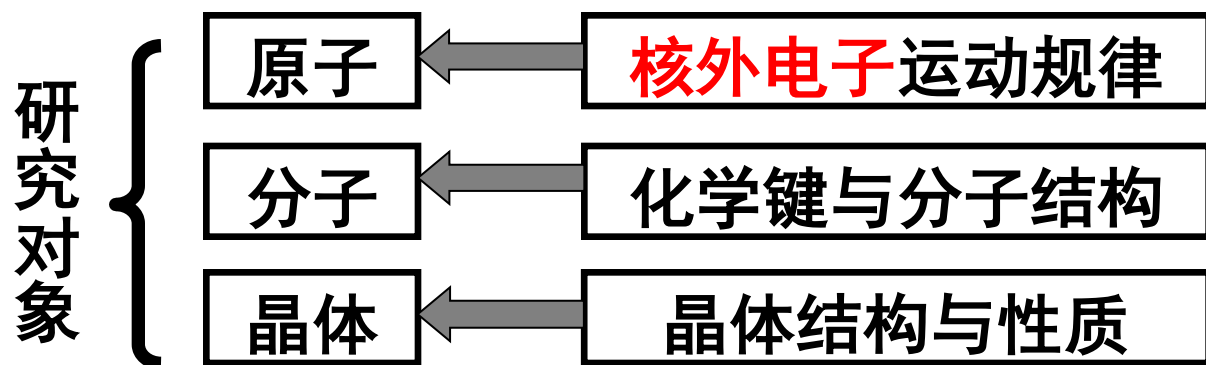
绪论 Introduction

- 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。



结构与性质的关系

Structure determines properties
Properties reflects structures



苏州大学

SOOCHOW UNIVERSITY

《结构化学》绪论

樊建芬

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

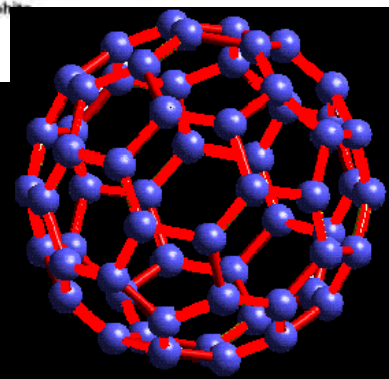
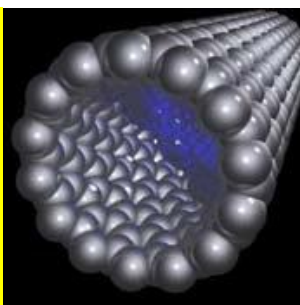
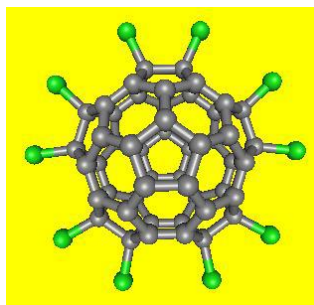
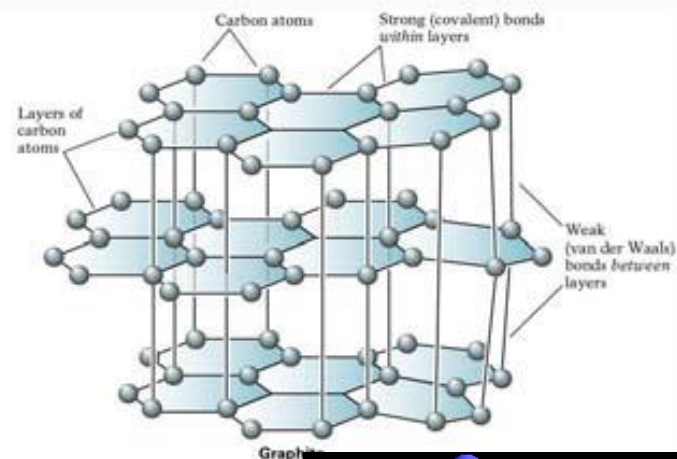
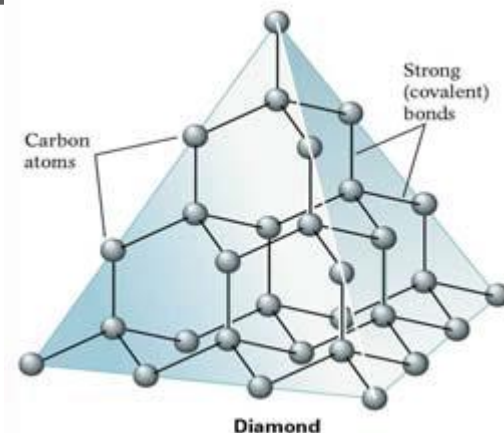
Other Carbon Crystal Structures

“Buckyballs” (C_{60})

“Buckytubes” (nanotubes)

other fullerenes

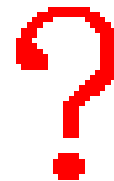
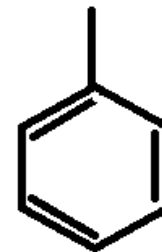
(富勒烯)





例2: O_2 表现为顺磁性, 而 N_2 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

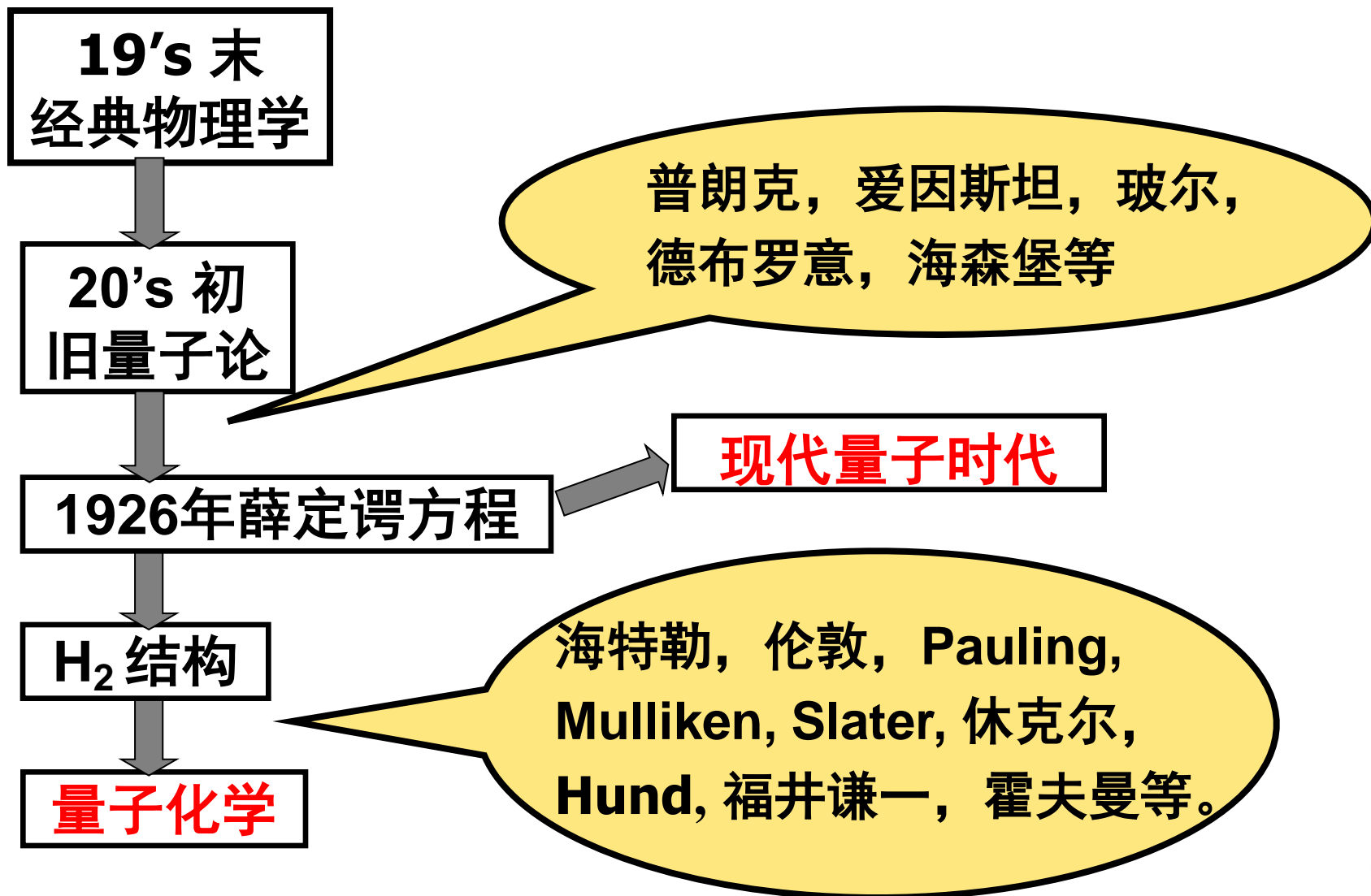
Objective of Structural Chemistry:

- 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

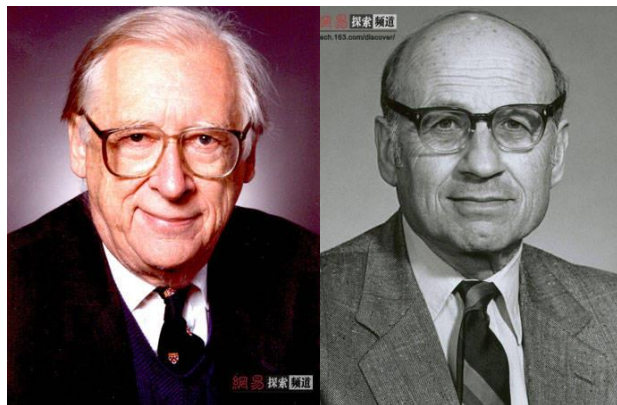




量子化学学科的诞生，使得整个化学学科有了可靠而坚实的理论基础，化学由经验科学向理论科学过渡。

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

第九章 分子结构与材料科学

} 分子

} 晶体



四、本课程的主要参考书

1. 潘道皑, 《物质结构》, 高等教育出版社。
2. 周公度、段连运编著, 《结构化学基础》(第三版), 《结构化学学习题解析》, 北京大学出版社。
3. 徐光宪, 《物质结构》, 人民教育出版社。
4. 柯耳逊, 《原子价》(陆浩译), 科学出版社。
5. 唐有祺, 《结晶化学》, 高等教育出版社。
6. 各类习题集(图书馆)。