



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





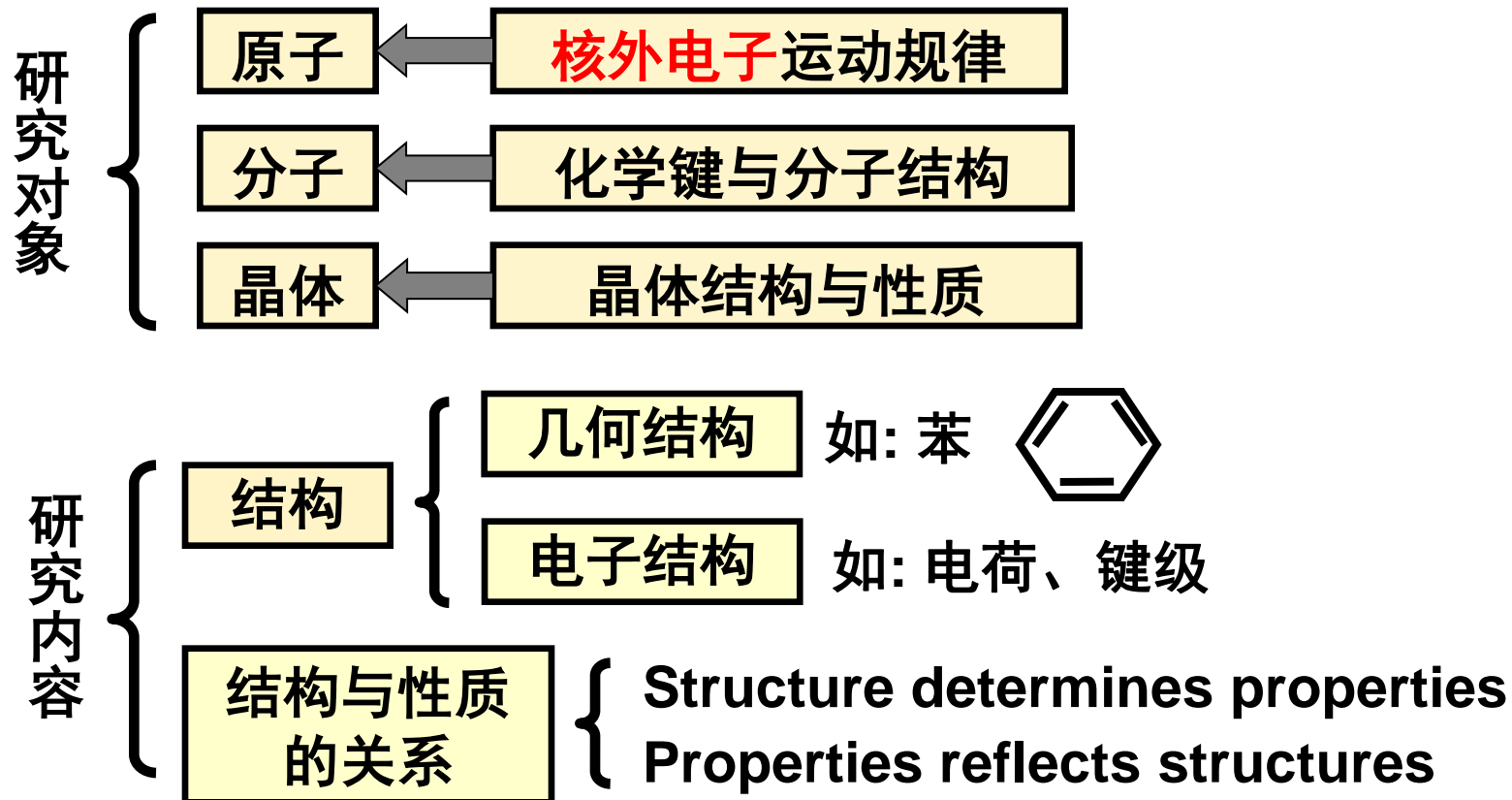
# 绪论 Introduction

- 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。

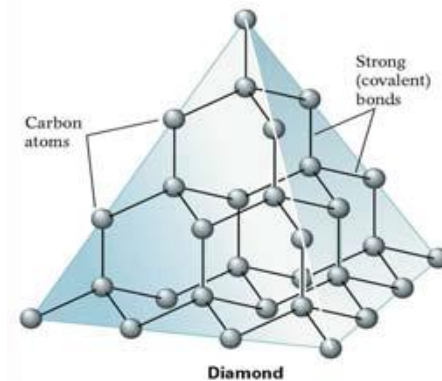




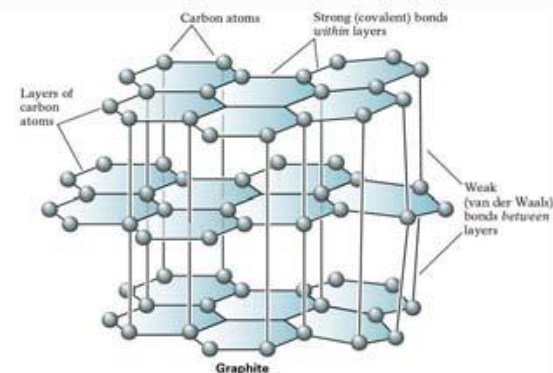
## 例1: C Crystal Structures

**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



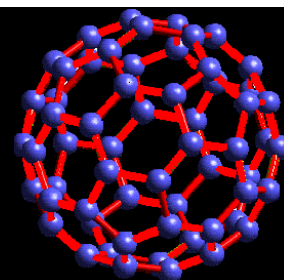
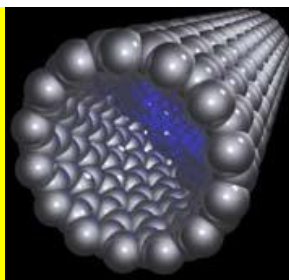
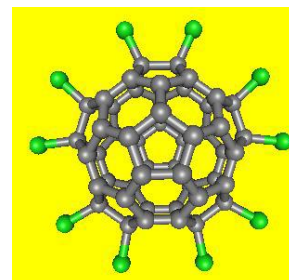
## Other Carbon Crystal Structures

“Buckyballs” ( $C_{60}$ )

“Buckytubes” (nanotubes)

other fullerenes

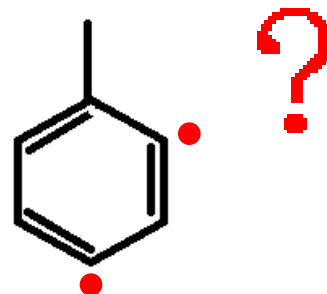
(富勒烯)





例2:  $O_2$ 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。



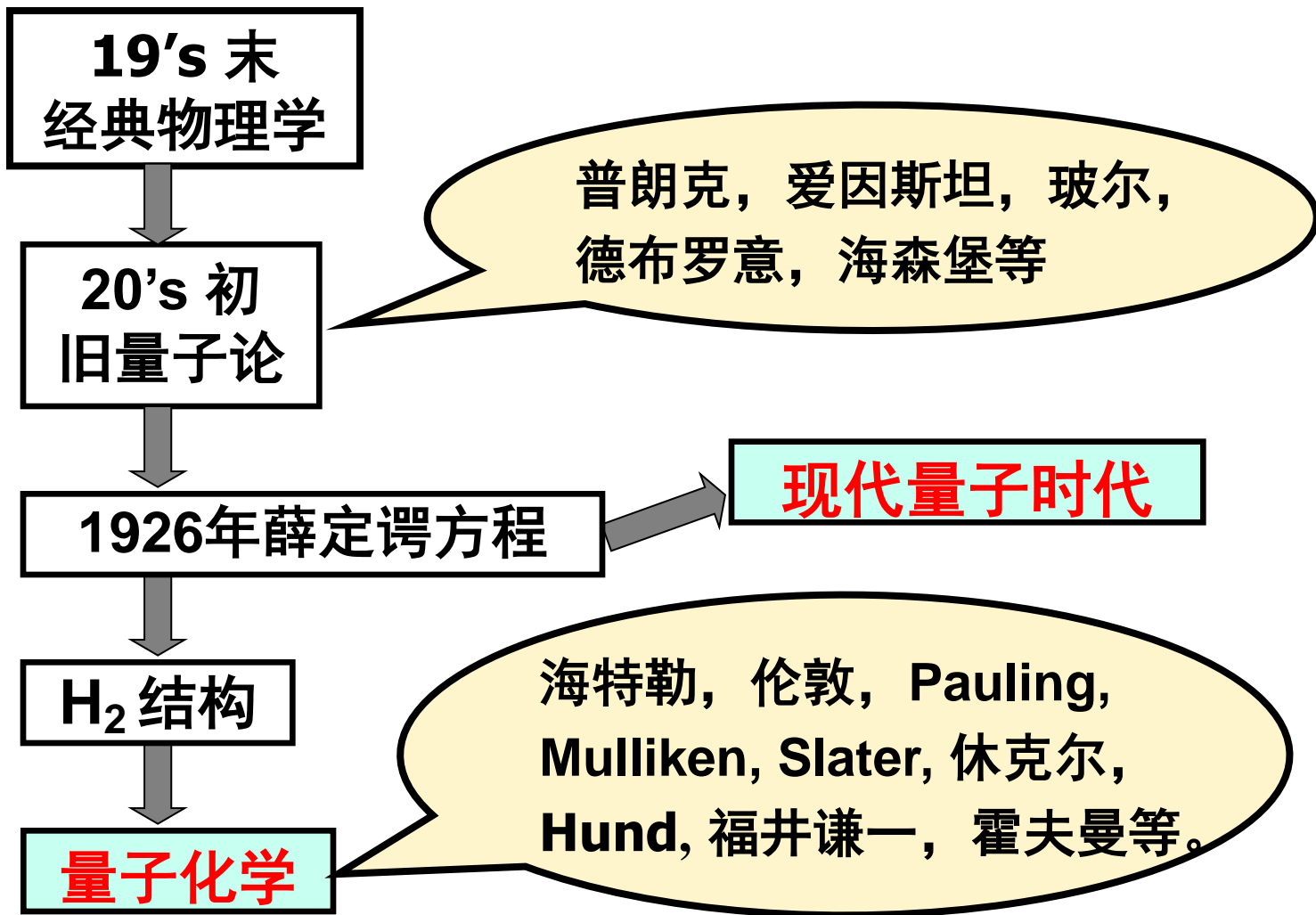
性质  $\longleftrightarrow$  结构

## 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

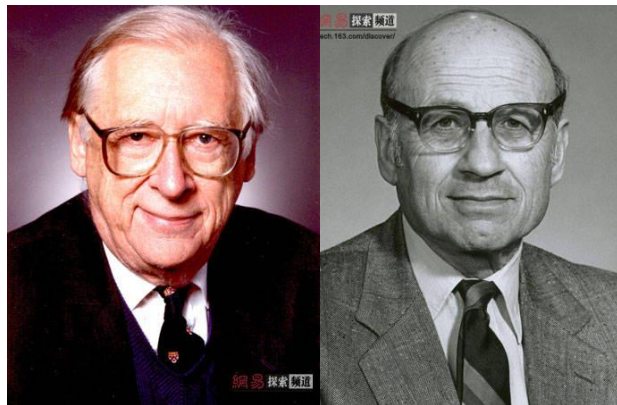




量子化学学科的诞生，使得整个化学学科有了可靠而坚实的理论基础，化学由经验科学向理论科学过渡。

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

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!

養天北正氣  
法古今完人

楊永清題

目录