

物质结构与性质

胡译文

May 20, 2020

若有bug请到[github](#)上提Issue。
技术有限所有方程式的等号都用箭头代替了。

目录

0.1	元素周期表	3
0.2	元素周期律	3
0.2.1	IA族 (碱金属)	3
0.2.2	IIA族 (碱土元素)	4
0.2.3	VIIA族 (卤素)	4
0.2.4	第三周期	4
1	原子结构	5
1.1	发现史	5
1.2	能层和能级	5
1.3	四个量子数	5
1.3.1	主量子数	5
1.3.2	角量子数	5
1.3.3	磁量子数	6
1.3.4	自旋量子数	6
1.4	电子、价电子排布式和轨道表达式	6
1.5	徐光宪规则	7
1.6	电子排布原理	7
1.6.1	能量最低原理	7
1.6.2	泡利不相容原理	7
1.6.3	洪特规则	7
1.6.4	构造原理	8
1.7	电子跃迁	8
1.7.1	原子光谱	8
2	元素的性质	9
2.1	元素周期表分区	9
2.2	电负性	9
2.2.1	定义	9
2.2.2	应用	9
2.3	电子亲和能	10
2.3.1	定义	10
2.4	电离能	10
2.4.1	定义	10
2.4.2	应用	10
2.5	对角线规则	11
3	化学键	12
3.1	分类	12
3.2	共价键的形成	12
3.3	键参数	12
3.4	配合物	12

4	分子结构	13
4.1	Lewis结构式	13
4.2	中心原子轨道杂化理论	13
4.3	VSPER构型	13
4.4	立体构型	13
5	分子的性质	14
5.1	分子极性	14
5.2	分子手性	14
5.3	氢键	14
6	晶体结构	15
6.1	晶体	15
6.1.1	定义	15
6.1.2	鉴别	15
6.1.3	获取	15
6.2	原子晶体	15
6.3	分子晶体	15
6.4	离子晶体	15
6.4.1	晶格能	15
6.4.2	金属晶体	15
7	晶体的性质以及计算	16
7.1	熔沸点比较	16
7.1.1	不同类型晶体	16
7.1.2	相同类型晶体	16
7.2	晶体计算	16
7.2.1	晶胞的组成	16
7.2.2	晶体微粒个数	16

Flashback

0.1 元素周期表

- 横行 (周期)
 - 短周期
 - * 一: 2
 - * 二: 8
 - * 三: 8
 - 长周期
 - * 四: 18
 - * 五: 18
 - * 六: 32
 - * 七: 32
 - * (八: 50)
- 纵列 (族)
 - 主族: $IA VIIA$
 - 副族: $IB VIIB$
 - $VIII$ 族: 三列
 - O 族: 稀有气体

0.2 元素周期律

0.2.1 IA 族 (碱金属)

1. Li: $\boxed{+3} 2 1$
2. Na: $\boxed{+11} 2 8 1$
3. K: $\boxed{+19} 2 8 8 1$
4. Rb: $\boxed{+37} 2 8 18 8 1$
5. Cs: $\boxed{+55} 2 8 18 18 8 1$

- 金属性: $Li < Na < K < Rb < Cs$
- 氧化性: $Li^+ < Na^+ < K^+ < Rb^+ < Cs^+$
- 碱性: $LiOH < NaOH < KOH < RbOH < CsOH$

从上至下:

- 电子层数 \uparrow
- 原子半径 \uparrow
- 原子核对最外层电子吸引力 \downarrow
- 失电子能力 \uparrow
- 金属性 \uparrow
- 与酸 (水) 反应剧烈程度 \uparrow
- 最高价氧化物对应水化物的碱性 \uparrow

0.2.2 IIA族 (碱土元素)

1. Be: $\boxed{+4}$ 2 2
2. Mg: $\boxed{+12}$ 2 8 2
3. Ca: $\boxed{+20}$ 2 8 8 2
4. Sr: $\boxed{+38}$ 2 8 18 8 2
5. Ba: $\boxed{+56}$ 2 8 18 18 8 2

• 金属性: $\text{Cs} > \text{Ba} > \text{Rb} > \text{Sr} > \text{K} > \text{Ca} > \text{Na} > \text{Mg} > \text{Li} > \text{Be}$

从上至下:

- 电子层数 \uparrow
- 原子半径 \uparrow
- 原子核对最外层电子吸引力 \downarrow
- 失电子能力 \uparrow
- 金属性 \uparrow
- 与酸 (水) 反应剧烈程度 \uparrow
- 最高价氧化物对应水化物的碱性 \uparrow

0.2.3 VIIA族 (卤素)

1. F: $\boxed{+9}$ 2 7
2. Cl: $\boxed{+17}$ 2 8 7
3. Br: $\boxed{+35}$ 2 8 8 7
4. I: $\boxed{+53}$ 2 8 18 8 7

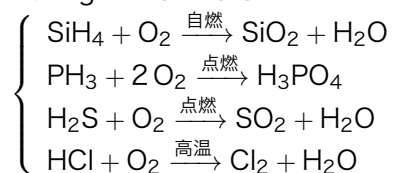
- 非金属性: $\text{F} > \text{Cl} > \text{Br} > \text{I}$
- 氧化性: $\text{F}_2 > \text{Cl}_2 > \text{Br}_2 > \text{I}_2$
- 酸性: $\text{HClO}_4 > \text{HBrO}_4 > \text{HIO}_4$
- 酸性: $\text{HF} < \text{HCl} < \text{HBr} < \text{HI}$ (气态氢化物稳定性)

从上至下:

- 电子层数 \uparrow
- 原子半径 \uparrow
- 原子核对最外层电子吸引力 \downarrow
- 得电子能力 \downarrow
- 非金属性 \downarrow
- 与 H_2 反应剧烈程度 \downarrow
- 最高价氧化物对应水化物的酸性 \downarrow

0.2.4 第三周期

Na Mg Al Si P S Cl



1 原子结构

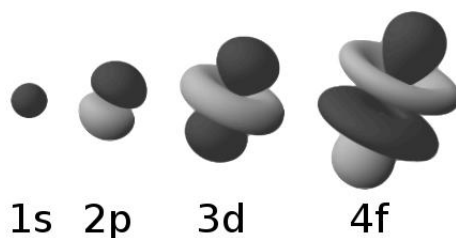
1.1 发现史

- 道尔顿：原子说
- JJ-汤姆逊：电子
- 卢瑟福：核式结构
- 玻尔：行星模型
- 量子科学家：电子云模型（电子出现的概率统计）

1.2 能层和能级

能层 能层又叫电子层，在含有多个电子的原子内，电子分别在能量不同的区域内运动，这种不同的区域就是能层。由于原子中的电子是处在原子核的引力场中，电子总是尽可能先从内层排起，当一层充满后再填充下一层。

能级 能级又叫电子亚层，同一个能层的电子，能量也可能不同，又可以把他们分成不同能级。



1.3 四个量子数

1.3.1 主量子数

主量子数 n ，由周期数决定

$$n = 1, 2, 3, 4, 5 \dots$$

n	1	2	3	4	5
能层	K	L	M	N	O

1.3.2 角量子数

角量子数 l ，由能级决定

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5 \dots$$

l	0	1	2	3	4	5
能级	s	p	d	f	g	h

各个能层含有的能级

1.5 徐光宪规则

根据实验总结出的计算能级高低的近似规则


$$E = n + 0.7l$$

- $E(4s) = 4 + 0.7 \times 0 = 4$
- $E(3d) = 3 + 0.7 \times 2 = 4.4$

1.6 电子排布原理





1.6.1 能量最低原理

电子尽量填充至能量低的轨道中

- 注意：同一能级中的轨道（如3p中的 ）能量相等



















1.6.2 泡利不相容原理

一个轨道中不能存在自旋相同的电子（轨道表达式中同轨道箭头方向不同）

- ：正确
- ：正确
- ：正确
- ：错误

1.6.3 洪特规则

电子总是先填充空轨道

1.   ¹
2.   
3.   
4.   
5.   
6.   

洪特特例 各轨道电子排布为全满、半满或全空时有特殊的稳定性。（主要出现在过渡元素）

²⁴Cr

- 稳定： $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 \underbrace{3d^5 4s^1}_{\text{半满}}$
- 不稳定： $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^2$

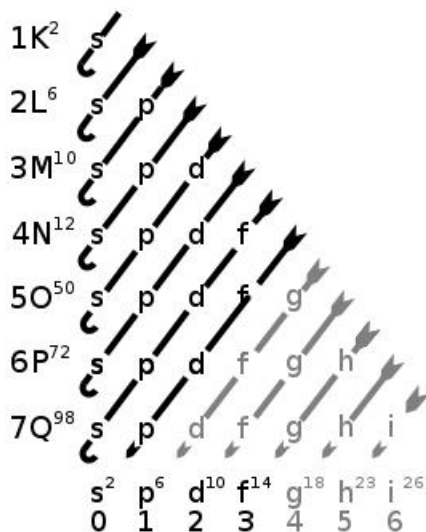
¹这些方格应该是一样大的，但是技术有限就只能这样

${}_{26}\text{Fe}$

- $\text{Fe}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
- $\text{Fe}_2^+: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$
- $\text{Fe}_3^+: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 \underbrace{3d^5}_{\text{更稳定}}$

1.6.4 构造原理

根据构造原理，绝大多数基态原子核外电子的排布都遵循下列顺序（徐光宪规则计算）：
 $1s$ 、 $2s$ 、 $2p$ 、 $3s$ 、 $3p$ 、 $4s$ 、 $3d$ 、 $4p$ 、 $5s$ 、 $4d$ 、 $5p$ 、 $6s$ 、 $4f$ 、 $5d$



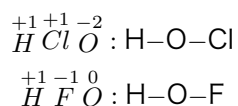
2 元素的性质

2.1 元素周期表分区

按照价电子所在能级分区。

族	IA											0														
周期	1	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA									
2													p 区													
3			IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B	IB	IIB																
4			d 区								ds 区															
5	s 区																									
6																										
7																										
镧系		f 区																								
铪系																										

判断元素化合价

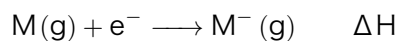


判断化学键类型 一般而言电负性之差大于 1.7 的元素之间形成离子键，小于 1.7 的形成共价键

2.3 电子亲和能

2.3.1 定义

气态原子得到一个电子、生成相应离子吸收/放出的能量。



电子亲和能	能量变化
> 0	放热
< 0	吸热

- 电子亲和能最大的是Cl (F半径过小导致得电子后过于拥挤，电子间排斥力大，氟离子稳定性相对较差)

2.4 电离能

2.4.1 定义

气态原子或离子失去电子形成气态离子所吸收的能量。

代号 I_n : 第 n 电离能 (失去 n 个电子)。第一电离能可以省略 1。

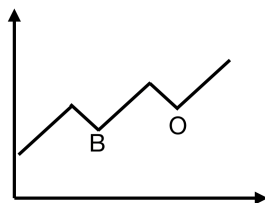
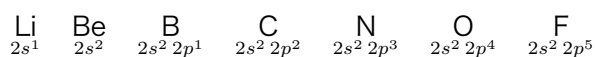
单位 KJ/mol

2.4.2 应用

- 同周期中， IA 族元素是 I_1 最小的、 O 族元素最大
- 除放射性元素中：

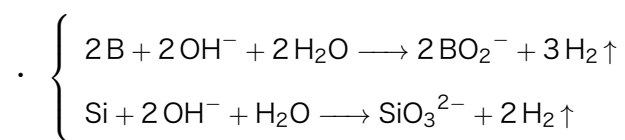
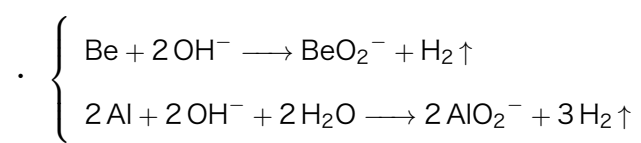
$$\begin{array}{ll} \max(I_1) = \text{He} & \max(I_2) = \text{Li} \\ \min(I_1) = \text{Cs} & \min(I_2) = \text{Ba} \end{array}$$

- 测定最外层电子数: Mg : $I_1 < I_2 \ll I_3$
- 第二周期 I_1 变化规律:



2.5 对角线规则

Li – Mg Be – Al B – Si



3 化学键

3.1 分类

3.2 共价键的形成

3.3 键参数

3.4 配合物

4 分子结构

4.1 Lewis结构式

4.2 中心原子轨道杂化理论

4.3 VSPER构型

4.4 立体构型

5 分子的性质

5.1 分子极性

5.2 分子手性

5.3 氢键

6 晶体结构

6.1 晶体

6.1.1 定义

6.1.2 鉴别

6.1.3 获取

6.2 原子晶体

6.3 分子晶体

6.4 离子晶体

6.4.1 晶格能

6.4.2 金属晶体

7 晶体的性质以及计算

7.1 熔沸点比较

7.1.1 不同类型晶体

7.1.2 相同类型晶体

7.2 晶体计算

7.2.1 晶胞的组成

7.2.2 晶体微粒个数