

# 物质结构与性质

胡译文

February 1, 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

<b>1 原子结构</b>	<b>3</b>
1.1 发现史	3
1.2 能层和能级	3
1.3 四个量子数	3
1.3.1 主量子数	3
1.3.2 角量子数	3
1.3.3 磁量子数	3
1.3.4 自旋量子数	4
1.4 电子、价电子排布式和轨道表达式	4
1.5 徐光宪规则	4
1.6 电子排布原理	4
1.6.1 能量最低原理	4
1.6.2 泡利不相容原理	4
1.6.3 洪特规则	5
1.6.4 构造原理	5
1.7 电子跃迁	5
<b>2 元素的性质</b>	<b>6</b>
2.1 元素周期表	6
2.2 电负性	6
2.3 电子亲和能	6
2.4 电离能	6
2.5 对角线规则	6
<b>3 化学键</b>	<b>7</b>
3.1 分类	7
3.2 共价键的形成	7
3.3 键参数	7
3.4 配合物	7
<b>4 分子结构</b>	<b>8</b>
4.1 Lewis结构式	8
4.2 中心原子轨道杂化理论	8
4.3 VSEPR构型	8
4.4 立体构型	8
<b>5 分子的性质</b>	<b>9</b>
5.1 分子极性	9
5.2 分子手性	9
5.3 氢键	9
<b>6 晶体结构</b>	<b>10</b>

6.1	晶体	10
6.1.1	定义	10
6.1.2	鉴别	10
6.1.3	获取	10
6.2	原子晶体	10
6.3	分子晶体	10
6.4	离子晶体	10
6.4.1	晶格能	10
6.4.2	金属晶体	10
<b>7</b>	<b>晶体的性质以及计算</b>	<b>11</b>
7.1	熔沸点比较	11
7.1.1	不同类型晶体	11
7.1.2	相同类型晶体	11
7.2	晶体计算	11
7.2.1	晶胞的组成	11
7.2.2	晶体微粒个数	11

# 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
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
能级	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	$h$

各个能层含有的能级

能层	$K$	$L$		$M$			$N$			
$n$	1	2		3			4			
$l$	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3
能级	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$

### 1.3.3 磁量子数

磁量子数 $m$ ，决定轨道数

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

能层	$K$	$L$		$M$		
$n$	1	2		3		
$l$	0	0	1	0	1	2
$m$	0	0	$0/+1/-1$	0	$0/+1/-1$	$0/+1/-1/+2/-2$
轨道数	1	1	3	1	3	5
轨道表达式	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>	<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>

### 1.3.4 自旋量子数

自旋量子数 $m_s$ ，决定电子运动方向（共两种情况，在轨道表达式中分别为上、下箭头）

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

## 1.4 电子、价电子排布式和轨道表达式

**价电子** 价电子指原子核外电子中能与其他原子相互作用形成化学键的电子，为原子核外跟元素化合价有关的电子

**轨道表达式** 又叫电子排布图

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

- 电子排布式： $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
- 价电子排布式： $3d^6 4s^2$
- 电子轨道表达式：

↑↓
----

↑↓
----

↑↓	↑↓	↑↓
----	----	----

↑↓
----

↑↓	↑↓	↑↓
----	----	----

↑↓	↑	↑	↑	↑
----	---	---	---	---

↑↓
----
- 价电子轨道表达式：

↑↓	↑	↑	↑	↑
----	---	---	---	---

↑↓
----

## 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）

- $\boxed{\uparrow}$ : 正确
- $\boxed{\downarrow}$ : 正确
- $\boxed{\uparrow\downarrow}$ : 正确
- $\boxed{\uparrow\uparrow}$ : 错误

### 1.6.3 洪特规则

电子总是先填充空轨道

1.  $\boxed{\uparrow}\boxed{\phantom{\uparrow}}\boxed{\phantom{\uparrow}}^1$
2.  $\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}\boxed{\phantom{\uparrow}}$
3.  $\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}$
4.  $\boxed{\uparrow\downarrow}\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}$
5.  $\boxed{\uparrow\downarrow}\boxed{\uparrow\downarrow}\boxed{\uparrow}$
6.  $\boxed{\uparrow\downarrow}\boxed{\uparrow\downarrow}\boxed{\uparrow\downarrow}$

### 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：

$1s$ 、 $2s$ 、 $2p$ 、 $3s$ 、 $3p$ 、 $4s$ 、 $3d$ 、 $4p$ 、 $5s$ 、 $4d$ 、 $5p$ 、 $6s$ 、 $4f$ 、 $5d$ .....

这些顺序可以通过徐光宪规则计算得。

## 1.7 电子跃迁

---

<sup>1</sup>这些方格应该是一样大的，但是技术有限就只能这样

## 2 元素的性质

### 2.1 元素周期表

### 2.2 电负性

### 2.3 电子亲和能

### 2.4 电离能

### 2.5 对角线规则

## 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