

## 《结构化学》教学大纲

课程代码：

课程名称：结构化学

英文名称：Structural Chemistry

课程性质：专业选修课

学分/学时：2 学分/36 学时

考核方式：闭卷考试

开课学期：2023-2024-2 学期

适用专业：纳米材料科学与工程，纳米器件技术

先修课程：无机化学，有机化学，高等数学，普通物理，物理化学，量子化学

后续课程：

开课单位：纳米科学技术学院

课程负责人：谢淼

大纲执笔人：谢淼

大纲审核人：

选用教材：

教学用书	教材名称	教材编者	出版社	出版年月	版次
主要教材	结构化学	孙宏伟	高等教育出版社	2016	第 1 版
	物质结构	潘道铠, 赵成天, 郑载兴	高等教育出版社	1989	第 2 版
主要参考书	结构化学基础	周公度, 段连运	北京大学出版社	2015	第 4 版
	量子化学	徐光宪, 黎乐民, 王德民	科学出版社	2009	第 2 版
	群论在化学中的应用	F.A.Cotton	福建科学技术出版社	1999	第 1 版

## 一、课程目标

结构化学是化学专业的一门重要基础必修课程。通过本课程学习使学生掌握微观物质运动的基本规律，获得原子、分子及晶体结构的基本理论和基础知识，了解物质的结构与性能关系，了解研究分子和晶体结构的近代物理方法的基本原理；通过本课程的学习，培养学生从物质结构与物质性质（性能）相互关系的基本规律出发，分析和解决问题。

通过本课学习，应使学生全面系统地了解微观世界的基本规律；能应用这些基本概念和规律说明解释微观现象；了解量子科学史上的重要物理思想，培养辩证唯物主义的世界观和科学的方法论。完善学生的化学知识体系。此外，通过本课程学习，学生应具备以下能力：

**目标 1：**初步建立量子力学的基本思想，掌握量子力学基本概念、原理和处理问题的基本方法与步骤。了解量子力学处理原子体系的方法、波函数及电子云的空间图形特点、多电子原子的近似求解思想；掌握原子轨道波函数量子数与相应力学量的关系、描述多电子原子状态的光谱项的基本概念、推求方法及所包含的量子数和力学量的关系。1.（支撑毕业要求指标点 1-1，1-2）

**目标 2：**了解量子化学处理实际问题的基本思路；掌握分子轨道理论的基本思想以及 HMO 研究共轭分子体系的思想方法。（支撑毕业要求指标点 1-1）

**目标 3：**掌握群论的基本知识包含群的基本概念：子群、陪集、共轭和类、商群。以及有限群基础：同态、同构、直积群和群表。以及了解群论在化学中的应用。（支撑毕业要求指标点 1-1，2-1）

**目标 4：**建立晶体的空间结构概念，了解如何从具体晶体抽象出点阵、晶体对称性与晶系的关系；掌握点阵及所对应晶体的概念、典型金属堆积和典型离子晶体的结构以及结晶化学规律。建立分子三维立体结构思维，掌握分子点群的确定方法及对称性与分子性质的关系。（支撑毕业要求指标点 1-1，1-2）

## 二、教学内容

**绪论** (2 学时) 主要内容:介绍结构化学研究的主要内容。结构化学发展历史与 Nobel 奖(科学思想观和方法论、批判性思维和创新思维)。学习结构化学的重要性(本质与现象关系)，结构化学特点及学习方法，教材与参考书

**第 1 章：量子力学基础** (2 学时) 主要内容：重点是从经典物理学遇到的困难和量子力学

的发展历史，理解光和粒子的波粒二象性，掌握德布罗意波。难点是对物质具有波动性与粒子性两重特性的理解。掌握量子力学五大基本假设，深刻理解波函数以及薛定谔方程的意义。（支撑毕业要求指标点 1-1）

**第 2 章：原子结构** (2 学时) 主要内容：重点是运用定态薛定谔方程求解一维无限深方势阱和一维方势垒问题以及处理一维周期势场问题，理解一维束缚态中能级分裂现象和势垒贯穿现象。难点是求解定态薛定谔方程及运用归一化条件、边界条件、标准条件确定波函数的具体形式。运用定态薛定谔方程求解一般中心势场和库仑势场中粒子的波函数，从而得到氢原子的状态波函数以及分立能量，了解氢原子中核外电子分布情况。（支撑毕业要求指标点 1-1）

**第 3 章：分子中的共价键** (4 学时) 主要内容：重点是 Born-Oppenheimer 近似的物理意义；理解价键理论处理双原子分子结构的一般过程，表示方法；组态和分子角动量耦合的物理意义，分子轨道理论和价键理论的差异；掌握线性变分法对双原子分子的应用；分子轨道理论处理  $H_2^+$  分子的基本假设（变分函数的构成）和主要结论（ $H_{aa}$ ,  $H_{bb}$ ,  $S_{ab}$  的物理意义，体系能量曲线，电子云分布）；分子轨道理论的基本要点（单电子近似，LCAO-MO 方法，成键三原则）；分子轨道的类型，能级次序及电子的排布规则；分子轨道理论处理双原子分子结构的一般过程和重要结论。要会正确熟练地写出双原子分子的电子组态，并能正确给出分子键级、磁性等。（支撑毕业要求指标点 1-1）

**第 4 章 配位化合物中的化学键** (4 学时) 主要内容：理解分子轨道图形理论的基本思想；原子簇化合物的基本特征和结构规则；掌握晶体场理论的基本思想和晶体场稳定化能的计算方法；中央金属离子和配体对分裂能的影响；配位化合物的结构特征和 Jahn-Teller 效应；配位化合物分子轨道理论的基本内容，和  $\sigma-\pi$  配键的成键过程及有关配位化合物的基本特征，以及  $\sigma-\pi$  配键的形成对配合物性质的影响。（支撑毕业要求指标点 1-1）

**第 5 章：固体中的化学键** (4 学时) 主要内容：掌握分子间和结合力类型，根据结合力区分出晶体类别，掌握典型晶体的物理化学性质。理解能带理论，能带的形成，能带的结构，能带的基本性质。（支撑毕业要求指标点 1-1）

**第 6 章 分子对称性和群论基础** (10 学时) 主要内容：理解对称操作的组合规则和对易规则，熟悉群的基本概念；分子对称性和分子物理性质之间的关系（偶极距，旋光性）；掌握对称元素和对称操作的基本概念（恒等，旋转，反映，象转，反演）；分子点群的分类方法；对称操作矩阵表示的意义和方法。掌握群的基本知识：群的定义，子集和陪集，共轭元素和类，不变子群和商群，同态和同构；掌握群的运算基本规则；理解群的线性表示。掌握群的表示理

论：包含线性空间和内积空间、不等价不可约表示；了解群论在化学中的应用：波函数做为不可约表示的积、哈密顿算符的群。（支撑毕业要求指标点 1-1, 2-1）

**第 7 章 晶体学基础** (6 学时) 主要内容：掌握点阵，点阵单位等概念；布拉维规则；晶体的宏观对称元素和微观对称元素及其对称操作的内容；晶体的对称性定理和晶体的划分情况（国际符号，十个晶系，十四种空间点阵形式）；掌握 Laue 方程及 Bragg 方程。（支撑毕业要求指标点 1-1）

**第 8 章 金属和离子晶体** (2 学时) 主要内容：掌握等径圆球密堆积原理及其在金属晶体中的应用（A1, A3 型）；晶体金属键的本质和金属半径的概念。掌握半径比临界值，常见的离子晶体类型（NaCl, CsCl, 立方 ZnS, 六方 ZnS, CaF<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>）结构型式；离子晶体点阵能的理论计算方法；离子堆积规则。（支撑毕业要求指标点 1-1）

### 三、课程成绩

课程目标	考核内容	考核方式
课程目标 1	测不准原理的涵义并能用于判断客体运动符合量子力学还是经典力学；波函数的基本涵义和性质，及态叠加原理的意义；Schrödinger 方程的建立过程及其物理涵义；量子力学用于微观体系的一般步骤；量子力学处理一维势箱粒子，微观粒子波粒二象形的本质及其统计解释；算符的基本概念，特别是关于厄米算符的定义和性质；本征函数，本征值和本征态的概念；力学量平均值计算，量子力学的基本假设。	选择题，填空题，综合思考题
课程目标 2	量子力学讨论微观体系的方法和步骤；氢原子 Schrödinger 方程解的物理意义（量子数 n、l、m，原子轨道及其表示方法，波函数和电子云的图象及其特征）；原子轨道能和电子结合能的计算；Pauli 原理的	选择题，填空题，综合思考题

	<p>物理意义，单电子假设的基本思想及其在处理多电子体系中的作用；正确书写原子光谱项的方法。线性变分法对双原子分子的应用；分子轨道理论处理 <math>H_2^+</math> 分子的基本假设（变分函数的构成）和主要结论（<math>H_{aa}</math>, <math>H_{bb}</math>, <math>S_{ab}</math> 的物理意义，体系能量曲线，电子云分布）；分子轨道理论的基本要点（单电子近似，LCAO-MO 方法，成键三原则）；分子轨道的类型，符号能级次序及电子的排布规则；分子轨道理论处理双原子分子结构的一般过程和重要结论。要会正确熟练地写出双原子分子的电子组态，并能正确给出分子键级、磁性等。</p>	
<p>课程目标 3</p>	<p>群论的基本理论以及群论在化学中的应用。通过本课程的学习，可以掌握群的基本概念，群的线性表示等的基本性质。理解群的定义、群的结构、群的线性表示，掌握三维转动群、置换群、<math>SU(N)</math>群、<math>SO(N)</math>群的基本性质。应用群论解决分子的对称性、晶体结构、电子能带结构、等领域内的问题。</p>	<p>综合思考题</p>
<p>课程目标 4</p>	<p>对称操作的组合规则和对易规则；分子对称性和分子物理性质之间的关系（偶极距，旋光性）。对称元素和对称操作的基本概念（恒等，旋转，反映，反演，旋转反演）；分子点群的分类方法。晶体结构的密堆积原理，典型金属与合金的结构与性质。离子的堆积原理，典型离子晶体的结构与性质，了解当前比较热门的功</p>	<p>综合思考题</p>

	能型晶体材料。	
--	---------	--

### 1. 考核方式

本课程采取闭卷、笔试考试的方式进行考核。采用百分制评分，考试时间为 120 分钟。

试卷赋分配置及考试内容：客观题 30 分，主观题 70 分。客观试题测试学生对结构化学基本知识、基本概念和原理的熟练掌握程度及应用的灵活程度，考查学生的推理判断能力及思维的敏捷性。主观试题测试考查学生综合应用知识、分析解决问题的能力及逻辑推理能力。

### 2. 成绩评定方法

	课堂提问和讨论权重	期中考试权重	期末考试权重
课程目标 1	2%	6%	12%
课程目标 2	2%	6%	12%
课程目标 3	4%	12%	24%
课程目标 4	2%	6%	12%
总计	10%	30%	60%

### 3. 课程目标（支撑毕业要求指标点）达成度评价方法

本课程考核成绩构成为：平时成绩 10% + 期中考试 30% + 期末考试成绩 60%，对学生进行综合评价。

达成度评价根据课程目标权重具体分配如下：

课程目标 1:  $0.02 \times \text{平时成绩} + 0.06 \times \text{期中成绩} + 0.12 \times \text{期末成绩}$

课程目标 2:  $0.02 \times \text{平时成绩} + 0.06 \times \text{期中成绩} + 0.12 \times \text{期末成绩}$

课程目标 3:  $0.04 \times \text{平时成绩} + 0.12 \times \text{期中成绩} + 0.24 \times \text{期末成绩}$

课程目标 4:  $0.02 \times \text{平时成绩} + 0.06 \times \text{期中成绩} + 0.12 \times \text{期末成绩}$

### 4. 评分标准

课程目标	90-100 (优秀)	75-89 (良好)	60-74 (及格)	0-59 (不及格)
课程目标 1	熟练掌握量子力学基础及其在简单化学体系中的应用。	较好地掌握量子力学基础及其在简单化学体系中的应用。	基本掌握量子力学基础及其在简单化学体系中的应用。	不能掌握量子力学基础及其在简单化学体系中的应用。
课程目标 2	熟练掌握原子结构(含单电子原子和多电子原子)、分子结构(含双原子分子、简单共轭分子、配位化合物等)和晶体结构。熟练掌握电子自	较好地掌握原子结构(含单电子原子和多电子原子)、分子结构(含双原子分子、简单共轭分子、配位化合物等)和晶体结构。较好地掌握电子	基本掌握原子结构(含单电子原子和多电子原子)、分子结构(含双原子分子、简单共轭分子、配位化合物等)和晶体结构。基本掌握电子自	不能掌握原子结构(含单电子原子和多电子原子)、分子结构(含双原子分子、简单共轭分子、配位化合物等)和晶体结构。不能掌握电子自

	旋、分子轨道理论、杂化轨道理论、配位场理论等知识点,并能够熟练运用这些理论知识解释具体分子结构。	自旋、分子轨道理论、杂化轨道理论、配位场理论等知识点,并能够熟练运用这些理论知识解释具体分子结构。	旋、分子轨道理论、杂化轨道理论、配位场理论等知识点,并能够熟练运用这些理论知识解释具体分子结构。	旋、分子轨道理论、杂化轨道理论、配位场理论等知识点,并能够熟练运用这些理论知识解释具体分子结构。
课程目标 3	能够综合、灵活地将本课程所学知识和其他专业课程知识相结合,并能熟练地将所学知识用于分析物质的结构和性质,建立结构和性能之间关系的规律性认知。	能够较综合地、较灵活地将本课程所学知识和其他专业课程知识相结合,并能熟练地将所学知识用于分析物质的结构和性质,建立结构和性能之间关系的规律性认知。	基本能将本课程所学知识和其他专业课程知识相结合,基本能够熟练地将所学知识用于分析物质的结构和性质,建立结构和性能之间关系的规律性认知。	不能将本课程所学知识和其他专业课程知识相结合,不能熟练地将所学知识用于分析物质的结构和性质,不能建立结构和性能之间关系的规律性认知。
课程目标 4	完全具有分子三维立体结构思维,能够确定分子点群及对称性,灵活根据已学的知识分析分子结构与分子性质的关系	较好掌握具有分子三维立体结构思维,能够确定分子点群及对称性,能根据已学的知识分析分子结构与分子性质的关系	基本具有分子三维立体结构思维,能够确定分子点群及对称性,基本能根据已学的知识分析分子结构与分子性质的关系	不具有分子三维立体结构思维,能够确定分子点群及对称性,不能根据已学的知识分析分子结构与分子性质的关系