

《化学原理》考试大纲

《无机化学》部分的内容范围

一、原子结构与元素周期律

- (1) 氢原子光谱
- (2) 核外电子运动状态的描述和四个量子数
- (3) 核外电子排布和元素周期律
- (4) 元素性质的周期性

二、分子结构

- (1) 离子键和晶格能
- (2) 价键理论
- (3) 杂化轨道理论
- (4) 价层电子对互斥理论
- (5) 离域大 π 键理论
- (6) 分子轨道理论
- (7) 分子间作用力

三、晶体结构

- (1) 离子晶体类型和半径比规则
- (2) 离子极化作用

四、酸碱平衡

- (1) 酸碱质子理论和酸碱电子理论
- (2) 水的电离和 K_w
- (3) 弱酸的电离和弱碱的电离
- (4) 两性物质的电离
- (5) 缓冲溶液

五、沉淀平衡

- (1) 溶度积原理和溶度积常数
- (2) 沉淀平衡的移动

六、氧化还原反应

- (1) 氧化数
- (2) 氧化还原反应的配平
- (3) 原电池
- (4) 标准电极电势及其应用
- (5) 能斯特方程
- (6) 元素电势图和 $\Phi-pH$ 图
- (7) 电解

七、氢和稀有气体

八、卤素

- (1) 卤素单质
- (2) 卤化氢和氢卤酸
- (3) 多卤化物、卤素互化物和拟卤素

(4) 卤素含氧酸

九、氧族元素

(1) 氧族元素单质

(2) 过氧化氢和过氧化物

(3) 硫和硒及其化合物

十、氮族元素

(1) 氮及其化合物

(2) 磷及其化合物

(3) 砷、锑和铋及其化合物

十一、碳族元素

(1) 碳及其化合物

(2) 硅及其化合物

(3) 锡和铅及其化合物

十二、硼族元素

(1) 硼及其化合物

(2) 铝及其化合物

(3) 镓、铟和铊简介

十三、碱金属和碱土金属

(1) 碱金属化合物

(2) 碱土金属化合物

十四、配位化合物

(1) 配位化合物概念、组成和命名

(2) 配合物价键理论和晶体场理论

(3) 配合物异构现象

(4) 配位平衡

十五、铜和锌族元素

(1) 铜族元素及其化合物

(2) 锌族元素及其化合物

十六、过渡金属

(1) 第一过渡金属及其化合物

(2) 第二和第三过渡金属简介

《物理化学》部分的内容范围

第一章 气体

理想气体状态方程, van der Waals 方程, virial 方程, 对比状态和对比状态原理

热力学第一定律

1 基本概念: 系统与环境, 系统的性质, 热力学平衡态, 状态函数, 状态方程, 过程和途径, 热和功

2 热力学第 0 定律

3 热力学第一定律与内能

4 准静态过程与可逆过程

5 焓, 等压热容, 等容热容

6 热力学第一定律对理想气体的应用

理想气体的热力学能和焓，理想气体的 C_p 与 C_v 之差，绝热过程和过程方程，卡诺循环

7 焦耳-汤姆逊效应，实际气体的 ΔH 和 ΔU

8 热化学

等压热效应与等容热效应，反应进度，标准摩尔焓变，Hess 定律，标准摩尔生成焓，标准摩尔离子生成焓，标准摩尔燃烧焓，反应焓变与温度的关系，绝热反应-非等温反应，热容-能量均分原理

第三章 热力学第二定律

1 自发变化，不可逆性

2 热力学第二定律

3 卡诺定理

4 熵的定义

5 克劳修斯不等式与熵增加原理

6 熵变的计算

7 热力学第二定律的本质和熵的统计意义，玻兹曼公式

8 亥姆霍兹自由能和吉布斯自由能，亥姆霍兹自由能和吉布斯自由能判据

9 ΔG 的计算

10 热力学函数间的关系

基本公式，特性函数，麦克斯韦关系式及应用，吉布斯-亥姆霍兹方程式，吉布斯自由能与温度、压力的关系

112 热力学第三定律与规定熵

第四章 溶液

1 溶液组成的表示法

2 偏摩尔量，定义，加合公式，吉布斯-杜亥姆公式

3 化学势定义，在相平衡中的应用，化学势与温度、压力的关系

4 气体混合物中各组分的化学势，逸度，逸度因子

5 拉乌尔定律，亨利定律

6 理想液态混合物，理想液态混合物中任一组分的化学势，理想液态混合物的通性，

7 理想稀溶液中任一组分的化学势

8 稀溶液的依数性

蒸气压下降，凝固点降低，沸点升高，渗透压

9 活度和活度因子

10 分配定律-溶质在两互不相溶液相中的分配

第五章 相平衡

1 多相体系平衡的一般条件

2 相律，相，组分数，自由度，相律

3 单组分体系的相平衡

单组分体系的两相平衡，克拉贝龙方程式，克拉贝龙-克劳修斯方程，外压与蒸气压的关系，水的相图，超临界状态

4 二组分体系的相图及其应用

理想的完全互溶双液系，杠杆规则，蒸馏、精馏的基本原理，非理想的完全互溶双液系，

部分互溶的双液系，不互溶的双液系，简单的低共熔二元相图，形成化合物的体系，液固相都完全互溶的相图，固态部分互溶的相图

第六章 化学平衡

- 1 化学反应的平衡条件与反应进度的关系
- 2 化学反应的平衡常数和等温方程式，气相反应的平衡常数，溶液中反应的平衡常数
- 3 平衡常数表示式
- 4 复相化学平衡
- 5 标准生成吉布斯自由能
 - 标准状态下反应的吉布斯自由能变化值，标准摩尔生成吉布斯自由能
- 6 温度、压力及惰性气体对化学平衡的影响
- 7 同时化学平衡
- 8 反应的耦合

第七章 统计热力学基础

- 1 统计系统的分类，统计热力学的基本假定
- 2 玻兹曼分布，定位系统的最概然分布，非定位系统的最概然分布，
- 3 配分函数，配分函数与热力学函数的关系，配分函数的分离
4. 各配分函数求法及其对热力学函数的贡献
 - 原子核配分函数，电子配分函数，平动配分函数，单原子理想气体的热力学函数，转动配分函数，振动配分函数，分子的全配分函数

第八章 电解质溶液

- 1 法拉第定律
- 2 离子电迁移率和迁移数
- 3 电解质溶液的电导，摩尔电导率，浓度对摩尔电导率的影响，离子独立移动定律，离子淌度，电导的应用
4. 离子强度，电解质的平均活度和平均活度系数

第九章 可逆电池的电动势及其应用

- 1 可逆电池，可逆电极，电极反应，电动势的测定，电池的书写方法
 - 2 可逆电池的热力学，Nernst 方程，标准电动势求电池反应的平衡常数
 - 3 界面电势，接触电势，液体接界电势
 - 4 标准电极电势，标准氢电极，参比电极，电池电动势的计算
 - 5 电动势测定的应用
- 电解质的平均活度因子，难溶盐的活度积，溶液 PH 值的测定，电势—pH 图及应用

第十章 电解与极化

- 1 分解电压
- 2 极化作用
 - 浓差极化，电化学极化，极化曲线，氢超电势，塔菲尔公式
- 3 电解时电极上的竞争反应
- 金属的析出与氢的超电势，金属离子的分离，电解过程的应用

第十一章 化学动力学基础（一）

1 基本概念

反应速率及其表示法，基元反应，反应级数与反应分子数，反应机理，质量作用定律，反应速率常数

2 具有简单级数的反应

一级反应，二级反应，三级反应，n 级反应，反应级数的测定方法

3 几种典型的复杂反应

对峙反应，平行反应，连续反应，链反应

4 温度对反应速率的影响

阿累尼乌斯经验式，反应速率与温度关系的几种类型，活化能

5 链反应，稳态近似，链反应历程

第十二章 化学动力学基础（二）

1 速率理论，基本假设，基本观点，活化能，表观活化能，概率因子

2 过渡态理论基本观点，势能面，活化络合物

3 光化学反应，初级过程和次级过程，光化学基本定律，量子产率，光化学反应动力学

4 催化反应动力学，基本概念，基本特征，酶催化反应，自催化反应

第十三章 表面物理化学

1 表面张力及表面 Gibbs 自由能，表面张力与溶液浓度的关系

2 弯曲表面下的附加压力和蒸汽压，Young-Laplace 公式，Kelvin 公式

3 溶液的表面吸附——Gibbs 吸附公式

4 液-液界面的铺展，单分子表面膜

5 液固界面，粘湿过程，浸湿过程，铺展过程，接触角与润湿方程

6 固体的表面吸附，Langmuir 吸附理论，BET 吸附公式，

7 气-固表面催化反应速率

第十四章 胶体分散体系和大分子溶液

1 胶体及其基本特征

2 溶胶的动力性质，布朗运动，扩散和渗透压

3 溶胶的光学性质，丁铎尔现象

5 溶胶的电学性质，电动现象，电泳、电渗

6 大分子溶液，大分子化合物的平均分子量，唐南平衡

《结构化学》部分的内容范围

一、量子力学基础和原子结构

(1) 量子力学基本原理：波粒二象性、海森堡测不准原理、波函数、力学量的算符、薛定谔方程、态叠加原理等。

(2) 势箱中运动的粒子：薛定谔方程的解及其应用。

(3) 单电子原子中的电子：薛定谔方程及其解、量子数与波函数、能量、轨道角动量、波函数和电子云的图形表示等。

(4) 电子自旋与保里原理：电子自旋、自旋波函数和自旋-轨道、全同粒子和保里不相容原

理、Slater 行列式等。

(5) 原子的状态与原子光谱：基态原子的电子组态、原子的量子数与原子光谱项、洪特规则与基谱项的确定等。

二、分子结构与性质

(1) 分子的对称性与点群：对称元素、分子点群的确定。

(2) 双原子分子结构与性质： H_2^+ 的基态、分子轨道理论、LCAO-MO 基本原则、MO 的类型、符号和能级顺序、电子填充原则、组态、键级、同核（异核）双原子分子结构、稳定性、磁性、化学键特征等。

(3) 多原子分子结构与性质：共轭分子结构与 HMO 法、对(环)共轭链烯的应用、电荷密度、键级与自由价、分子图、离域 π 键类型、三中心键与硼烷等缺电子分子结构等。

(4) 配位化合物和簇合物的结构与性质：晶体场理论 (d 轨道能级的分裂、d 轨道中电子的排布、晶体场稳定化能、配合物畸变和姜-泰勒效应等)、 $\sigma - \pi$ 电子授受键、羧基配合物及有机金属配合物的结构等。

三、晶体结构与性质

(1) 晶体的点阵结构理论：晶胞及晶胞的二个基本要素、晶面和晶面指标等。

(2) 晶体结构的密堆积原理：金属晶体的四种堆积型式。

(3) 离子晶体、共价键型晶体、分子型晶体、混合键型晶体的结构与应用。