

《结构化学》课程教学大纲

一、课程概况

课程名称	结构化学		课程号	1412013			
课程英文名称	Structural Chemistry		学时/学分	54/3			
课程性质	必修		适用专业	材料化学、新能源材料与器件			
课程负责人	王丹		教学团队	慈志鹏			
选用教材及参考书目	教材：李炳瑞，《结构化学》（第4版），高等教育出版社 参考书：1.周公度、段连运，《结构化学基础》（第5版），北京大学出版社 2.徐光宪、王祥云，《物质结构》（第2版），高等教育出版社 3.周公度，《结构和物性》，高等教育出版社 4.潘道皑、赵成大、郑载兴，《物质结构》（第2版），高等教育出版社						
课程简介： 结构化学是材料化学和化学专业本科生的一门专业必修课，课程主要从量子力学基本假设出发，在微观层次上介绍原子、分子中电子的运动规律，以及原子和分子的空间和电子结构，重点在于揭示化学键和分子间相互作用的本质。通过本课程的学习，学生能够掌握结构化学的基本概念、基本理论和部分化学现象的物理本质，并能够应用所学理论和方法分析一些简单的分子结构和实验现象，培养学生从微观角度分析化学反应和物质结构与性能的能力，可塑造学生抽象思维能力和科学思维方式，以及应用结构化学原理去分析、解决生活、生产中实际问题的能力。							
课程目标（Course Objectives, CO）							
知识目标（CO1）		熟悉掌握系统的自然科学基础知识与专业知识					
能力目标（CO2）		掌握科学的思维方法					
		能够对材料科学与工程领域的复杂工程问题进行表述					
教学方式 (Pedagogical Methods, PM)		☑PM1 讲授法教学	47 学时 87 %	☑PM2 研讨式学习	3 学时 6 %		
		☑PM4 翻转课堂	4 学时 7 %				
考核方式 (Evaluation Methods, EM)		☑EM1 课程作业	20%	☑EM2 单元测试	16%	☑EM3 课堂辩论	12%
		☑EM5 期末考试	40%	☑出席	12%		

二、教学大纲的定位说明

(一) 课程教学目标与任务

通过本课程的学习，使学生达到以下几点目标：

1.理解概括量子力学基本原理，并能够应用量子力学基本原理处理微观领域问题的基本思路和方法，从原子、分子等微观角度加深“结构决定性能”的观念，形成微观领域粒子运动规律要用量子力学处理的科学思维方式。

2.能够概况描述原子和分子轨道的物理含义，并应用量子力学理论表达单电子原子和双原子分子的微观状态方程，阐述量子力学原理研究多电子原子的基本方法和步骤。

3.能够认识原子结构与原子结构参数及原子光谱项之间的关系，区分原子轨道和电子云的图形表示。

4.熟悉应用分子轨道理论和价键理论分析多原子分子的电子结构，并能够从微观角度出发解释、预测复杂多原子分子的结构及其化学反应性能，并对问题进行科学分析，能够识别其关键环节，并进行正确的表述。

5.通过自主学习，能够判断常见分子所属的对称点群及包含的对称元素，分析分子对称性与偶极矩、旋光性的关系。

6.通过自主学习，了解超分子化学的研究动向，培养自主学习和终身学习的意识。

(二) 课程教学目标与培养目标的关系

课程教学目标与培养目标的关系：通过本课程的学习，能够加深学生的化学基础理论（培养目标2），培养科学的思维方式，使学生能够在材料相关领域从事基于化学的新材料理论设计、合成和理论分析等工作（培养目标3）。

1.主要支撑

1.1 能够将数学、自然科学、工程基础知识和专业知识用于表述材料科学与工程领域的复杂工程问题。

2.辅助支撑

2.1 能够对材料科学与工程领域的基于化学的复杂工程问题进行抽象分析，识别其关键环节和重要参数。

课程教学目标与毕业要求的关系见下表。

课程教学目标	毕业要求	
	1.1	2.1
1.理解概括量子力学基本原理,并能够应用量子力学基本原理处理微观领域问题的基本思路和方法,从原子、分子等微观角度加深“结构决定性能”的观念,形成微观领域粒子运动规律要用量子力学处理的科学思维方式。	√	
2.能够概况描述原子和分子轨道的物理含义,并应用量子力学理论表达单电子原子和双原子分子的微观状态方程,阐述量子力学原理研究多电子原子的基本方法和步骤。	√	
3.能够认识原子结构与原子结构参数及原子光谱项之间的关系,区分原子轨道和电子云的图形表示。	√	
4、熟悉应用分子轨道理论和价键理论分析多原子分子的电子结构,并能够从微观角度出发解释、预测复杂多原子分子的结构及其化学反应性能,并对问题进行科学分析,能够识别其关键环节,并进行正确的表述。	√	√
5.通过自主学习,能够判断常见分子所属的对称点群及包含的对称元素,分析分子对称性与偶极矩、旋光性的关系。	√	
6.通过自主学习,了解超分子化学的研究动向,培养自主学习和终身学习的意识。	√	

(三) 支撑课程目标的教学内容与方法

序号	教学内容	教学方法	课程目标
1	第1章:量子力学基础 1.1.从经典力学到早期量子论 1.2.量子力学的建立 1.3.阱中粒子的量子特征	讲授	课程教学目标:理解概括量子力学基本原理,并能够应用量子力学基本原理处理微观领域问题的基本思路和方法。
2	第1章习题和与第1章内容相关的扩展知识点	讲授	课程教学目标:培养应用量子力学方法处理简单的微观体系的科学思维方式。
3	第2章:原子结构 2.1.单电子原子的 Schrödinger 方程及其解	讲授	课程教学目标 1:能够概况描述原子轨道的物理含义,并应用量子力学理论表达单电子原子的微观状态方

	2.2.原子轨道和电子云的图形表示 2.3.量子数与可测物理量 2.4.多电子原子的结构 2.5.原子结构参数 2.6.原子光谱项		程, 阐述量子力学原理研究单电子原子的基本方法和步骤。 课程教学目标 2: 能够认识原子结构与原子结构参数及原子光谱项之间的关系, 区分原子轨道和电子云的图形表示。
4	第2章习题和与第2章内容相关的扩展知识点	讲授+研讨	课程教学目标: 培养应用量子力学方法处理简单的微观体系的科学思维方式。
5	第3章: 双原子分子结构与化学键理论 3.1.分子轨道理论 3.2.价键理论 3.3.双原子分子的光谱项	讲授	课程教学目标: 能够概况描述分子轨道的物理含义, 并应用量子力学理论表达双原子分子的微观状态方程, 阐述量子力学原理研究双原子分子的基本方法和步骤。
6	第3章习题和与第3章内容相关的扩展知识点	讲授+研讨	课程教学目标: 培养应用量子力学方法处理简单的微观体系的科学思维方式。
7	第4章: 分子对称性与群论初步 4.1.对称性概念 4.2.分子的对称操作与对称元素 4.3.分子点群 4.4.分子对称性与偶极矩、旋光性的关系	翻转课堂	课程教学目标: 通过自主学习, 能够判断常见分子所属的对称点群及包含的对称元素, 分析分子对称性与偶极矩、旋光性的关系。
8	第5章: 多原子分子的结构与性质 5.1.非金属元素的结构化学: 8-N 法则 5.2.非共轭分子几何构型与 VSEPR 规则 5.3.共轭分子与 SHMO 法 5.4.饱和分子的正则轨道与定域轨道 5.5.缺电子分子的结构 5.6.多原子分子的谱项 5.7.配位场理论 5.8.分子轨道对称性守恒原理	讲授+研讨	课程教学目标: 熟悉应用分子轨道理论分析多原子分子的电子结构。能够应用量子力学原理, 从微观角度出发解释、预测复杂多原子分子的结构及其化学反应性能, 并对问题进行科学分析, 能够识别其关键环节, 并进行正确的表述。
9	第5章习题和与第5章内容相关的扩展知识点	讲授	课程教学目标 1: 培养应用量子力学方法处理简单的微观体系的科学思维方式。 课程教学目标 2: 能够应用量子力学原理, 从微观角度出发解释、预测复杂多原子分子的结构及其化学反

			应性能，并对问题进行科学分析，能够识别其关键环节，并进行正确的表述。
10	第6章：超分子化学简介 6.1.超分子的概念 6.2.分子间相互作用 6.3.分子识别与自组装 6.4.超分子实例 6.5.晶体工程	翻转课堂	课程教学目标：通过自主学习，了解超分子化学的研究动向，培养自主学习和终身学习的意识。

（四）先修课程要求，与先修及后续相关课程之间的逻辑关系和内容衔接

先修相关课程：《高等数学》《线性代数》《普通物理》《普通化学》

后续相关课程：《固体物理》

与先修相关课程之间的逻辑关系和内容衔接：《高等数学》中微积分、级数、极限等数学知识为《结构化学》提供了必要的数学基础。《线性代数》中矩阵的概念和计算在《结构化学》中广泛应用。《普通物理》涉及的力学量是构造微观体系哈密顿算符的基础。《普通化学》中涉及了物质结构、化学键等理论，《结构化学》在《普通化学》相关知识的基础上，从量子力学的角度对相关内容进行了深入的诠释。

与后续相关课程之间的逻辑关系和内容衔接：《结构化学》从微观角度分析了原子、分子中电子的运动状态，为后续的《固体物理》中固体电子理论提供了知识基础。

（五）检验课程目标达成度的考核方法和评分标准

本课程目标达成度的考核方法主要包括过程性评价和终结性评价两部分：

过程性评价包括出席、课堂辩论、课程作业和单元测试。

终结性评价为期末考试。

考核方法	评分标准	课程目标要求
过程性评价 (60分)	出席/课堂辩论 (24分)	1 (5分), 2 (5分), 3 (2分), 4 (5分), 5 (2分), 6 (2分)
	课程作业 (20分)	1 (4分), 2 (4分), 3 (2分), 4 (6分), 5 (2分), 6 (2分)
	单元测试 (16分)	1 (6.4分), 2 (4.8分), 3 (3.2分), 5 (1.6分)
终结性评价 (40分)	期末考试 (闭卷测试, 40分)	1 (10分), 2 (6分), 3 (4分), 4 (16分), 5 (4分)

三、课程内容与安排

第一章 量子力学基础 (11 学时)

学习目标: 重点掌握量子力学基本假设和应用量子力学基本假设处理微观问题的思路和方法。掌握微观粒子运动的基本特征和波函数的概率解释。了解一维无限深势阱和三维无限深势阱中薛定谔方程的求解过程和结果讨论。一般了解经典力学中无法解决的三大问题, 以及能量量子化、光量子化以及轨道角动量量子化的概念。

教学重点:

1. 实物粒子的波粒二象性
2. 波函数的概率解释
3. 不确定原理
4. 量子力学的基本假设
5. 一维无限深势阱中薛定谔方程解的讨论

教学难点:

1. 一维无限深势阱中薛定谔方程的求解

教学方法: 课堂讲授教学为主, 研究讨论为辅

教学内容:

第一节 从经典力学到早期量子论 (2 学时)

1.1.1 黑体辐射与能量量子化

1.1.2 光电效应与光量子化

1.1.3 原子光谱与轨道角动量量子化

第二节 量子力学的建立 (4 学时)

1.2.1 实物粒子的波粒二象性

1.2.2 Schrödinger 方程

1.2.3 波函数的概率解释

1.2.4 不确定原理

1.2.5 量子力学公设

第三节 阱中粒子的量子特征 (3 学时)

1.3.1 一维无限深势阱中的粒子

1.3.2 三维无限深势阱中的粒子

第四节 相关知识点扩展和习题课 (2 学时)

第二章 原子结构 (13 学时)

学习目标: 重点掌握单电子和多电子原子薛定谔方程的建立, 原子轨道的物理意义, 以及算符与可测物理量。掌握单电子和多电子原子薛定谔方程求解的思路, 原子光谱项的求法。理解跃迁选律, 原子轨道和电子云的图形表示。一般理解原子结构参数、构造原理和 virial 定理。

教学重点:

1. 单电子原子薛定谔方程的建立

2. 量子数与可测物理量

3. 多电子原子薛定谔方程的建立和近似求解。

4.L-S 耦合制式下，原子光谱项的求法以及 Hund 规则。

教学难点：

1.单电子原子薛定谔方程的求解。

2.轨道角动量的求解。

教学方法：课堂讲授教学为主，研究讨论为辅

教学内容：

第一节 单电子原子的 Schrödinger 方程及其解（2 学时）

2.1.1 单电子原子 Schrödinger 方程的建立

2.1.2 坐标变换与变量分离

2.1.3 方程的求解：原子轨道与能级

2.1.4 virial 定理与零点能

第二节 原子轨道和电子云的图形表示（2 学时）

2.2.1 作图对象与作图方法：三元函数的降维

2.2.2 轨道和电子云的径向部分和角度部分的对画图

2.2.3 轨道和电子云的等值面图与界面图：函数参数

2.2.4 轨道和电子云的网格图：坐标参数化

2.2.5 电子云黑点图

2.2.6 原子轨道的字称

第三节 量子数与可测物理量（2 学时）

2.3.1 算符与可测物理量

2.3.2 角动量的空间量子化

第四节 多电子原子的结构（2 学时）

2.4.1 多电子原子 Schrödinger 方程的近似求解

2.4.2 构造原理与 Slater 行列式

第五节 原子结构参数（1 学时）

2.5.1 电离能

2.5.2 电子亲和势

2.5.3 电负性

2.5.4 化学硬度

第六节 原子光谱项 (2 学时)

2.6.1 组态与状态

2.6.2 L-S 矢量耦合模型

2.6.3 原子光谱项和光谱支项的求法

2.6.4 基谱项的确定: Hund 规则

2.6.5 跃迁选律

第七节 相关知识点扩展和习题课 (2 学时)

第三章 双原子分子结构与化学键理论 (10 学时)

学习目标: 本章以 H_2^+ 和 H_2 的量子力学处理为核心, 重点掌握采用分子轨道理论处理微观问题的思路、分子轨道理论要点, 以及共价键的本质。掌握变分原理的物理意义和应用、双原子分子的电子组态以及原子轨道的杂化。了解 B.O. 近似、分子轨道的类型, 以及电子配对法的量子力学基础。一般了解双原子分子的光谱项。

教学重点:

1. 分子轨道理论

2. 价键理论

教学难点:

1. 共价键的本质

2. 电子配对法的量子力学基础, H_2 的完全波函数的确定

教学方法: 课堂讲授教学为主, 研究讨论为辅

教学内容:

第一节 分子轨道理论 (4 学时)

3.1.1 H_2^+ 的 Schrödinger 方程与 B.O. 近似

3.1.2 变分原理及其证明

3.1.3 H_2^+ 的 Schrödinger 方程的变分求解

3.1.4 共价键的本质

3.1.5 分子轨道理论要点

3.1.6 分子轨道的类型

3.1.7 双原子分子的价层轨道与电子组态

第二节 价键理论 (2.5 学时)

3.2.1 H_2 的 Schrödinger 方程的变分求解

3.2.2 电子配对法的量子力学基础

3.2.3 原子轨道的杂化

第三节 双原子分子的光谱项 (1.5 学时)

3.3.1 分子光谱项及支项

3.3.2 非等价组态的光谱项

3.3.3 等价组态的光谱项

第四节 相关知识点扩展和习题课 (2 学时)

第四章 分子对称性与群论初步 (2 学时)

学习目标: 重点掌握分子中的对称操作和分子点群, 能够由分子点群推演分子的空间结构, 能够根据分子的空间结构确定其所属分子点群。掌握对称性的概念。了解分子对称性与偶极矩、旋光性的关系。

教学重点:

1. 分子点群的分类

2.常用分子所属分子点群的确定及包含的对称元素

教学难点：高阶群中对称操作的确定

教学方法：翻转课堂

教学内容：

第一节 对称性概念（0.2 学时）

第二节 分子中的对称操作与对称元素（0.4 学时）

4.2.1 旋转与旋转轴

4.2.2 反映与镜面

4.2.3 反演与对称中心

4.2.4 旋转反映与映轴（旋转反演与反轴）

第三节 分子点群（1 学时）

4.3.1 单轴群

4.3.2 双面群

4.3.3 高阶群

4.3.4 无旋转轴群

4.3.5 确定分子点群的流程图

第四节 分子对称性与偶极矩、旋光性的关系（0.4 学时）

4.4.1 分子对称性与偶极矩

4.4.2 分子对称性与旋光

第五章 多原子分子结构与性质（16 学时）

学习目标：重点掌握处理共轭分子的 SHMO 法，能够根据计算结果推测共轭分子的稳定性和化学反应位置。能够应用前线轨道理论推测化学反应的难易，并根据结果进行实验设计。掌握价电子对互斥理论，以及分子轨道理论处理饱和分子正则轨道和定域轨道的方法，分子轨道理论处理缺电子

分子电子结构的思路。了解配位场理论，8-N 法则。一般了解相关图理论和多原子分子的谱项。

教学重点：

- 1.价电子对互斥理论确定非共轭分子的几何构型
- 2.SHMO 法处理共轭分子的电子结构
- 3.分子轨道理论处理饱和分子的正则轨道与定域轨道
- 4.分子轨道理论处理缺电子分子的桥键
- 5.前线轨道理论

教学难点：

- 1.SHMO 法处理环状共轭体系
- 2.饱和分子正则轨道与定域轨道的构造
- 3.缺电子分子中桥键分子轨道的构造
- 4.相关图理论

教学方法：课堂讲授教学为主，研究讨论为辅

教学内容：

第一节 非金属元素的结构化学：8-N 法则（1 学时）

第二节 非共轭分子几何构型与 VSEPR 规则（1 学时）

第三节 共轭分子与 SHMO 法（4 学时）

5.3.1 丁二烯离域大 π 键的 SHMO 处理

5.3.2 直链和单环共轭体系本征值的图解法

5.3.3 分子图： π 电子密度、 π 键级、自由价

5.3.4 共轭效应

第四节 饱和分子的正则轨道与定域轨道（1.5 学时）

第五节 缺电子分子的结构（1.5 学时）

5.5.1 缺电子原子化合物的三种类型

5.5.2 硼烷中的多中心键

5.5.3 金属烷基化合物中的多中心键

第六节 多原子分子的谱项（1学时）

第七节 配位场理论（2学时）

5.7.1 晶体场理论

5.7.2 配位场理论

5.7.3 T-S 图和电子光谱

第八节 分子轨道对称守恒原理（2学时）

5.8.1 前线轨道理论

5.8.2 相关图理论

第九节 相关知识点扩展和习题课（2学时）

第六章 超分子化学简介（2学时）

学习目标：掌握超分子的概念，分子间 van der Waals 作用，氢键， π - π 堆积作用，疏水效应和分子识别与自组装。了解超分子的实例和晶体工程。

教学重点：

1.分子间相互作用。

2.分子识别与自组装。

教学难点：分子识别与自组装概念化、不直观。

教学方法：翻转课堂

教学内容：

6.1 超分子的概念（0.2学时）

6.2 分子间相互作用（1学时）

6.2.1 van der Waals 作用

6.2.2 氢键

- 6.2.3 π - π 堆积作用
- 6.2.4 疏水效应
- 6.3 分子识别与自组装 (0.4 学时)
 - 6.3.1 分子识别
 - 6.3.2 自组装
- 6.4 超分子实例 (0.4 学时)
 - 6.4.1 具有分形结构的树状大分子
 - 6.4.2 杯芳烃/球碳配合物
 - 6.4.3 球碳的超分子
 - 6.4.4 卟啉类分子组装的人工天线系统
 - 6.4.5 轮烷、索烃和纽结
 - 6.4.6 超分子多面体和“分子胶囊”
- 6.5 晶体工程 (0.2 学时)

制定人：王丹

审定人：赵争妍

批准人：贺德行

日期：2024.10.10