

(mass conservation), 能量守恒 (energy conservation) 等概念解释化学变化中物质和能量的关系, 用它们配平方程式和看一个反应是吸热还是放热。再如分子运动、质量作用定律 (mass action law) 等等这些都是大家在中学里学到的概念。也有些将在这门课中陆续提出讨论。显然, 概念非常之多, 但是在这许多概念之中, 有一些最基本的、总 (general) 的概念, 它们贯穿在整个化学学习和研究之中。从一开始就要有个初步了解, 在今后学习和应用过程中, 会有更深的理解。

2.3.1 组成-结构-性质-功能/效应的关系 (composition-structure-property-function/effect relationship)

一切化学物质都有固定的化学组成 (chemical composition) 和结构。化学组成指分子中不同元素的原子数目。化学结构指这些原子怎样构成分子以及分子怎样构成分子聚集体和具有一定功能的材料 (material) (包括生物材料如骨、毛发、细胞、肌肉等和非生物材料如金属、塑料、超导体等)。大气中的氧 (O₂)、氮 (N₂)、二氧化碳 (CO₂)、二氧化氮 (NO₂)、二氧化硫 (SO₂) 等都是独立运动、独立存在的分子。可以用它们的分子结构解释它们的性质。生物功能 (biological function) 指生物必需的 (essential) 生物分子 (biomolecule, 例如上面说的血红蛋白) 在正常生理过程中表现的作用。而生物效应 (biological effect) 指来自体外的某种物质 (或某种能量, 如紫外线) 与生物体相互作用时, 对生物体造成的局部或整体的影响。药物也好, 毒物也好, 大都是外来的物质。其中绝大部分不是生命必需的。但是它们对生物功能的影响所表现的生物效应可能有防治疾病的作用, 也可能引起毒性反应^①。生物效应由性质决定, 性质由结构决定, 结构由组成决定。这就是组成-结构-性质-效应关系。

例如: 一氧化碳中毒 (即煤气中毒) 的机理是因为一氧化碳 (carbon monoxide, CO) 可以与血红蛋白中的二价铁结合, 而排挤了氧的缘故。一个碳原子和一个氧原子组成的 CO 表现这种毒性, 而一个碳原子和两个氧原子组成的 CO₂ 不表现这种毒性。不同组成的碳的氧化物具有不同的结构和性质。前面讲过血红蛋白之所以能够运送氧, 就是因为氧分子结合在这个铁原子上, 被携带到全身各处。CO 的结构决定了它可以代替氧分子与血红蛋白铁结合, 使下面反应的平衡向右移动, 血红蛋白运送氧的功能降低, 于是造成缺氧:



把煤气中毒的人移到户外, 降低 CO 浓度增加 O₂ 的浓度, 又可以使平衡向左移动得到恢复。引申下去, 与煤气中毒类似, 氰化钾 (potassium cyanide, KCN) 是一个剧毒物质, 它是因为电离产生的氰离子 CN⁻ 具有类似 CO 的性质, 也能够和血红蛋白中的铁原子结合。实际上, O₂ (O—O), CN⁻ 和 CO 在结构上是相似的。这个例子说明 CO 之所以造成煤气中毒这种生物效应是因为它能够和血红蛋白里的铁原子结合的性质, 而这种性质是由 CO 的结构决定的。

有的情况不能只用分子结构来解释。大气中漂浮的微粒影响人体健康, 特别是在扬沙天气中。但是不同颗粒有不同的性质, 对人体的影响也各不相同。因为不仅要看颗粒里面含有什么分子和分子结构, 还要看微粒的结构。因为结构决定性质, 性质决定效应。在空气质量报告中有一项: 可吸入颗粒物。这是指尺寸小到可以被吸入呼吸道的颗粒。在一般情况下, 悬浮的可吸入颗

^① drug 这个字英文的意思既是药物又是毒物。按本质讲它们的正面和反面的作用都是外来物质引起的生物效应。

颗粒物到达呼吸道会引起炎症反应，所以在研究颗粒的化学结构和化学性质常常是非常重要的。例如：矽肺（silicosis） 进行爆破作业环境中，悬浮着爆破产生的矿石粉尘。如果粉尘来自硅酸盐（silicate）而未加防护，粉尘被吸入呼吸道，在肺部引起一系列病变，导致严重的一种职业病——矽肺。它是由粉碎生成的石英（quartz）或硅酸盐晶体的粉尘引起的肺部损伤。只有结晶型石英——二氧化硅（silicon dioxide, SiO_2 ）的一种晶体（见图 2-2）能够引起矽肺。而合成的二氧化硅和硅胶（silica gel）^①（图 2-3）就没有这种作用。

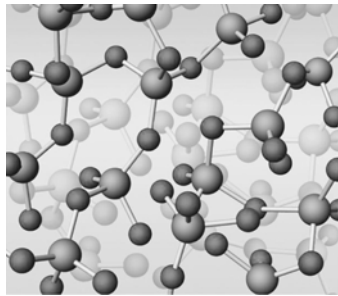


图 2-2 二氧化硅的四面体结构

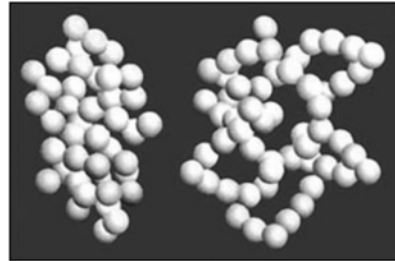


图 2-3 硅胶的结构

同样是一个硅原子与两个氧原子结合的 SiO_2 ，石英能够引起矽肺，硅胶就不能。这主要是石英晶体中， SiO_2 整齐排列，每一个 Si 原子在一个四面体中央，四个氧原子在四面体的顶点与 Si 原子共价结合，形成 (SiO_4) 结构单元。在大块的含 SiO_2 的岩石被粉碎时产生活性表面。它可以损伤细胞引起一系列变化。硅胶虽然也是 SiO_2 构成的，却是非晶态的微球连接成的网络结构。没有活性表面，这说明分子聚集方式也决定物质的性质和效应。

组成-结构-性质-效应/功能关系也是研究新药的最重要基础。20 世纪，化学疗法的出现和突飞猛进的发展使人类战胜了许多疾病。在这一时期不断推出的新药大都是先根据结构与功能的关系设计出许多结构不同但是相关的化合物，然后通过合成（synthesis）制备出来，再通过药理实验从里面筛选（screen）出有效的化合物来。针对这个化合物的不足的地方（比如毒性大、不容易吸收等等）再根据结构和性质的关系进一步设计新的化合物，再去做药理实验。如果幸运，在几轮反复改进后可以拿到一个能够在临床试用的候选药物。所以其中关键是要知道结构与性质和功能的关系。简单地说，组成决定结构，结构决定化学性质，化学性质再决定药理、毒理作用。化学的最根本、最核心的问题也就是研究和发现化学组成、结构、性质和功能（包括生物活性）之间的关系。

我们是从比较许多结构类似的化合物的性质中掌握结构-性质关系的。例如一个氢原子和一个氧原子结合成 $-\text{OH}$ 基。 $-\text{OH}$ 基仅仅是一个结构单元，决定它的性质还要看它和什么原子结合，如何结合。

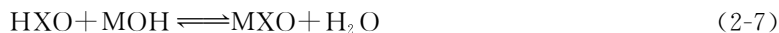
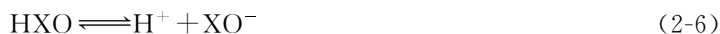
当 $-\text{OH}$ 结合在金属原子上，通过离子键形成金属氢氧化物，如 NaOH ， $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ，

^① 所谓硅胶指硅酸（实际上是和水结合的二氧化硅）从水溶液里析出时在网络结构中包含了太多水，成胶冻状。这种胶叫水凝胶。把它加热烘干除去水分之后变成的干胶就是硅胶。由于硅胶的多孔性以及它与水的结合能力，它被用做吸附剂和保干剂。在医药产品和食品中常用。

Al(OH)₃等等。在水溶液里它们都能够电离出氢氧离子 OH⁻，有中和酸的作用^①：



当-OH 结合在非金属原子上，通过氧原子与非金属原子共用电子形成非金属的含氧酸，如次氯酸 (hypochloric acid, HOCl)^②，亚硝酸 (nitrous acid, HO—NO)，硝酸 (nitric acid, HO—NO₂)。在这些含氧酸分子里的 HO 与非金属原子结合牢固，在水溶液里不能电离出 OH⁻ 离子而是电离出 H⁺ 离子，所以显酸性，能够与碱 (MOH=NaOH, KOH, NH₄OH 等) 中和：



而当-OH 根结合在碳原子上时构成有机化合物中的醇 (如甲醇和乙醇)。它们不能按照金属氢氧化物那样电离出 OH⁻ 离子，也基本上不能电离出 H⁺ 离子。只有结合在双键碳或芳香环上时才能够以酸的方式电离，例如维生素 C 和苯酚。

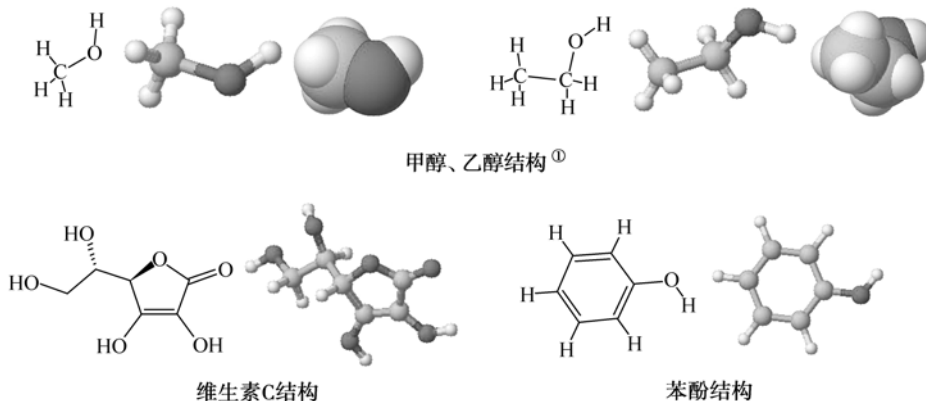


图 2-1 某些含羟基的有机物

同样是羟基-OH，和氢结合构成生物必需的水，和甲基结合变成有毒的甲醇；和双键碳结合又变成有酸性而且容易氧化的有机化合物。

性质和结构的关系是解决许多实际问题的通用工具。20 世纪是化学最辉煌的时期。在这一百多年里，化学造成的震撼效应无处不在。只要翻开 Nobel 奖获奖名单，就感觉到在衣食住行各个方面，化学所起的作用都是非常巨大的，可以说人类依靠化学创造了另外一个地球。许多不可能发生的事情在化学家手里成为可能。在这些事件里，化学家掌握性质和结构的关系，通过这个关系设计和创造了肥料、饲

^① 以后我们常常用通式来讨论问题。因为它反映了一类化合物的共性。在通式里，M 表示金属，X 表示非金属，HA 表示酸，A 表示酸根。在通式中忽略价态和电荷。

^② 按照规定含氧酸的化学式按照 H 在前，非金属原子在中间，氧在后的顺序，即 HClO。如果按照原子间连接关系，则应该是 HOCl。

料、塑料、药物、农药，等等。

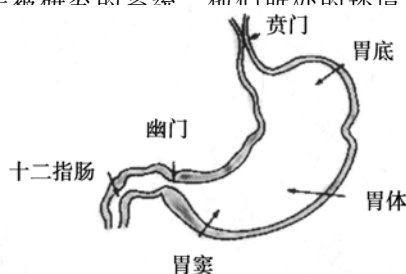
对于药物来说，除去和生物效应有关的性质之外，结晶形状 (crystal form)、比重 (specific gravity)、溶解度 (solubility) 等物理性质，以及它是不是容易分解，在空气里是不是容易氧化，是不是容易燃烧，是不是容易与酸、碱等化学物质起作用，见光是不是容易变化等所谓化学稳定性 (chemical stability) 十分重要。因为大气含有很多氧气，具有氧化能力，并且在不同气候条件下还含有不同量的水蒸气。因此，许多物质接触空气容易氧化，容易潮解，容易水解。维生素 C 就是因为容易在空气中氧化，所以要求做成包衣片。再如油脂和含油脂的制品 (包括一些药物) 长时间放在空气中会变哈喇 (酸败, rancid)，就是因为水解和氧化造成的。

实际上，化学这门学科的主题就是研究组成-结构-性质-功能/效应的关系。在后面的讨论中将贯彻这个主题。

2.3.2 系统和环境

研究任何问题都要规定研究的对象和对象所处的环境。在化学里所研究的对象是化学系统 (system) 或称体系，而把系统以外，与系统密切相关的其余部分当作环境 (surroundings)^②。而且系统和环境之间可以有，也可以没有物质和能的相互作用 (图 2-5)。理论上讲，在研究大气时，可以把 500km 以内的大气层以及它所包裹的地球当作系统，而把宇宙当作环境。例如上面讲的 Mayow 研究空气组成所做的实验。他如果不把钟形罩倒扣在燃烧的蜡烛上，这时燃烧的蜡烛和附近的空气构成系统，在这以外 (也可以说是整个宇宙) 都当作环境。但是，他的实验是把钟形罩倒扣在燃烧的蜡烛上，那么只有钟形罩内的空气和燃烧中的蜡烛构成系统，外面都当作环境。例如，维生素 C 片在开口瓶里容易变黄，因为空气中的氧把它氧化，和它们接触的空气是无限的，所以氧化要进行下去。如果把它放在塞紧的瓶子里，就不容易氧化，这个反应系统变成对瓶外的空气隔离。尽管如此，玻璃瓶没能切断能量 (特别是光) 的转移。后来改用棕色玻璃瓶就进一步提高稳定性，因为能够减少一部分光进入反应系统中来。现在已经改成用铝箔包装，不但接触的空气更少，而且基本上隔绝了光的照射。不过这样还不能隔绝热的传入，所以要求在较低温度下存储。

在上面的这些例子里把宇宙当作整个环境没有实际意义，所以当研究药片的反应时，药片是系统，瓶子里的空气当作是环境。如果研究装在瓶中的药片受瓶内的空气和外面的温度、光照等影响，连药片带瓶内的空气构成系统，瓶外是环境。研究在高压消毒锅中把器械或药物蒸煮灭菌时，器械、药物、锅内的水，空气和水蒸气以及微生物构成系统，灭菌锅把它们密封在高压高温的封闭系统中，而灭菌锅外是环境。人体也可以看作是一种系统，把周围构成环境。例如航天飞机里的人可以在宇宙环境中生存继续正常生命过程；把患者放在高压氧舱里进行治疗。如果把航天飞机里或高压氧舱里的人当作被研究的系统，他们所处的环境就是舱内的环境；如果连人带航天飞机当作系统，那么航天飞机所处的例子说明系统的划分不是固定的，要看研究的目的和范围，而实际上仅仅是宇宙的一部分。



① 表示分子结构的方法有球棍模型和平面式。球棍模型有表示原子的大小和空间相对位置

但是不符合成键原子间的距离。右面的图是根据原子半径画出来的，可以反映各个原子的实际接近程度。

② surroundings 和 environment 在中文都叫做环境，但是意义不同。作为名词的 surroundings 是复数的。

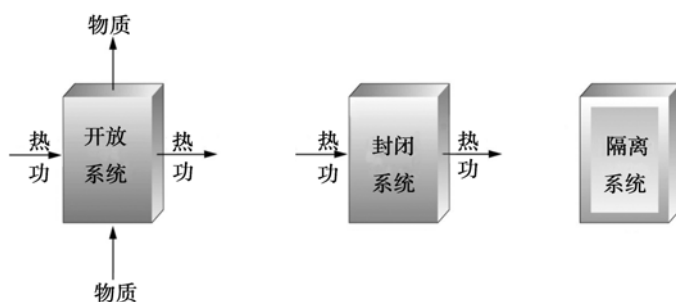


图 2-5 系统与环境

在系统与环境之间，有的有一个屏障 (barrier) 把它们分开，有的并没有。如研究胃内的变化时 (图 2-6)，就把上自贲门，下至幽门这一空间的内容物当作研究对象，它分别由贲门和幽门与食管和肠道相通，但是又通过开启和关闭使胃内容物成为一个化学系统。

因此，研究或描述一个化学系统，就要讲清几个特征：

1. 系统所包含的组分 (component) 例如，在制造碳酸氢钠注射液时，把溶液灌入安瓿并充入 CO_2 ，把安瓿封住，放在高压锅里热压灭菌。在碳酸氢钠水溶液里，没有加热之前，也因电离，同时有 CO_3^{2-} ， HCO_3^- ， H_2CO_3 (CO_2) 存在：

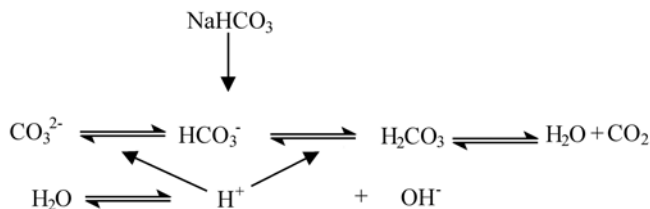


但是以 HCO_3^- 为主。按照平衡移动原理 (Le Chatelier's principle)，加热时，反应 (2-9) 向右移动而消耗溶液中的氢离子。 H^+ 浓度的下降又使反应 (2-8) 右移。这样相当于一个 HCO_3^- 电离产生的 H^+ 使得另外一个 HCO_3^- 变成 H_2CO_3 ($\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$)。即反应 (2-8) 和 (2-9) 相加，结果是 NaHCO_3 的分解 (什么样的化合物才能有这样的反应?)：



在封闭的安瓿里，在加热时反应向右进行， NaHCO_3 部分分解；但是因为 CO_2 跑不出去，所以恢复原来温度后，就应该慢慢回到原来平衡位置。这时我们的研究系统包括水、碳酸氢钠和安瓿里面的空气，这构成一个封闭系统。如果还要研究加热时安瓿的玻璃会不会与溶液起作用，则系统中还应该包括玻璃。

2. 系统内组分间的反应 在上面的例子中，主要反应是碳酸氢钠的分解，但还应考虑 HCO_3^- 和 CO_3^{2-} 离子的水解、 CO_2 的溶解与碳酸 H_2CO_3 的电离、水的电离等。这些反应相互联系，相互制约：



在一个系统中发生的反应都是相互影响、相互联系的。不过反应能不能发生以及进行到什么程度，还要看条件 (condition)。在大气中的氧和氮从根本来说应该能够化合生成氮的氧化物，

只不过因为在一般条件下反应速率太慢，所以不能觉察。前面讲过维生素 C 容易被空气氧化，这个反应进行得比较慢，但是在光照射和含有少量铜或铁等重金属时变快，所以用不透光的铝-塑料复合膜封装。

3. 溶液中存在的物种 (species) 物种指一种组分在溶液中存在的不同状态。碳酸氢钠水溶液中由于上面所说的反应，含有的物种有 Na^+ ， H^+ ， CO_3^{2-} ， HCO_3^- ， H_2CO_3 ， CO_2 和 OH^- 及大量的 H_2O 分子。在一个溶液中的每一物种，有多有少，各占多少份额 (百分数) 叫做物种分布 (speciation, distribution of species)。物种分布因化合物而异，并随条件改变。例如碳酸钠溶液中的物种和碳酸氢钠溶液中的物种按照种类来说完全相同，但物种分配比例不同。在碳酸氢钠溶液中的 CO_3^{2-} 比碳酸钠溶液中少， H^+ 浓度比碳酸钠溶液中多，而 OH^- 浓度比碳酸钠溶液中少。

4. 系统和环境之间的关系 系统与环境之间的关系指有没有物质和 (或) 能量的交换 (exchange)。都不能交换的系统叫孤立系统 (isolated system)，都能交换的叫开放系统 (open system)，不能交换物质但能交换能量的叫封闭系统 (closed system) (图 2-5)。放在烧杯里的碳酸氢钠溶液是在开放系统里，它对外界环境既有物质交换又有能量交换 (energy exchange)。封在玻璃安瓿里的碳酸氢钠溶液是在封闭系统里，它不能交换物质但是能够交换能量；如果再把它封在一个隔绝一切能量的容器里，就成为孤立系统。绝对的孤立系统在现实中是没有的。

5. 平衡状态 (equilibrium state) 和非平衡状态 (nonequilibrium state) 在讲大气时已经讨论过大气中既有氧，又有氮，它们之间有反应的可能，应该能够达到平衡，但是实际上没有达到平衡。这不仅因为反应进行太慢，还因为大气是开放系统。在上面提到，系统内发生由 A 变成 B 的反应 (相当于碳酸氢钠在水溶液中水解)，而反应是可逆反应 (reversible reaction) 时：



如果系统是封闭的，迟早要达到平衡 (equilibrium)。在平衡状态下， $[\text{B}] / [\text{A}]$ 浓度的比值维持不变，而且等于这个温度下的一个常数 (叫平衡常数 equilibrium constant)，关于这方面的详细讨论见第 8 章。碳酸氢钠注射液在封闭的安瓿内受热分解时，就可以达到这样的平衡。达到平衡时，溶液中 $[\text{CO}_3^{2-}] / [\text{HCO}_3^-]$ 比不再改变。如果系统是开放的，就不能达到平衡。那时， NaHCO_3 不断分解， CO_2 不断跑到空气中去， $[\text{CO}_3^{2-}] / [\text{HCO}_3^-]$ 比不断上升。这个体系一直建立不了平衡。[不过，这种变化不可能无限度地进行下去，到最后溶液中的水全都蒸发掉， NaHCO_3 基本上全都变成了 Na_2CO_3 。不过因为 Na_2CO_3 还与接触以还会多少含有少量的 NaHCO_3 (多少由什么决定?)

我们周围有很多貌似简单但是包含大学问的事物换水、喂食、通空气等。如果把鱼缸封死，使它成为不给空气，不喂食、不换水，是否这些鱼必死无疑呢？并不见得如此。20 多年前，有一种奇特的玩具——叫做“生物球 (biosphere)”的装饰品。这个玩具是和美国航天局的研究项目有关的一个小小模型。它是一个像鱼缸似的大玻璃球，装了四分之三的水，水底下有点细砂，长着一根布满绿色藻类的小树枝；水里游着 10

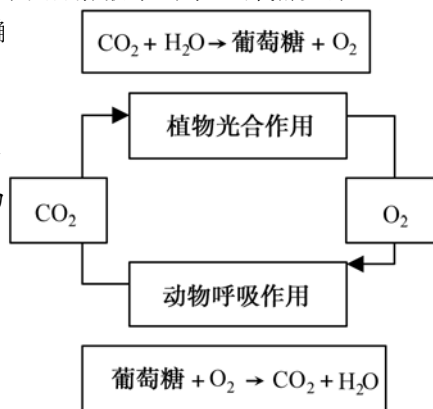


图 2-7 植物光合作用与动物呼吸的配合

来个小虾。这个鱼缸可以是全封闭的。你没有办法换水，没有办法去喂食，没有办法换空气，只有太阳光可以照进来。Westbroek 写道：“这个生物球放在我的窗台上已有两年了。那些虾米和藻类的生命在这样的环境中已经维持了 2 年，或许还能够再维持 10 年！”正像他写的：“It is a totally self-regenerating system, a little cosmos, budded off from the world at large.” 什么叫完全自我再生系统 (totally self-regenerating system)? 简单地说，水藻 (绿色植物) 通过光合作用把二氧化碳和水变成碳水化合物并且放出氧气；虾 (动物) 通过呼吸作用吸入植物产生的氧，同时植物产生的碳水化合物氧化，呼出二氧化碳供植物所用。这两方面互补成为一个“自给自足”的自我再生系统。(图 2-7)

1991 年进行了一个大型实验，叫做生物球 II (biosphere II) 计划。第一次把 8 个人“锁”到一个密封的 12 000 m² 的“微型世界”里。里面有海洋、丛林、沙漠、盐碱地和生物。目的是看一看人类和生物能不能在这样一个封闭空间里长期生存下去。虽然 2 年以后因为氧气含量每月下降 0.5% 等问题宣告失败，但还是说明大气-水-岩石-生物之间的互补的作用可以维持一个较长时期的生命活动。当然它的失败也引发了许多耐人思考的问题。只有氧和二氧化碳是不是就能够满足生物生存的需要？空气中的氮在维持生物生命中起什么作用？如果只是这个循环，土壤起什么作用？能量在这里面如何转化？如果我把生物球放在阳光充足的地方或者阴暗的地方会发生什么结果？

2.4 化学工作的基本方法——实验方法和理论方法

2.4.1 实验方法

化学和其它自然科学一样，需要实验研究与理论相结合。在研究一个对象时，要用实验方法去确定它们的组成和结构，要用实验方法研究它们的物理性质和化学性质，确定它们的变化过程。如果要研究药物，还要用实验方法研究它的什么性质同它的疗效、毒性有关。上面说的结构-性质-效应三者的关系就是靠实验测定的。

实验 (experiment) 与试验 (test) 不同。试验是实验工作的一部分。其目的是测试一个对象 (如空气、水、血液等等) 是否具有某种性质 (例如酸碱性) 和某种作用 (这也包括用药理试验试一下某种化合物可否用于治疗某种疾病，用临床试验方法检查病人血或尿中是否有某种代谢异常物质等)。至于实验工作则是在实验室里创造实验体系，改变环境，研究各种变化，包括反应的机理、反应的快慢和进度，如何受环境影响，也研究这个体系内部各个组分间的作用，体系内的某一物质与环境中的某一物质的作用以及所引起的体系和环境的变化。

有许多情况必须依靠在实验室里做实验来解决。例如：

(1) 条件实验 (condition experiment) 研究对象与环境的相互作用常常有很多影响条件。例如放在药瓶中的药片的稳定性可能受温度、光照、湿度等的影响。在实验室里就可以把所有条件维持不变，只改变一个条件，测定药物的稳定性。

(2) 模拟实验 (simulation experiment) 例如要研究某种药物在胃液中的存在状态与胃液中各因素的关系时，不可能把药吞到胃里去，再抽出胃液来分析。实际上是按胃液的组成，配成人工胃液，并改变要试的某一条件 (如改变 pH 值)，把待试的药放在里面，研究它的变化和存在状态。

(3) 极端条件 (extreme condition) 下进行的实验 例如要研究在不同高压下空气成分在人

的血液中的溶解度，只需要用人工建立不同压力来测定。高温、高压、核辐射等极端条件对研究对象的影响都需要在实验室里研究。

(4) 加速实验 (acceleration experiment) 要测定食品、药物等的保存期或有效期，不可能在一般条件下在几年中连续测定。可以根据温度越高反应速率越快的基本原理，把它们放在较高温度下测定浓度和含量变化，推出变化速率，然后再推出室温下的稳定时间。

(5) 组成和结构测定 不只对在实验室里制备出来的化学物质要进行组成和结构测定，对自然界以及人体内存在的各种各样化学物质和材料也都需要做组成分析和结构分析，对生产用的原料、生产过程中的中间产物以及最后产品都要分析。还有许多药理或毒理实验结果也是通过组成分析。当我们要研究大气的组成时，只要取出一小部分有代表性的样本，在实验室里测定。测定物质的结构，比如测定骨骼里的矿物的结构，也是从研究对象中取出一点样本，除掉所含的有机基质，只留下矿物质，进行测定。

在实验工作中，正确的实验设计，严格的实验操作，客观地观察现象和准确地取得数据（而且经常要用多种手段取得数据），选择合适的方法处理数据（而且要考察不同手段取得的数据是否相互印证），加上合理地运用已有的概念和理论，才能得到合乎实际的结论。

2.4.2 理论方法

虽然所有化学研究都以实验为基础，但都离不开用理论方法去分析实验结果，总结规律，并且上升到理论上加以解释。实验结果是现象，只有经过理论处理才能了解本质。

理论处理有不同途径，可达到不同目的：

(1) 对实验数据进行数学处理，得到经验规律 (empirical law) 例如以前讲过的反应速率与温度的关系，Boyle 定律，Charles 定律，质量作用定律，以及今后常常遇到的药物的疗效或毒性与剂量的关系，药物代谢速率等等，它们都是实验结果的数学表达。

(2) 对实验结果进行理论分析 有时虽然以实验结果为依据，但不是由实验结果直接总结出来的，而是经过推理得出表达某种关系的所谓数学模型 (mathematical model)。像在解决原子结构的过程中，Bohr 所总结的电子轨道能量数学式就是参照实验通过推理得出来的。这种处理比上面的处理更深入，可以探索事物的本质。

(3) 对客观反应体系的理论模拟 例如用计算机可以模拟一种有毒金属进到血液中去以后，它以什么形式存在，它对血液中各种成分有什么影响等。

(4) 真实体系 (real system) 理想化 (idealized) 研究 最典型的例子是大家熟悉的 Boyle 定律、Charles 定律和由它们推出的理想气体状态方程 ($PV=nRT$)。这个关系只对理想气体 (ideal gas) 有效，即假定分子间没有相互作用（不论物理的还是化学的）和气体分子本身没有体积。现实的气体中，分子都有相互作用，叫真实气体 (real gas)，只有气体无限稀薄（压强接近零）时才接近这种状态，但是到这种状态时就很难测定了。因此它是靠把实验结果外推得到的。

(5) 微观结构模型的建立 微观结构 (microscopic structure) 是指原子结构和分子结构。目前，我们还不能直接测定微观结构以及与微观结构有关的参数。最突出的例子反映在解释原子结构的模型，从最早认为电子按一定轨道围绕原子核旋转（类似太阳系），到 Bohr 轨道模型，到量子力学模型。既然是模型，它就只能是描述实际情况的一种人为的方式，而不是实际存在。

(6) 从元素的原子结构推测分子结构，由分子结构推测理化性质，推测生物活性。这是现代药物分子设计的基本方法之一。

初学化学虽然不会涉及到很深的理论，但不断地遇到这些方法，一方面要充分认识到理论要以实验为基础，一方面要充分认识到理论方法的各种局限性。比如，大家可能要遇到许多化学计

算，实际上有许多计算与实际情况存在诸多差距，因为有很多数学关系是在某一限定条件下才是准确的。所以，必须注意每一个理论和它的表达适用于什么体系，注意它们的前提和条件。下面我们就要讲到 Bohr 的原子结构理论是根据氢原子光谱推出来的，他的结论和数学表达式为氢光谱证明，但是不久另一位科学家 Schrödinger 就是从氢原子结构不能代表其它原子结构这个问题出发，发展成为新的原子结构模型的。

习 题

1. 氢原子核的半径等于 $1.0 \times 10^{-2} \text{ pm}$ ，质量为 $1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ 。原子核的密度等于多少（按 $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ）？怎样解释氢气的密度与氢原子核的密度的差别？
2. 铁的原子半径为 $1.26 \times 10^{-8} \text{ cm}$ ；相对原子质量（后面简称原子量）为 55.8。作为相对原子质量的标准，1 相当于 $1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ 。
 - (1) 计算铁的原子体积（用 cm^3 表示）
 - (2) 计算铁原子的密度（用 $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 表示）
 - (3) 一般条件下，铁的密度等于 $7.86 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。与上面计算出来的铁原子的密度比较有无差别？为什么有差别？
3. 某患者的血液中含总蛋白质量为 $7.4 \text{ g} \cdot \text{dl}^{-1}$ 相当于每 1 ml 含有多少毫克蛋白质？
4. $2.57 \text{ g Pb}(\text{NO}_3)_2$ 与 2.28 g KI 反应能够生成多少 PbI_2 ？能够得到的 PbI_2 沉淀的量与它相比有何差别？（已知原子量：Pb=207.2, I=126.90, N=14.01, O=16.00, K=39.10）。
5. 用碳还原 $1.25 \text{ mol Fe}_2\text{O}_3$ ，如果碳只被氧化到 CO，能够得到多少克的铁？
6. 配制 $250.0 \text{ ml } 0.240 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ CaCl}_2$ 溶液需要多少克的 CaCl_2 ？
7. 下列物质中哪些是单质？哪些是化合物？哪些是混合物？
 - (1) 矿泉水
 - (2) 自来水
 - (3) 双氧水
 - (4) 生理盐水
 - (5) 臭氧
 - (6) 金刚石
 - (7) 盐酸
8. 溶液浓度常用单位体积溶液中所含溶质的量来表示。体积单位可以是升 (liter, L)、毫升 (milliliter, ml) 等等。溶质的量最常用摩尔 (mole, 简称为 mol) 毫摩尔 (millimol, mmol) 单位表示，但是也可以用其它单位表示，看哪一种方便、适用。长期以来用 $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 表示的浓度被称为摩尔浓度 (molarity)，并用 M 代替 $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 作为单位符号。目前按照国内颁布执行的标准单位制，废除摩尔浓度名称，1M 的盐酸都应该表示为 $1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。但是国际上两种表示方法都在通用。因此需要熟悉这两种方法的关系。
 - (1) 0.001 M 相当于 _____ $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 或 _____ $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$
 - (2) 1.00 L 溶液中含有 1.00 g 溶质，如果溶质的分子量为 100，溶液的浓度是 _____ $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。
 - (3) 把 10 ml 浓度为 $0.1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 葡萄糖溶液用纯水稀释成为 1 L ，浓度是 _____ $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。
9. 关于分压定律
下面的实验是在温度一定的条件下进行的。如果我有一个容器，把它抽成真空，再往里面通入 n_A 摩尔气体 A，测得压力是 p_A 。仍然用这个容器，装进 n_B 摩尔气体 B。测得压力是 p_B 。如果在这个容器中通入含有 n_A 摩尔 A 和 n_B 摩尔 B 的混合气体，而且温度相同的话，混合气体的压力 p 与 p_A 和 p_B 有什么关系？与 n_A 和 n_B 有什么关系？怎样表示分压定律？
10. 关于 Henry 定律。
在一定温度下，在混合气体中一个气体成分 X 在水里的溶解度 s （按照 $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 单位表

示) 与其分压力成正比:

$$s = K_H p_x$$

这个关系以他的发现人命名, 称为 Henry 定律。 K_H 称为 Henry 系数。

(1) 如何用数学式表示在大气压力变动对于空气中的二氧化碳在水中的浓度中的 K_H ?

(2) 在一定温度一定压力下, 气体混合物中各气体在溶液中的浓度与各自的分压有什么数学关系?

11. 一种药物可能会分解产生醋酸。设计一组实验确定光照和温度对于分解速率的影响。注意实验条件和测定方法。