

绪论

一、什么叫物理化学（学科概念）

- 科学研究领域的区分，主要是根据研究对象的特殊性来确定的。物理化学的研究对象是化学现象中的某些普遍规律，属于化学学科范畴。

- 从哲学高度看，任何较高级（复杂）的运动形式都包含相对较低级（简单）的运动形式。在物理、化学、生物、社会运动形式中，后者总是包含前者，即任何的化学反应总是伴随着某些物理过程。
- 需要指出的是上述提到的“复杂”与“简单”是指运动形式之别，并非各学科的高低、难易之分。

例如：

■ 发生一化学反应时，总有热量的吸收或放出：



1500°C 部分吸热分解；

■ 电池中电极和电解液之间进行的氧化还原反应伴随着电流的产生；

- 双原子分子分解反应发生的必要条件是：
两个原子之间的 **振动能** 超过一定限度时，
化学键才能断裂；
- 两种物质之间的化学反应，通常必须经过两种物质分子之间的 **碰撞** 才能发生。
- 这种例子还很多，化学现象和物理现象总是紧密地联系着的。

“物理化学”定义

义

- 物理化学是研究化学现象和物理现象之间的相互联系，用物理手段（如：热、功、压力、温度等的测量）来研究化学现象，以便找出化学过程中某些最具普遍性的一般规律的科学。

二、目的与意义

- 物理化学学科的产生与发展是为了解决生产实践和科学实验中对化学现象提出的一些理论问题，从而在理论上指导人们更好地利用化学反应来造福人类。

哪些理论问题呢？主要有以下三个方面：

- 化学反应的方向和限度问题；
- 化学反应进行的速度和机理问题；
- 物质的性质与其结构之间的关系问题。

1. 化学反应的方向和限度

- 在给定条件下，一个化学反应能否自发进行，向什么方向进行，进行到什么程度就不能进行了？外界条件对反应的方向和平衡的位置有什么影响等等。
- 这些问题的研究，属于物理化学的一个分支——**化学热力学**（上册的主要内容）

2. 化学反应进行的速度和机理

- 化学反应的速度有多快，反应过程究竟是如何进行的（即反应的机理），外界条件（如浓度、温度、催化剂等）对反应速度、机理有何影响，如何控制反应的进行（快、慢控制）。
- 这些问题的研究，属于物理化学的另一个分支——**化学动力学**（在下册）。

- 下册内容中的**电化学**部分就是运用化学热力学、动力学来研究**化学电极反应与电现象**（如电动势、电流）之间的关系。

3. 物质的性质与其结构之间的关系

- 现代科学技术的发展要求化学（合成）能提供具有特殊性能的材料，如耐高温、高压材料；耐腐蚀材料；如超导材料、纳米材料。
- 这就需要人们根据**物质结构**的知识，在合成所需性能的新材料方面提供方向和线索；

- 要了解化学热力学和动力学的本质问题，必须了解物质的内部结构，这些问题的研究是物理化学的另一分支——**物质结构**。
- 以上这些问题的研究和解决，是实现化学、化工新工艺的理论基础；物理化学的研究成果，对现代基本化学工业的整个生产过程的建立，起到重要的作用。

例如：

- 在接触法制备硫酸；氨的合成和氧化；有机合成工业；化学纤维工业；合成橡胶工业；冶金、石油、建材、农药生产等中，物理化学研究成果起到重要的作用。
- 当然，生产实际往往比较复杂，它需要物理、化学、化工以及其他学科知识的综合运用。

- 物理化学课程通常又有所谓“大物化”、“小物化”之分。

“大物化” — 包括物质结构的内容，其中又包括量子化学等理论化学。

“小物化” — 不包括物质结构（本课程）。

三、物理化学与其他化学课程的联系

- 所谓“四大化学”（无机、有机、分析、物化），它们均有各自的特殊研究对象和目的。
- **物理化学**是研究化学过程中普遍性的更本质的内在规律性，无机化学、有机化学和分析化学在解决具体问题时，常常需利用物理化学知识和方法。

- **例如：** 在无机化学中涉及的 “电子云”、“化学键” 的概念，化学反应 “平衡常数” 的概念等。
- **物理化学** 所研究的具体对象包含无机或有机体系，也需运用有关分析化学的知识。因此，物理化学与其他三大化学课程有密切联系。

四、物理化学发展概况

- 物理化学学科从19世纪初发展至今仍然相当活跃。国际、国内有关物理化学的期刊也很多。例如：J. Phys. Chem.；化学物理学报（科大3系）等。
- **化学热力学**（上册）部分其数学逻辑性较强，发展至今已比较成熟（指平衡态热力学，而不包括非平衡态热力学。）

- **化学动力学**（下册）的研究仍处于发展阶段，比较活跃。（通常是对某类反应体系的个别研究，系统理论尚未成熟。）
- **物质结构** 研究方面，大型计算机的运用为天文数字量的量子计算、计算机模拟等提供有力工具，发展也很活跃。

五、涉及相关研究领域的一些较有影响的机构

- **理论化学（量子化学）**：吉林大学（唐敖庆）；北京大学（徐光宪）；北师大、上海冶金所、复旦大学等。
- **反应动力学**：中科院化学所（朱起鹤）、大连化物所（何国钟）等。
- **电化学**：武汉大学（查全性），厦门大学（田昭武），南京大学（高鸿），北京大学（高小霞）等。

六、化学物理系部分实验室

■ 单分子化学物理（选键化学实验室）

- ◆ 用激光和扫描隧道显微 (STM) 技术等实验技术对单原子、单分子和单细胞进行直接操纵，并利用这些手段研究化学、物理和生物的某些领域的基本问题，最终实现选键化学、分子和细胞的加工。

■ 激光化学实验室

- 1) 分子和自由基的高分辨电子态光谱研究；
- 2) 微观化学反应动力学研究；
- 3) 激光控制化学反应的探索性研究。

■ 理论化学、结构化学实验室（量子化学）

■ 低维化学物理（表面与催化实验室）

■ 胶体电化学实验室

七、物理化学的研究方法

1. 一般实验科学研究的方法

- 首先观察现象，或在一定条件下重现自然现象 — 实验，从大量的实际、实验事实，总结出它的**规律性**，再以一定的形式表达出来 — **定律**。

- 为解释这种定律的内在的本质，需根据已知的实验事实和实际知识，通过抽象思维，提出**假说**和**数学模型**（这需有物质结构方面的知识）；
- 再根据假说作逻辑推理，以说明这种规律性存在的原因，甚至可以预测客观事物新的现象和规律。

- 若这种预测能为多方面的实践所证实，则这种假说就成为理论或学说。物理化学中的许多理论模型就是这样得到的。

2. 理论的修正、新理论的建立

- 随着观测实验范围的扩大（例如从宏观到微观，从宏观到宇宙空间）、实验技术的改进（检测灵敏度的提高），又会有新的现象出现（被观测到）、新的问题提出。

- 当新的事实与原先旧有的理论发生矛盾，即不能为旧理论所解释时，就必须修正旧理论，甚至抛弃旧理论而重新建立新理论。如此，人们对客观世界的认识又深了一步。
- **例如：**从牛顿力学 → 量子力学，即宏观到微观的发展。

3. 充分重视实验事实

- 在物理化学研究中，由于其研究对象的特殊性（化学现象），所以应当充分重视实验事实的重要性。

- **例如**，在化学平衡规律的研究、物质性质与外界条件的关系、各种物理化学常数的测定等，除常用的化学方法以外，更多采用物理手段（例如电磁学、光学等方法）进行实验测试。

4. 物理化学的研究方法基础

- 在物理化学中，从“基本假设 → 逻辑性推理 → 符合客观实际的理论”过程是建立在“**理论物理**”方法的基础上的，这些方法是：
 - ◆ **热力学方法**
 - ◆ **统计力学方法**
 - ◆ **量子力学方法**

- 本课程主要应用了热力学方法和统计力学方法，至于量子力学方法，主要在物质结构部分（本课程不包括）涉及。

八、课程的基本内容

- 物理化学的内容非常广泛, 有些分支实际上已发展成为独立的学科。例如: 化学热力学、反应动力学、胶体化学、表面化学、电化学等等。本课程只把它们作为某些章节进行初步介绍。
- 上册中主要侧重于化学热力学, 包括热力学三大定律, 以及在溶液、相变平衡、化学平衡中的应用, 还有统计热力学。

- 热力学发展至今已比较成熟，整个体系的逻辑性很强，因此各章的内容承前启后联系紧密。希望同学们在学习时一开始就注意及时理解和消化。
- 其次，为加深对概念的理解和公式的正确运用，还有一定量的习题，希望大家独立思考加以完成