

物理化学(含结构化学)考试大纲

本考试大纲包括物理化学和结构化学两部分内容。

物理化学部分考核知识点及要求：

一、气体

1. 了解理想气体的微观模型，熟练使用理想气体状态方程
2. 了解分子速度和能量分布公式的推导及物理意义
3. 了解实际气体状态方程及对实际气体的计算

二、热力学第一定律

1. 了解热力学的一些基本概念，如系统，环境，功，热，状态函数，变化过程和途径等
2. 明确准静态过程和可逆过程的意义
3. 明确热力学第一定律和热力学能的概念，熟知热和功的意义和符号
4. 熟练应用热力学第一定律计算理想气体在简单过程中的 ΔU ， ΔH ， Q ， W
5. 理解化学反应等压热效应与等容热效应，反应进度等基本概念
6. 掌握化合物标准摩尔生成焓，离子生成焓，键焓和燃烧焓等概念，并熟练其相关计算
7. 会应用 Hess 定律和 Kirchhoff 定律

三、热力学第二定律

1. 明确热力学第二定律的意义，掌握热力学第二定律与卡诺定理的联系，理解克劳修斯不等式与熵增加原理
2. 掌握熵的概念，及亥姆霍兹自由能和吉布斯自由能的定义，了解其物理意义
3. 了解热力学第二定律的本质和熵的统计意义
4. 熟练计算一些简单过程中的 ΔS ， ΔH ， ΔA ， ΔG ，会设计可逆过程
5. 会运用 Gibbs-Helmholtz 公式
6. 掌握几个热力学函数间的关系
7. 掌握热力学第三定律与规定熵

四、多组分系统热力学及其在溶液中的应用

1. 掌握偏摩尔量和化学势定义，了解多组分系统中引入它们的意义

2. 熟悉多组分溶液组成的表示法及其相互关系
3. 掌握稀溶液中的两个经验定律的使用
4. 掌握混合气体（理想和非理想气体）中各组分的化学势的表示法，及逸度的概念
5. 掌握理想液态混合物的通性和化学势的表示法
6. 熟悉理想稀溶液化学势及稀溶液的依数性，及其相关计算
7. 了解吉布斯-杜亥姆公式和杜亥姆-马居尔公式
8. 了解非理想溶液中各组分的化学势的表示法，及相对活度的概念

五、相平衡

1. 了解相、组分数和自由度等基本概念，掌握相律的有关计算
2. 了解单组分系统的相图
3. 掌握 Clapeyron 方程和 Clausius-Clapeyron 方程的意义及相关计算
4. 了解二组分系统的相图及其应用
5. 掌握杠杆规则的适用范围，及其相关计算
6. 了解三组分系统的相图及其应用

六、化学平衡

1. 了解化学反应的平衡条件和化学反应的亲和势
2. 了解化学反应的平衡常数和等温方程式
3. 掌握平衡常数的表示式及相关计算
4. 掌握平衡转化率的计算
5. 理解标准生成吉布斯自由能的意义，掌握其相关计算
6. 掌握温度、压力及惰性气体对化学平衡的影响
7. 了解反应的耦合和同时化学平衡

七、电解质溶液

1. 掌握电化学的基本概念和法拉第定律
2. 掌握离子的电迁移和迁移数的定义，及相关计算
3. 掌握电解质溶液的电导率、摩尔电导率意义及它们与溶液浓度关系
4. 掌握电解质的平均活度和平均活度因子的意义及计算方法
5. 掌握离子强度和德拜-休克尔极限公式，并会计算离子强度
6. 了解强电解质溶液的离子互吸理论基本内容及使用范围

八、可逆电池的电动势及其应用

1. 掌握形成可逆电池的必要条件及可逆电极的类型
2. 了解电动势的测定原理和方法
3. 掌握可逆电池的书写方法及电动势的取号，能熟练写出电极反应和电池反应
4. 掌握可逆电池热力学的相关计算
5. 了解电动势产生的机理
6. 熟悉电动势测定的主要应用，会从可逆电池测定数据计算平均活度因子，解离平衡常数等
7. 掌握浓差电池和液体接界电势的计算公式

九、电解与极化作用

1. 掌握分解电压的意义及有关计算
2. 掌握极化作用的意义，超电势和极化曲线
3. 掌握电解时电极上发生反应的相关计算
4. 了解金属的电化学腐蚀、防腐与金属的钝化
5. 了解化学电源

十、化学动力学基础（一）

1. 掌握宏观动力学中的一些基本概念，如化学反应速率表示法，基元反应，反应级数，反应分子数等
2. 掌握具有简单级数反应（零级，一级和二级）的特点，及计算速率常数、半衰期等
3. 了解对峙反应，平行反应和连续反应的特点
4. 掌握 Arrhenius 经验式的各种表示形式，及活化能的求算方法
5. 掌握活化能 E_a 对反应速率的影响
6. 了解链反应，了解稳态近似，平衡假设和速控步等近似方法。

十一、化学动力学基础（二）

1. 了解碰撞理论、过渡态理论和单分子反应理论采用的模型，初步了解推导过程中引进的假定，及理论的优缺点。
2. 掌握碰撞理论和过渡态理论计算速率常数的公式。
3. 了解溶液中反应的特点和溶剂对反应的影响
4. 了解光化学反应的基本定律，光化学平衡，了解量子产率的计算

5. 了解催化反应的特点
6. 了解快速反应所常用的测试方法及驰豫时间概念

十二、界面现象

1. 了解表面吉布斯自由能、表面张力的概念，了解弯曲表面的附加压力产生的原因及与曲率半径的关系，即 Young-Laplace 公式
2. 了解弯曲表面上的蒸气压与平面相比有何不同，即 Kelvin 公式，了解 Gibbs 吸附等温式的表示形式，各项的物理意义
3. 了解液-液、液-固界面的铺展与润湿情况，了解气-固表面的吸附等温线的主要类型
4. 了解表明活性剂及其应用

十三、胶体分散系统和大分子溶液

1. 了解胶体分散系统的基本特性
2. 了解胶体分散系统在动力性质、光学性质、电学性质等方面的特点
3. 了解溶胶在稳定性方面的特点及电解质对溶胶稳定性影响
4. 了解乳状液的基本概念及应用
5. 了解大分子溶液的界定

结构化学部分考核知识点及要求：

一、量子力学基础知识

1. 掌握 Plank “能量子”的意义，理解 Einstein 光子学说
2. 了解实物微粒的波粒二象性，掌握德布罗意关系式，理解不确定关系 Δx , Δp 所代表的意义
3. 理解波函数的正交归一性，掌握波函数条件
4. 理解薛定谔方程所代表的物理意义，理解并掌握算符的概念和性质
5. 掌握一维势箱粒子运动求解方程的过程和方法，了解对求解结果物理意义的分析和说明

二、原子的结构和性质

1. 理解定核近似模型的提出假设
2. 了解单电子原子薛定谔方程及其求解过程

3. 理解量子数 n , l , m 的物理意义
4. 掌握波函数电子云的图形表示及其物理意义
5. 了解多电子原子的薛定谔方程及其近似求解过程, 了解单电子原子轨道能和电子结合能
6. 掌握 Pauli 原理和 Hund 规则
7. 了解通过电子壳层结构解释元素化学性质的周期变化性及一些元素的性质
8. 掌握光谱项, 光谱支项, 基谱项的求解

三、共价键和双原子分子的结构化学

1. 了解化学键的定义和类型
2. 理解线性变分法, 了解对 H_2^+ 的处理步骤
3. 理解共价键本质
4. 理解分子轨道理论, 掌握简单的双原子分子的电子组态, 了解分子轨道与化学键的联系区别
5. 理解价键理论, 掌握价键理论对简单分子构型的讨论, 理解价键理论与分子轨道理论比较
6. 了解分子光谱, Raman 光谱和分子的电子光谱

四、分子的对称性

1. 理解分子结构与性质的关系
2. 掌握对称操作和对称元素的概念, 理解其相互关系, 掌握分子对称操作的分类
3. 掌握分子点群的分类, 掌握典型分子的点群结构
4. 掌握群的表示, 理解群的性质
5. 理解点群与分子旋光性的关系和点群与分子的偶极矩关系, 掌握利用分子对称性判断分子偶极矩和旋光性的方法

五、多原子分子的结构和性质

1. 理解并掌握杂化轨道理论,
2. 理解 HMO 法及其对共轭分子的处理
3. 了解离域 π 键和共轭效应
4. 了解缺电子多中心键和硼烷的结构
5. 了解非金属元素的结构特征

6.掌握共价键的键长和键能的求解

六、配位场理论和络合物结构

1. 配位场理论
2. $\sigma - \pi$ 配建与有关配位化合物的结构和性质
3. 了解过度金属簇合物的结构
4. 掌握物质的磁性及其在结构化学中的应用，理解磁性共振谱，掌握核磁矩，化学位移的计算，理解核的自旋-自旋耦合作用

七、晶体的点阵结构和晶体的性质

1. 掌握点阵和点阵结构，理解点阵和平移对称的概念
2. 理解空间点阵的划分，空间格子，14种空间点阵式及其特点，掌握晶面指标表示
3. 了解晶体的结构和性质，理解晶体结构的描述，了解晶体缺陷对性质的影响
4. 理解晶体的衍射，掌握晶体的衍射与晶体结构的关系，掌握晶胞参数的计算

八、金属的结构和性质

1. 了解金属键和金属的一般性质
2. 掌握球形原子的密堆积，掌握典型密堆积的几何特点，掌握堆积系数的计算
3. 了解金属单质的结构
4. 了解合金的结构和性质
5. 了解固体的表面结构和性质