

•专题•

doi: 10.3866/PKU.DXHX202303058

www.dxhx.pku.edu.cn

Atkins物理化学第11版英文教材介绍

侯文华^{1,*}, 张树永²¹ 南京大学化学化工学院, 南京 210023² 山东大学化学与化工学院, 济南 250100

摘要: 从编写指导思想、主要内容、章节编排、主要特色、存在的不足等多个维度, 对国际著名的Atkins物理化学第11版英文教材进行了较为全面的介绍, 对国内物理化学教材建设具有一定的启示和借鉴作用, 也有利于国内物理化学相关课程师生了解、学习和使用该教材。

关键词: Atkins物理化学第11版; 物理化学教材; 介绍; 教材建设

中图分类号: G64; O642.1

An Introduction to *Atkins' Physical Chemistry* (11th Edition)

Wenhua Hou^{1,*}, Shuyong Zhang²¹ School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University, Nanjing 210023, China² School of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China.

Abstract: The *Atkins' Physical Chemistry* (11th edition) is comprehensively introduced from several aspects including guiding principles of textbook compilation, main contents, chapter and section arrangements, main features, and some shortcomings. It can provide certain revelation and reference for the construction of domestic physical chemistry textbooks, and is also helpful for the teachers and students in the physical chemistry related courses to understand, study and use this book.

Key Words: *Atkins' Physical Chemistry* (11th edition); Physical chemistry textbook; Introduction; Textbook construction

由英国牛津大学Peter Atkins教授领衔编写的*Atkins' Physical Chemistry*教材是一本经久不衰的畅销书; 该书自1978年出版第1版以来, 不断修订完善(第10版, 2014年; 第9版, 2009年; 第8版, 2006年; 第7版, 2002年; 第6版, 1998年; 第5版, 1994年; 第4版, 1990年; 第3版, 1986年; 第2版, 1982年), 内容和形式等不断推陈出新、与时俱进, 至今已经修订至第11版^[1], 被国内外许多高校选为物理化学教学的指定教材或者参考书, 可见其旺盛的活力和广泛的影响。本文对由英国牛津大学Peter Atkins、美国Lewis和Clark学院Julio de Paula和英国剑桥大学的James Keeler三位教授编写的*Atkins' Physical Chemistry* (第11版) (牛津大学出版社, 2018年)进行较全面的介绍, 以期对我国未来的物理化学教材建设提供一些借鉴。

收稿: 2023-03-17; 录用: 2023-03-27; 网络发表: 2023-03-29

*通讯作者, Email: whou@nju.edu.cn

基金资助: 教育部2022年高等教育中外教材比较研究重点项目(化学类专业核心课程教材国内外对比研究)

1 修订指导思想

根据前言,作者修订本版教材时的指导思想主要包括:(1)读者爱看、教师喜用;既有一定的深度和广度,又更强调基础和核心,避免曲高和寡,可更好地满足不同使用者的需求;(2)既可以先宏观,后微观;也可以先微观,后宏观;中间以统计作为过渡;(3)必要的数理知识是物理化学课程中不可或缺的,但不能冲淡物理化学的主题,更不能让读者望而生畏;(4)强调解题和培养逻辑思维在物理化学课程中的重要性;(5)适当反映学科发展的前沿。

2 主要内容、章节编排和结构设置

全书共908页。从该书的简要目录可以看出,全书除了绪言(能量、温度和化学)、资源部分(常用积分、单位、数据、特征标表)和索引外,共设有19个主题(focus),分别是1 气体的性质、2 第一定律、3 第二和第三定律、4 纯物质的物理转变、5 简单混合物、6 化学平衡、7 量子理论、8 原子的结构和光谱、9 分子结构、10 分子对称性、11 分子光谱学、12 磁共振、13 统计热力学、14 分子相互作用、15 固体、16 运动中的分子、17 化学动力学、18 反应动态学、19 固体表面上的过程。其中,主题1-6、13和16-19主要是国内常见的“小”物理化学教材的教学内容,而主题7-12、14和15则主要是国内结构化学的教学内容。该教材是一本典型的“大”物理化学教材。

从该书的完整目录来看,每个主题下设有若干专题(topic),以英文大写字母按序编号。例如,在主题1气体的性质下设有三个专题,分别是专题1A完美气体、1B气体动理论模型和1C实际气体。在每个专题下,又设有若干小节。例如,在专题1A完美气体下,设有“状态变量”和“状态方程”两小节内容;而在专题1C实际气体下,设有“与完美行为的偏离”和“范德华方程”两小节内容。

此外,在每个专题的结尾,给出了该专题中的重要概念和公式的总结清单(Checklist of concepts, Checklist of equations),便于读者复习回顾。每个主题之后,会以专题为单位给出大量题目,题目类型有讨论题(Discussion questions)、习题(Exercises)和问题(Problems),最后是跨多个专题的综合题(Integrated activities)。

3 本书的一些主要特色

3.1 结构和编排

在结构方面,在全书的绪言中,开门见山地强调了能量、温度以及热力学、量子力学和玻尔兹曼分布在化学中的重要性。不同于传统教材按照三级学科和学科方向安排章节,本书内容主要通过主题和专题的形式来呈现。每个专题都有一定的独立性,多个专题组合成一个主题,力求做到专题独立性和主题整体性的平衡和统一。为了保持各个专题的相对独立性,书中概念和公式清单以及讨论题、练习题和问题也都是按照专题来设置的。由于专题的独立性,便于教师自由组织教学内容,有很大的灵活性。在每个主题的首页,给出了该主题和其中各个专题的内容简介,各个专题下的小节标题,以及网络资源中提供的、与该主题内容相关的实际应用案例简介。在每个专题的正式内容之前,有一简要的导读(导学)说明:为何需要学习这部分内容?核心思想是什么?需要哪些预备知识?为读者学习本专题内容做了较好的铺垫和准备。

书中适时穿插了一些实用小贴士(Notes on good practice),帮助读者避免犯一些常见的错误,鼓励大家遵从科学国际语言(IUPAC采纳的惯例和程序)等。例如,在专题1A中的实用小贴士指出:尽管“理想气体”更为常用,但表述为“完美气体”则更好。正如在专题5B中介绍的那样,A和B的“理想混合物”只要求AA、BB和AB的分子间作用力相同,而不要求为零;而在完美气体中,不仅要求所有分子间作用力相同,而且应为零。

3.2 多层次设置和解答问题

本书设置了简要示例说明(Brief introduction)、例题(Examples)、自测题(Self-tests)、讨论题、习题和问题、综合题等。在简要示例说明中,展示如何使用书中刚介绍的一个公式或概念,如何正确

使用数据和量纲进行运算,也帮助读者熟悉各种量的大小(数量级)。例题则是更加详细地示例说明知识的应用的,一般需要读者收集整理和有效利用相关的概念和公式;示例前一般先帮助读者整理思路(Collect your thoughts),然后给出具体的求解过程和答案;所有例题后面都配有自测题,使读者能够即时检测对上述内容的掌握程度;有的例题后面还附有点评(Comments)。

在每个主题的最后都给出了大量的讨论题、习题、问题和综合题。其中,讨论题用来鼓励读者对已阅读的材料进行思考并复习重要的概念,说明其含义和局限;习题为相对直接的计算;问题则更加富有挑战性,一般涉及构建一个更加详细的答案;综合题则为横跨多个专题的题目,用来帮助读者以一系列方式创造性地使用知识。不少题目紧密结合了科研、生产实际和生活,并给出了相关文献。这种多类型,多层次的习题设计,可以引导学生实现从巩固知识到提升高级能力的过渡,非常值得借鉴。

3.3 数学呈现

数学是物理化学不可或缺的元素或组成部分,但过多和过难的数学会增加一些学生学习物理化学的畏难情绪,并在一定程度上冲淡主体内容及其连贯性。将公式的详细推导细节与主体内容进行相对独立的编排,则有望较好地解决上述问题,并可满足不同层次学习者的需求。

本书中公式的详细推导细节与主体内容的相对独立和分离是通过“如何完成?”(How is that done?)这一板块来实现的,代替了之前版本中的证明(Justifications)。读者需要理解一个公式是如何由合理的假定被推导出来的,以及该过程中所包含的数学步骤的细节。“如何完成?”由书中出现的一个问题引出,然后应用必要的数学,最终获得解决问题的公式或结论。这些小节保证了公式与其推导过程的分离,但同时强调了数学是物理化学必不可少的工具的特征。

此外,书中还穿插安排了共30个“化学家的工具箱”(Chemist's toolkits),包括量和单位、宏观物质的性质、动量和力、积分、微分、功和能量、均分原理、电荷、电流、功率和能量;偏导数、全微分、浓度的度量单位、级数展开式、电磁辐射、复数、分部积分、Euler公式、矢量、经典谐振子、圆柱坐标、角动量、球极坐标、矢量运算、行列式、矩阵、解本征方程的矩阵法、指数和高斯函数、偶极磁场、傅里叶变换、静电学和分数法积分,籍此帮助读者回忆或复习重要的数学、物理和化学概念,从而有助于读者理解书中的相关内容。这些“化学家的工具箱”被安排在书中首次需要用到它们的地方;较之以往版次,本版中相关工具的数量更多;另外,在教材辅助网站上则提供了更多的信息和简要的说明。

书中对许多公式进行了注释和标记(Annotated equations and equation labels),以帮助读者明白这些公式是如何导出的,并强调了它们的意义。在等号上提示了所用的替代式、所做的近似、已被假设不变(常数)的项和所用的积分等,也可以是一个表达式中一个单独项的意义提醒。另外,在每个专题最后都给出了公式清单,总结了该专题中最重要的公式和使用条件,便于读者自我检查,并提醒读者不要死记这些清单中的每一个公式。

3.4 教学资源

在该书配套网站(www.oup.com/uk/pchem11e)上提供了丰富的教学资源,可供阅读和下载。其中,应用案例(Impact)给出了物理化学在环境、材料、生物和医药等多个领域中的一系列应用案例,展示了物理化学是一个具有广泛应用且不断发展的学科,共有28个案例,包括气体定律与天气、太阳作为完美气体的一个球、燃料和食物的热化学、冷冻、晶体缺陷、超临界流体、生理学和生物化学中的渗透、液晶、生物细胞中的能量转化、物种选择性电极、量子计算、量子点、恒星光谱、O₂、N₂和NO的反应性、生物分子的计算研究、星际物种的转动和振动光谱、气候变化、磁共振成像、自旋探针、多肽中的螺旋-线团转变、生物大分子、分子识别和药物设计、DNA的X射线衍射分析、纳米线、离子通道、植物光合成过程中的光捕获、化工中的催化、燃料电池等。

在深入了解(A deep look)部分,给出了书中一些内容的延伸和拓展以及更为详尽的介绍和推导,共设置了13个,包括Debye-Hückel理论、逸度、变量的分离、H₂⁺成键分子轨道的能量、转动选律、

振动选律、范德华状态方程、电偶极-偶极相互作用、维里状态方程、建立体相和分子性质之间的联系、随机行走、RRK模型、BET吸附等温线等。

在群论表(Group theory tables)部分,全面而又详细地列出了群论表,可供下载。在分子模拟问题(Molecular modeling problems)部分,给出了可用Hartree-Fock、密度泛函和MP2计算的一些习题,可以下载。另外,书中的图、表也可以免费下载供教学使用(未获得特殊许可的商业用途除外);Word形式的主要公式也可供下载和编辑(仅对已注册的本书采用者)。

对于习题解答,配套有一个针对学生的习题解答(Student's solutions Manual, ISBN 9780198807773),提供所有a字头习题和奇数问题的解答;另一个则是针对教师的习题解答(Instructor's solutions Manual),提供所有b字头习题和偶数问题的解答(仅对已注册的本书采用者,可在线下载)。

3.5 图表呈现

书中穿插了大量的图表,数据丰富,设计精美,许多图均为彩色立体图,增加了美感,增强了辨识度,可以满足教育心理学的要求。

3.6 与国内物理化学教材的内容比较

通过将该书与国内南京大学《物理化学》(第6版)^[2]教材进行对比,可以发现该书在以下方面作了内容上的强化和补充。

在热力学第一定律部分,增加了量热法测量内能的变化和焓变、热化学中的实验技术(差示扫描量热法和等温滴定量热法)、John-Thomson效应的实验观测及其分子解释;

在热力学第二和第三定律部分,增加了熵的热力学定义和统计学定义、吉布斯能和亥姆霍兹能的一些说明、玻恩公式,并采用了与一般物理化学教材中不同的方式引入(导出)克劳修斯不等式;

在有关溶液部分,增加了依数性的共性、溶解度(置于依数性内容下面,指出尽管溶解度不是依数性,却可以用相似的方法估算)、正规溶液的活度(导出了正规溶液活度系数的表达式);

在相平衡部分,增加了稳定性与条件的关系、液-液相图中的相分离、最高临界会溶温度的热力学解释(聚焦于混合吉布斯能及其随温度的变化)等;

在化学平衡部分,增加了平衡常数的分子解释、温度对化学平衡的影响可以用玻耳兹曼分布随温度的变化及该变化对物种数量的影响来解释等内容;

在统计热力学部分,增加了正则系综、用群论来确定对称数的值、推导非线性分子转动配分函数的表达式、吉布斯能的统计诠释,以及化学平衡的物理基础可从能量间隔和状态密度之间的竞争来理解,将平衡常数与状态布居相关联;

在化学动力学部分,增加了聚合反应动力学、逐步聚合、链聚合、酶催化反应中的锁与钥匙模型(Lock-and-key model)和诱导匹配模型(Induced fit model);

在光化学部分,增加了激发单重态的衰变机制、猝灭、共振能量转移;

在电化学部分,增加了伏安法(线性扫描伏安法和循环伏安法);

在反应动力学部分,增加了扩散控制的反应(扩散控制反应的速率系数、物料平衡方程)、动力学同位素效应、分子碰撞动态学的实验和计算结果(进攻与分离方向、吸引势能面和排斥势能面、量子力学散射理论)、均相系统中的电子转移(速率定律、电子隧穿作用、速率系数、理论实验验证等);

在表面物理化学部分,增加了“火山”曲线(表面上的催化活性)、实验技术(超高真空UHV、显微技术(扫描电子显微镜SEM、透射电子显微镜TEM、扫描探针显微镜SPM、扫描隧道显微镜STM、原子力显微镜AFM)、离子化技术(光电子发射光谱、俄歇电子能谱、X射线荧光、扫描俄歇电子显微镜)、衍射技术(低能电子衍射LEED确定表面结构及其重组,LEED图的剖析)、吸附和脱附程度及速率的测定(石英晶体微天平QCM、二次谐波发生SHG、表面等离子体共振SPR等))。不仅引入了一些新的概念和原理,还增加了大量对物理化学研究具有重要意义的实验表征技术。

4 教材的一些不足

第11版教材对一些内容进行了重新编排和组织,虽然增加了教师教学的灵活性,但也导致一些内容因为切割分离而有点零散,从而影响了内容的系统性和完整性。例如,相平衡一章的内容切割为:主题4纯物质的物理转变、主题5简单混合物中的“专题5C二元系统的相图:液体”,以及主题15固体中的“专题15D二元系统的相图:固体”和“专题15E三元系统的相图”。电化学内容分散在主题6化学平衡的“专题6C电化学电池”和“专题6D电极电势”以及主题19固体表面上的过程中的“专题19D电极上的过程”等部分。胶体分散系统和大分子溶液这一章内容置于主题14分子相互作用的“专题14E自组装”和“专题14D大分子”部分。电解质溶液一章内容主要以“专题16B液体中的运动”呈现安排在主题16运动中的分子部分。表面物理化学的内容则分散出现在主题14分子相互作用和主题19固体表面上的过程两个主题中,使相关三级学科的结构不再完整。

另外,书中一些表示和表述存在不够严谨和完整的问题。例如,将标准摩尔生成焓表述为标准生成焓,相应的符号表示为 $\Delta_f H^\ominus(B)$,而不是 $\Delta_f H_m^\ominus(B)$,缺了下标m,导致与给出的单位 $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ 不符。标准平衡常数的符号右上角少了标准态符号 $\ominus$ 。功和热的微小变化符号与状态函数微小变化符号相同,没有进行区分(应分别采用 δ 和 d);另外,用小写 w 和 q ,而不是大写 W 和 Q 表示功和热。由于本版压力的单位采用bar,将一些公式中的 $p/p^\ominus$ 直接用 p 表示,忽略了标准压力,易引起读者误解。

5 结语

Atkins' Physical Chemistry (第11版)教材在编写理念、内容设置和编排、图表和数学呈现、教学资源等多个方面都有其鲜明的特征和独到之处,能够紧跟学科发展和科学研究前沿,不失为一本优秀的物理化学教材。这也是国内外许多高校将该书选为物理化学教学指定教材或参考书的主要原因。2018年,高等教育出版社争取到了该书第11版在中国大陆的翻译出版权,并组织南京大学、扬州大学、陕西师范大学、山东大学、大连理工大学、华中师范大学、南京师范大学等国内7所高校的17位物理化学教学一线教师完成了该书的翻译和出版^[3],相信该版本在国内的影响会进一步扩大,并对我国未来的物理化学教材建设发挥借鉴意义。

参 考 文 献

- [1] Atkins, P.; Paula, J.; Keeler, J. *Atkins' Physical Chemistry*, 11th ed.; Oxford University Press: Oxford, UK, 2018.
- [2] 傅献彩, 侯文华. 物理化学(上册). 第6版. 北京: 高等教育出版社, 2022.
- [3] Atkins, P.; Paula, J.; Keeler, J. *Atkins物理化学*. 侯文华, 等译. 第11版. 北京: 高等教育出版社, 2021.