

要点回顾

VP = σ 键电子对数 + 孤电子对数

1. 数 σ 键 (只数 σ , π 键一律不算)

① 双键: 1个 σ + 1个 π → 只数 1

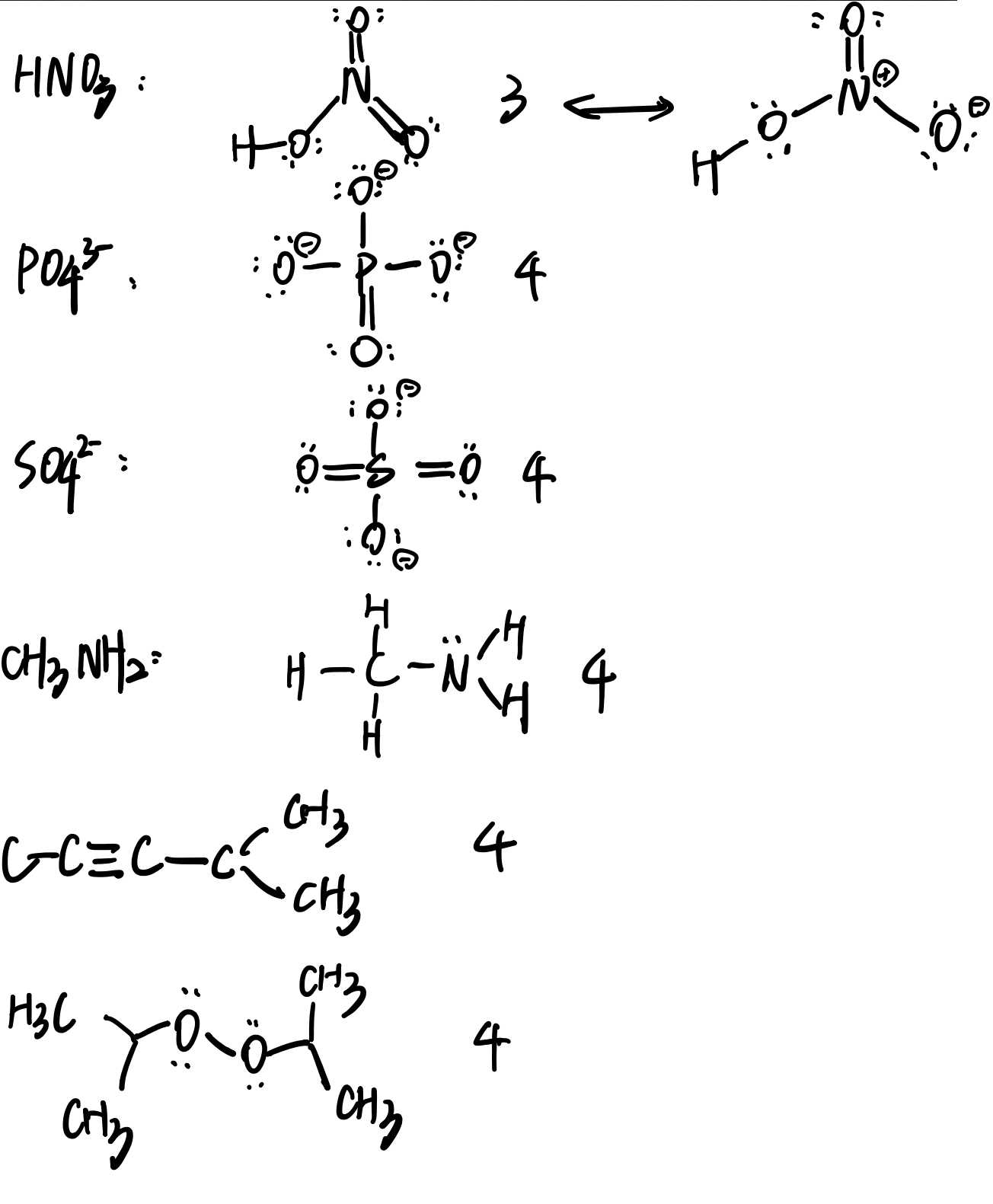
② 三键: 1个 σ + 2个 π → 只数 1

2. 数中心原子的孤电子对数

通用公式: $\frac{1}{2}(V - \sigma \text{ 键电子数} - \text{成键电子数})$

3. 最后算 VP = σ 键数 + 孤电子对数

分式 $\rightarrow$ 路易斯结构式 $\rightarrow$ 数 σ $\rightarrow$ 数孤对 $\rightarrow$ 算 VP

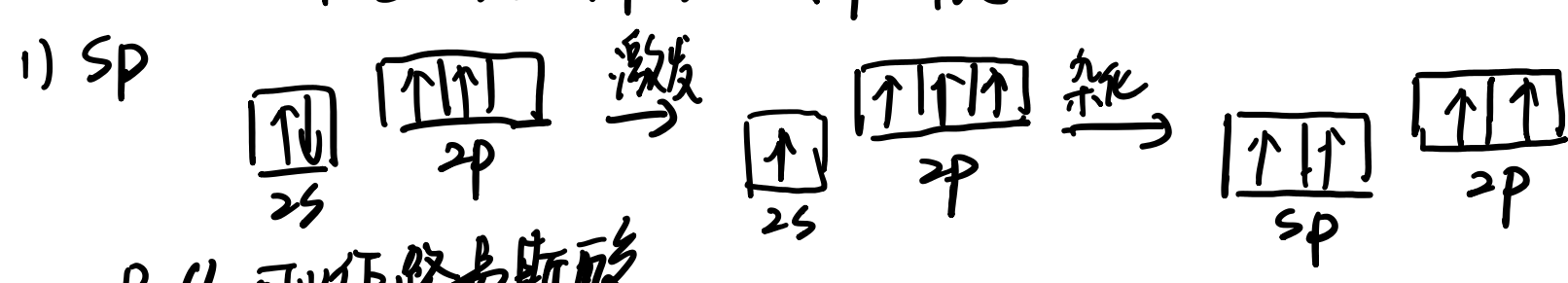


1. Valence bond theory and orbital hybridization

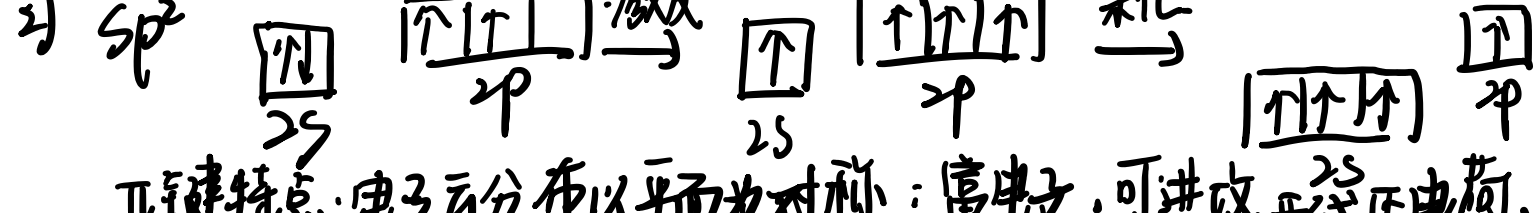
VB 理论

解释共价键具有方向性: 最大重叠原理

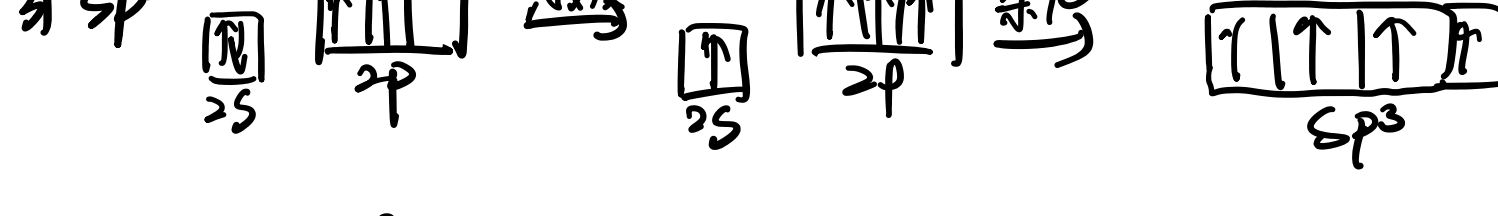
饱和性: 每个原子轨道只能形成一个共价键



$BeCl_2$ 可以下路易斯结构.



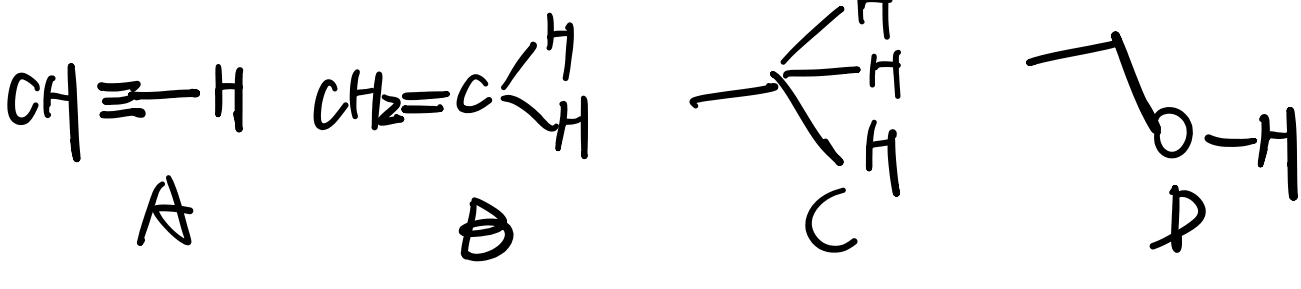
π 键特点: 电子云分布以平面为对称; 离电子, 可进攻形成正电荷.



sp, sp^2, sp^3 小结:

s 成分: $\frac{1}{2} s, \frac{1}{3} s, \frac{1}{4} s$

电负性: 最大, 中间, 最小



电负性越大, $A^{\ominus}$ 越稳定, 酸性越强 酸性: $D > A > B > C$

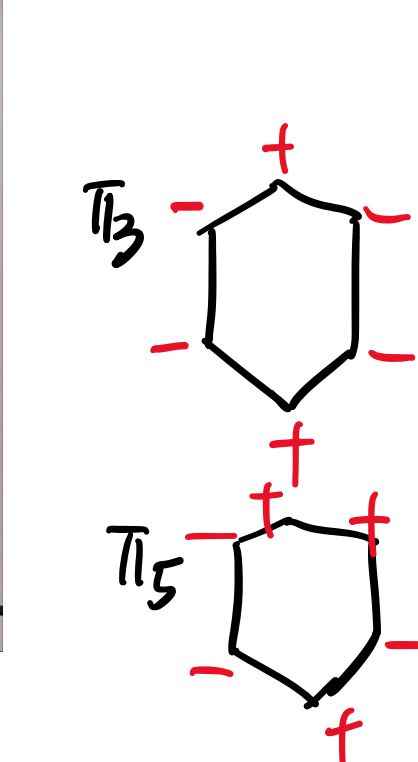
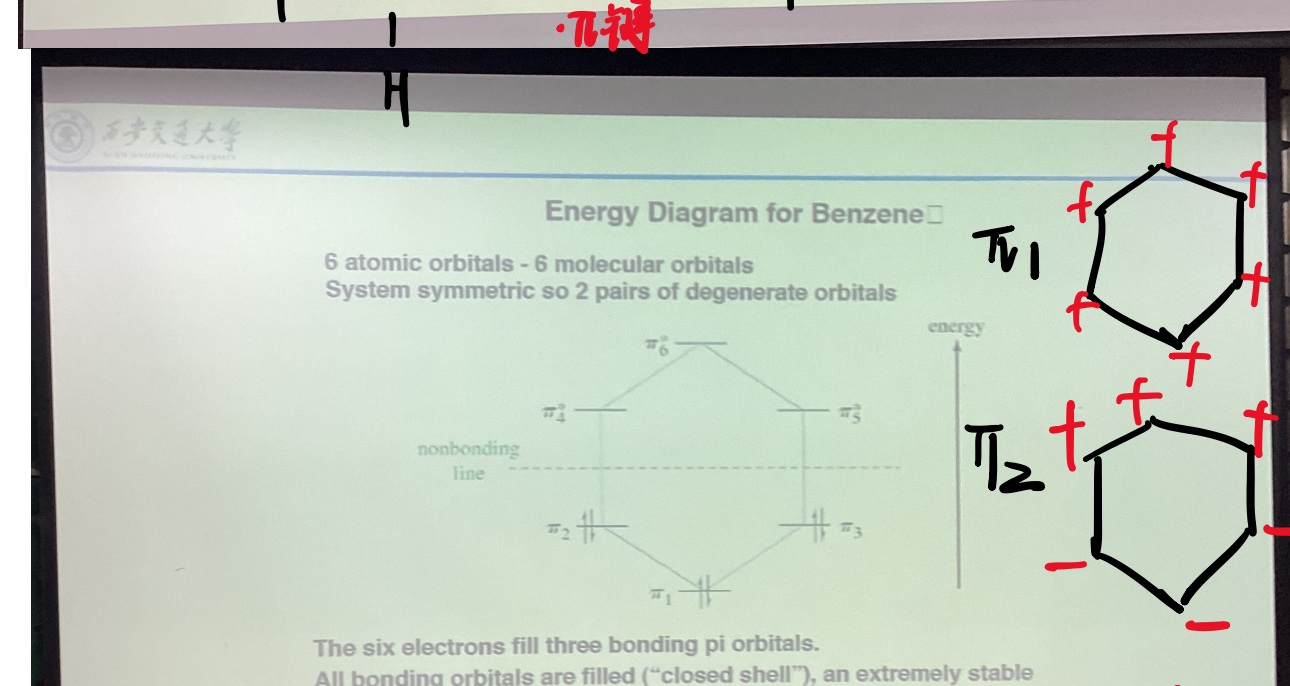
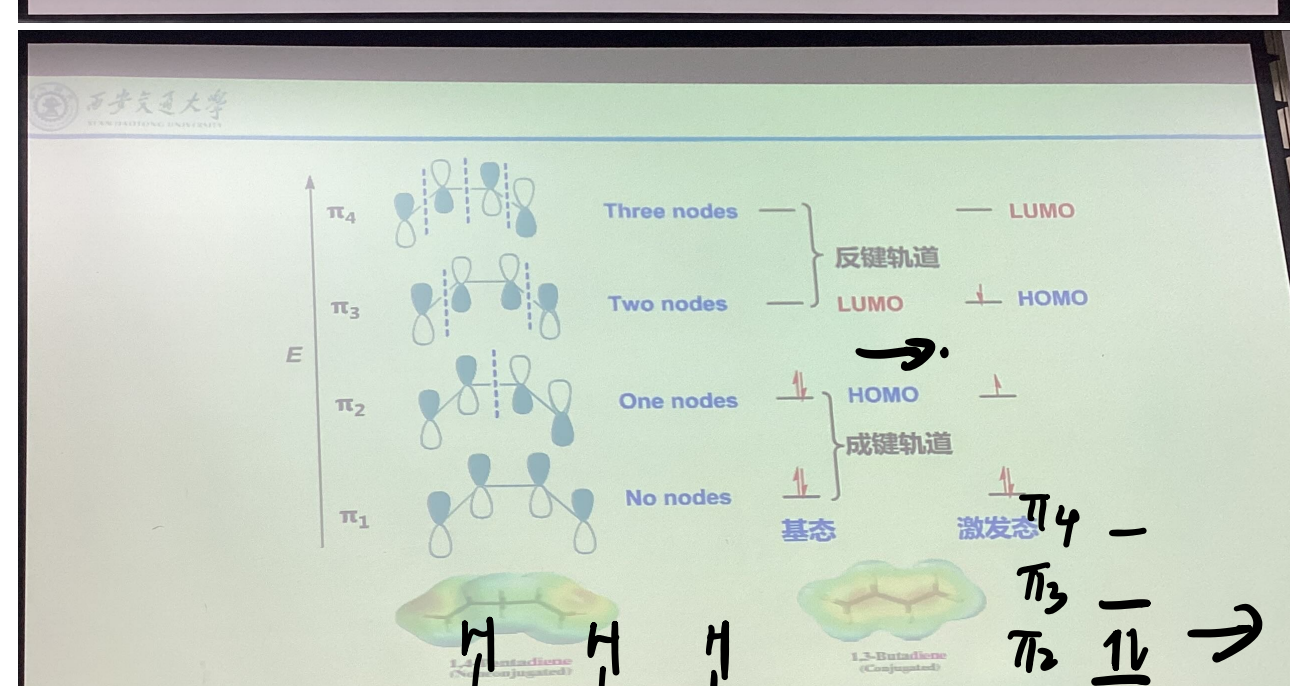
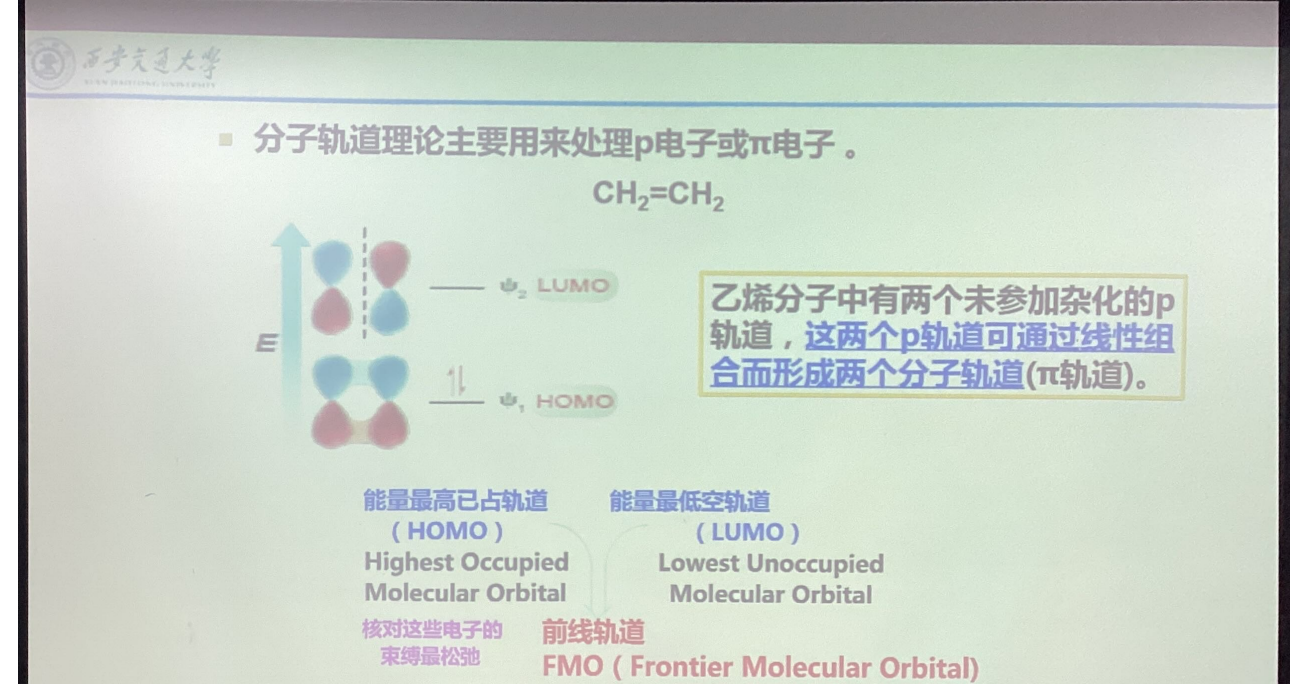
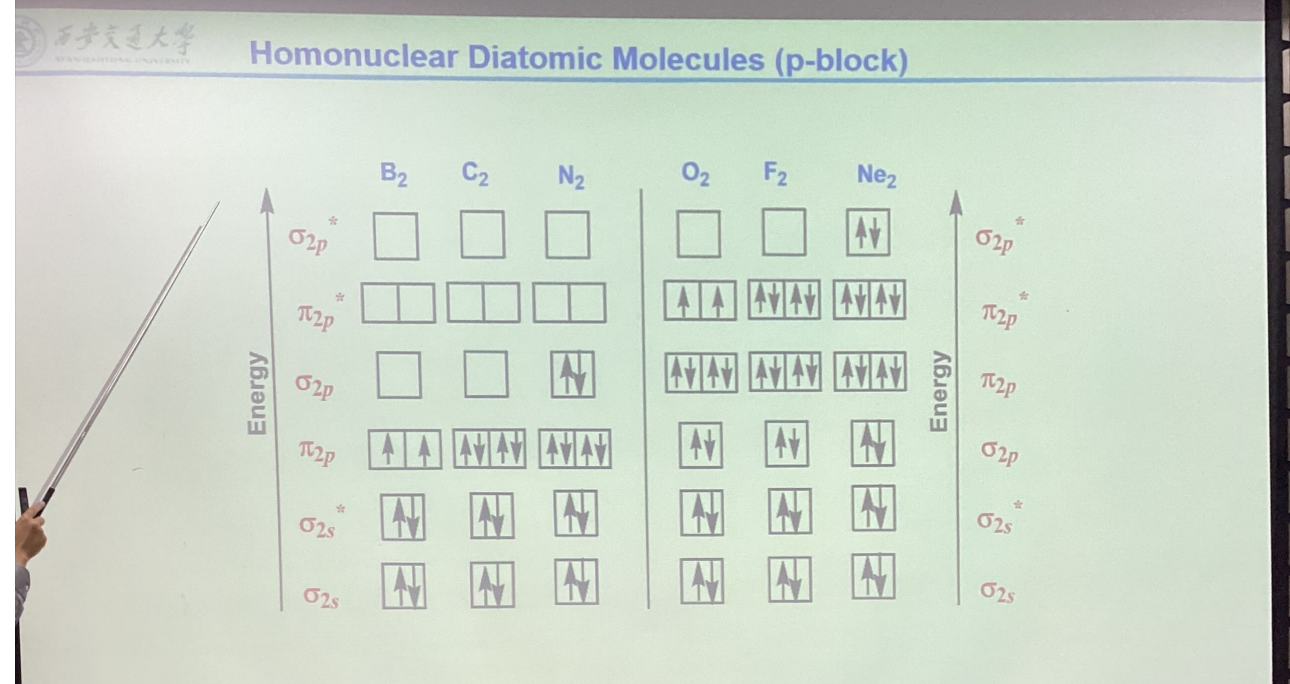
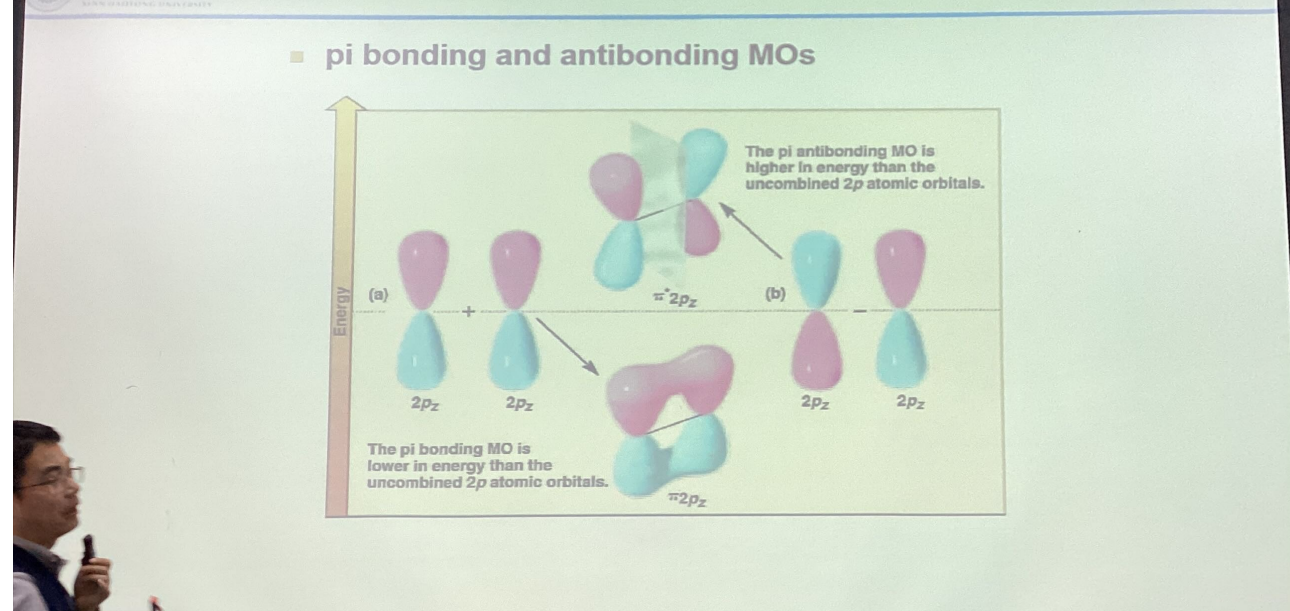
4) sp^d : 例 SF_6

VB MO
localized delocalized
局限 离域

对称性匹配, 能量接近, 相位相同

Bond order: $\frac{1}{2}(\text{成键电子} - \text{反键电子})$

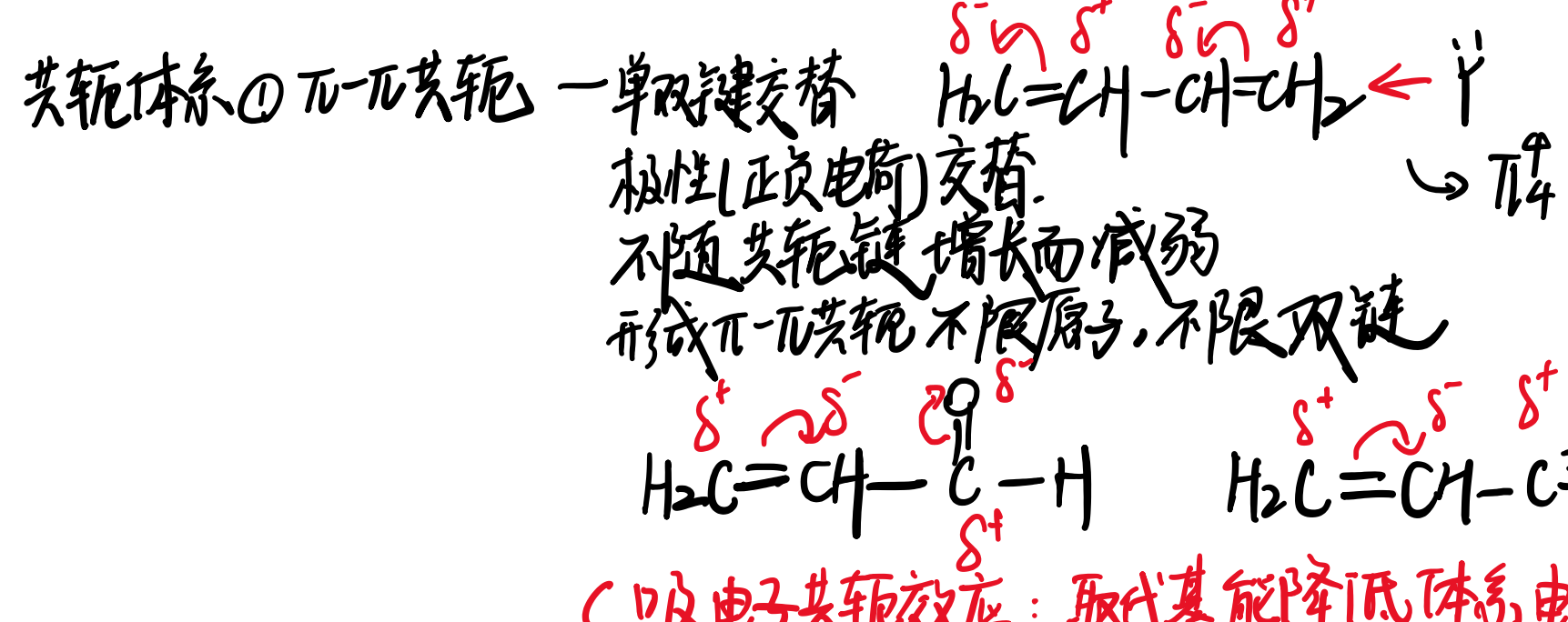
$\text{H}_2^+, \text{H}_2, \text{He}_2^+$ 存在, He_2 不存在
(C 键级为 $\frac{1}{2}$) (键级为 0)



共振效应: 在能形成 π 键的共轭体系中, 由于相邻 p 轨道的重叠而产生的电子间的相互流动, 致使体系能量降低, 键长平均化, 分子趋于稳定的 **电子效应**.

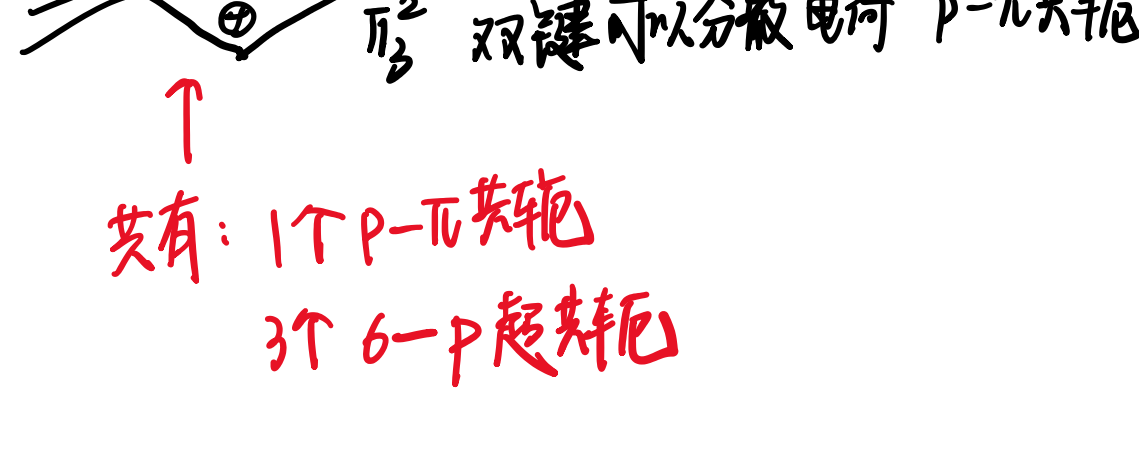
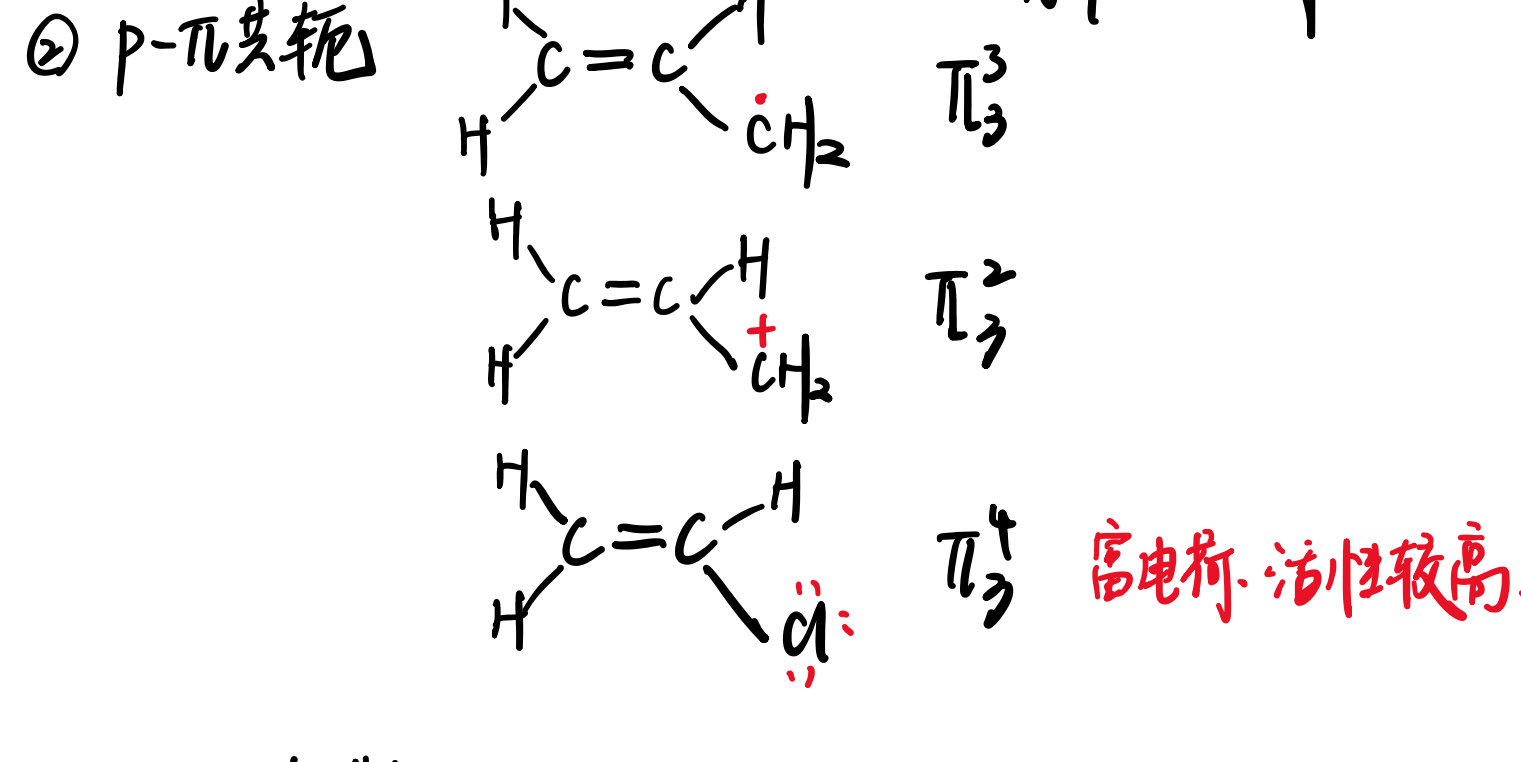
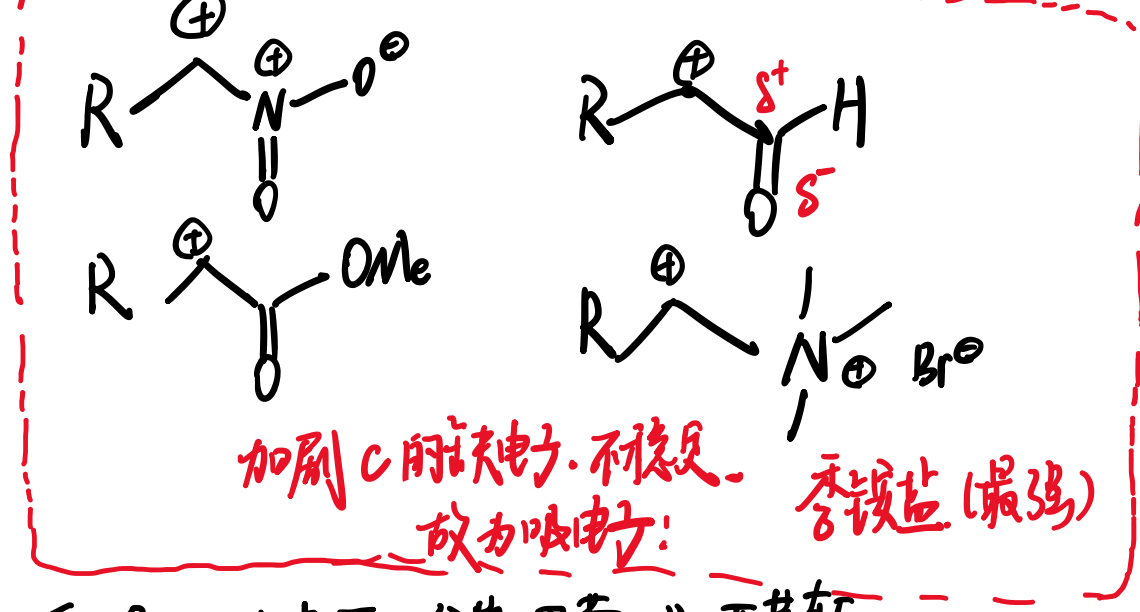
共轭体系: 三个或三个以上互相平行的 p 轨道形成 π 键

电子离域: 共轭体系中, 成键电子运动范围打大的现象
电子离域使共轭体系能量降低



吸电子共轭效应: 取代基能降低体系电子云密度
 $-\text{NO}_2, -\text{COOH}, -\text{CHO}$

给电子共轭效应: 取代基能增加体系电子云密度
 $-\text{NH}_2, -\text{OH}$

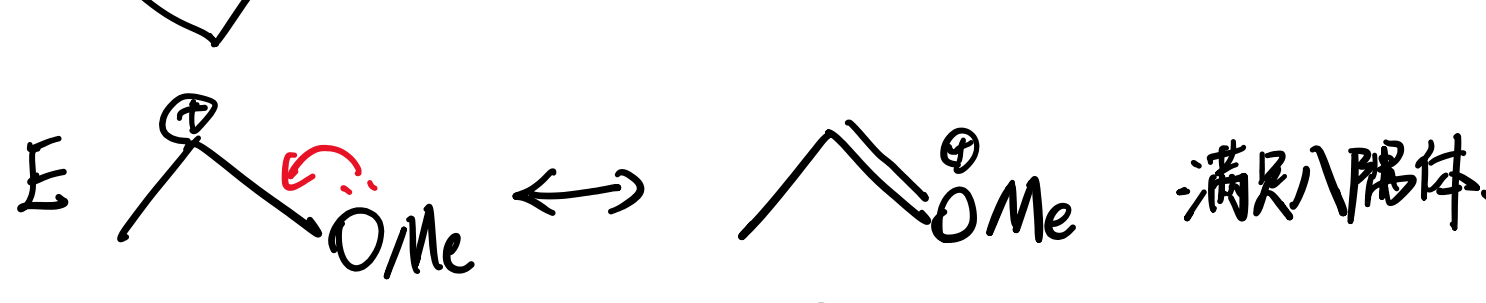
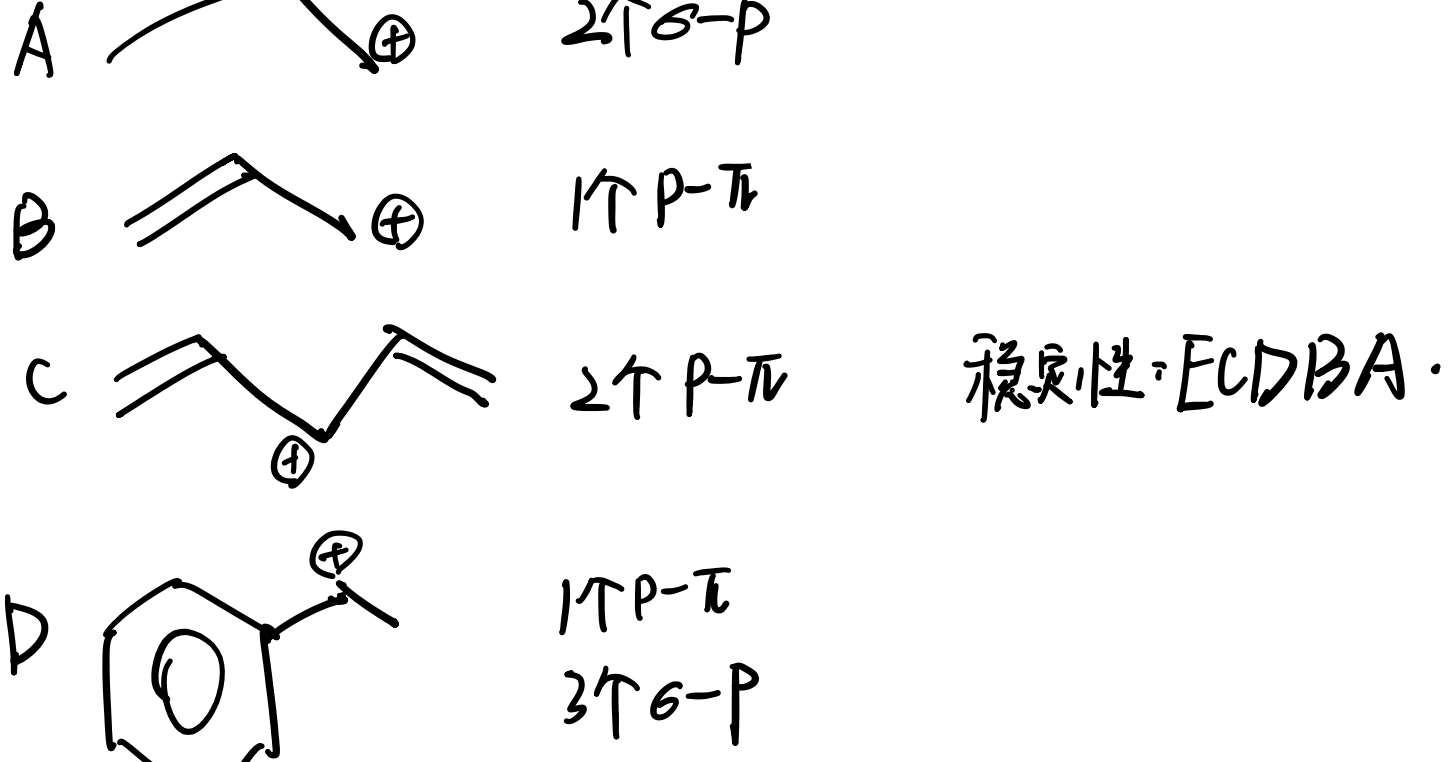
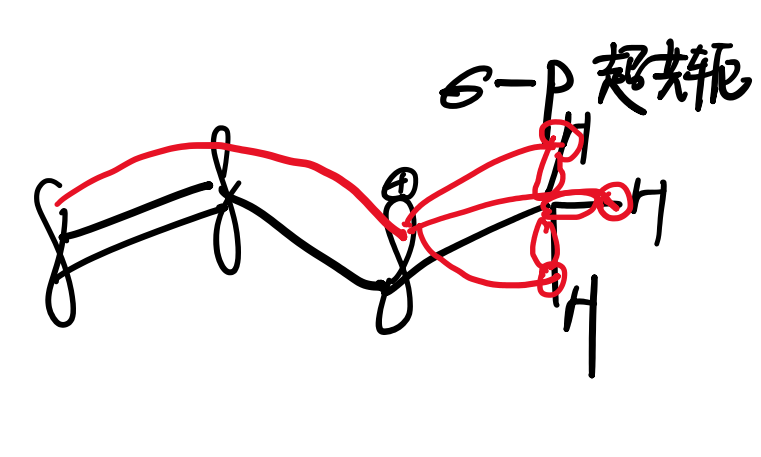
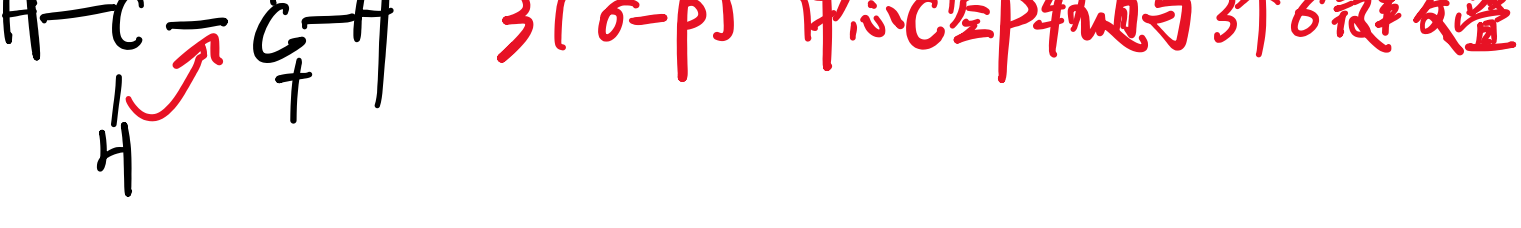


③ $\sigma-p$ 超共轭

起因于 π 键与相邻 $\text{C}-\text{H}$ σ 键重叠



$\sigma-p$ 超共轭



EWG (致钝基团)
小结: 吸电子: $\text{NO}_2, \text{OMe}, \text{CH}_3, -\text{CF}_3, -\text{CCl}_3$
给电子: $\text{OMe}, \text{OH}, \text{NH}_2, \text{N-R}, -\text{SMe}, \text{Br}, \text{I}$
(致活基团) EDG

如 $\text{Cl}, -\text{OMe}$ 即有吸电子诱导效应有共轭的推电子效应(较弱)