第一课：绪论(共价键理论)

2017年9月5日　　7:14

老师邮箱：feiteng@jlu.edu.cn
有机化学：研究有机化合物的组成、结构及其变化规律的科学(研究碳氢化合物及其衍生物的化学)。
有机化合物：碳氢化合物及其衍生物。
有机化合物特性：

1. 熟练庞大且增长迅速，结构复杂，同分异构现象普遍存在，故需要系统研究其性质、理论及合成方法。(目前有机化合物大约有2600万种)；
2. 有机物其他的一些特性：易燃烧、热稳定性差、大多数有机物不溶或难溶于水但易溶于有机溶剂、反应速率较慢且副反应多；

有机化合物的研究方法：

1. 分离提纯：重结晶、升华、蒸馏、萃取、色谱分离等；
2. 纯度的检验：检测物理常数，如熔点、沸点、折射率、密度等(纯净的有机物有固定的物理常数)；
3. 分子式的确定：燃烧法确定元素，元素分析确定质量比，质谱仪确定分子量；
4. 结构式的确定：X射线分析、电子衍射、核磁共振光谱等确定结构。

一、分子组成：有机化合物是含碳化合物，或碳氢化合物及其衍生物；
二、分子轨道：

1. **原子轨道：**

含义	原子中电子的运动状态，用波函数f表示
表示方法	电子云的形状和疏密，界面图的大小和疏密
核外电子排布规律	Pauli不相容原理、能量最低原理、Hund规则

2. **共价键的基本理论**

价键理论	
经典的路易斯学说	原子通过共用电子对形成的化学键(不能解释共价键的形成本质)
电子配对法	两原子间各有一个未成对电子。且自旋方向相反，原子轨道重叠后共享电子对形成共价键
量子力学	略
原子轨道杂化理论	略
现代价键理论(电子定域论)	共价键的形成是成键原子的原子轨道相互充电或电子配对的结果；共价键具有饱和性； 共价键具有方向性(在键轴方向上重叠最大区域时作用力最大，最稳定)； 轨道的杂化(同一原子的能量相近的轨道可进行杂化，杂化的结果是组成能量相等的杂化轨道，使成键能力更强，体系能量降低，成键后达到最稳定的分子状态)；

Σ键和π键：
　　π键不能单独存在；
　　Σ键的键能大，稳定性高；
　　π键的稳定性低于Σ键，电子活动性较高；
　　Σ键：头碰头重叠；π键：肩并肩重叠。
价键理论的局限性
　　价电子被定域在一定的化学键的两个原子核区域内运动(电子定域)，对单双键交替的多原子分子形成的共价键(共轭双键)无法解释。
电子离域论[分子轨道理论](用来弥补原来价键理论的不足)：

1. 分子中的电子在整个分子范围内运动，分子轨道是原子轨道组合而成；
2. 分子轨道数目与组成的原子轨道数目相同；
3. 分子总能量等于电子所具有的能量之和；
4. 分子能量最低：对称性匹配、能量大致相近、最大程度重叠；
5. 遵守三原则(洪特规则、鲍利不相容原理、能量最低理论)
6. 分子轨道有Σ和π两种。
7. 能量最低是指分子排布出来的最低能量(分子轨道处在震动状态，取较稳定状态)。