

普通化学辅导：化学键，分子结构和晶体结构常见问题 PDF
转换可能丢失图片或格式，建议阅读原文

https://www.100test.com/kao_ti2020/91/2021_2022__E6_99_AE_E9_80_9A_E5_8C_96_E5_c58_91872.htm

1. 不是4s比3d(21号元素以前)能量低吗？为什么是3d与3s,3p杂化，而不是4s? 答：这个问题提得很好或许很多同学都有类似的疑问。关于轨道的杂化，一般认为能量相近的原子轨道才能参与杂化。但是能量并不是唯一决定的因素，所形成的分子的对称性(关于对称性的问题在此就不能展开了)对于参与杂化的轨道的选择一样会有影响，所以随着课程的深入，您将会发现不光有s-p-d(如3s、3p、3d)类型的杂化，还有d-s-p(如3d、4s、4p)类型也可以杂化，结果无非都是为了形成一定对称性的分子结构。另外我必须提醒大家，杂化轨道理论往往是经验性的本质上是先有物质的结构，后有杂化轨道理论杂化轨道理论的提出，目的是为了了解释某些物质结构，至于实际形成分子的过程中是否真的经过“杂化”这一过程我们不得而知了(至少到目前还只是个假想过程)。

2. 杂化理论中能量相近的才能杂化，是或同层之间？在C₂H₂中2个pi键能量相同？答：Pauling通过对大量分子结构的总结后提出杂化轨道理论。该理论规定：能量相近的轨道才能发生杂化。其中能量是最重要因素。我们知道，影响体系能量的因素除参与杂化的轨道能量之外，也包括中心原子周围配体的排布情况。因此，C₂H₂中的两个C采用sp杂化，杂化后生成两个sigma键，剩余两个p电子生成两个pi键。两个pi键是等价的。

3. 关于共价键的几种理论是统一的还是互斥的？苯的结构该用共振还是大pi键解释？答：实际上化学键的概念建立以后，也在不断发展的完善。传

统的“化学键”是定域在某两个原子之间的。随着人们认识的深化，发现化学作用并不仅存在于两两原子之间，即电子是离域的，这就有悖于传统化学键的概念。在旧的理论出现问题，而新的理论还没有被提出或者没有被广泛接受之前，人们还是更乐意于采用“折衷”的方案：对原有理论进行修正。况且传统化学键理论有其合理的成分，比如图象往往清晰而且直观，为化学家们所熟悉，化学家们都乐于采用。正是在这种情况下，Pauling提出了“共振论”试图以定域的电子图象来解释本质上是“电子离域”的问题(因为当时还没有电子离域的概念)。等到人们认识了电子离域这一现象的普遍性，才提出了“大键”的概念，合理的解释了离域电子的问题，有助于完善价键理论(这是对化学键概念的深化)。所以对于苯的结构用大键解释就更合理一些。不过我们也要看到无论是共振论，还是这种“离域键”的概念，初衷都是一样的，差别在于对同一个问题进行描述的角度不同。当然如果从分子轨道理论(MO)的角度考虑，分子中所有电子本质上都是离域的这个方法在现有处理分子的手段中是最严格的。(只是用这种方法往往不能非常直接地得到原来那种有确定结构的分子图象)

4. 我们在课上既学过由晶格能判断离子晶体熔点，也讲了由离子极化来考虑，可两者的判断标准似乎是相反的，因为正离子电荷越高，半径越小，则形成晶体晶格能越大，熔点应升高，可同时其极化能力也越大，向分子晶体过度，熔点又似乎应减小，请问应如何综合考虑这两方面来进行判断呢？谢谢！

答：晶体的晶格能与正负离子的电荷成正比，与正负离子的距离成反比。因此当我们看教材中表12.1时，可以得到与离子极化相同的结果。注意：离子极化通常是比

较相同阳离子的化合物或相同阴离子的化合物，这样才能得到有规律的结果。

5. 请问：如果对一个分子用分子轨道理论（离域 π 键）分析是否就不用考虑八隅体规则了？答：分子轨道不考虑Lewis结构。特别对于离域电子体系，我们不能确定电子究竟属于谁。

6. 我们课本（《普通无机化学》）中在写出分子结构时都没有标出配位键，算不算是正确地应用价键理论呢？答：严格地讲，应当标出配位键的方向。但是的确很多教材都只用一个短线而不用箭头。我们认为这两种表示都是对的。

100Test 下载频道开通，各类考试题目直接下载。详细请访问 www.100test.com