



6.4.2 现代价键理论

天津大学

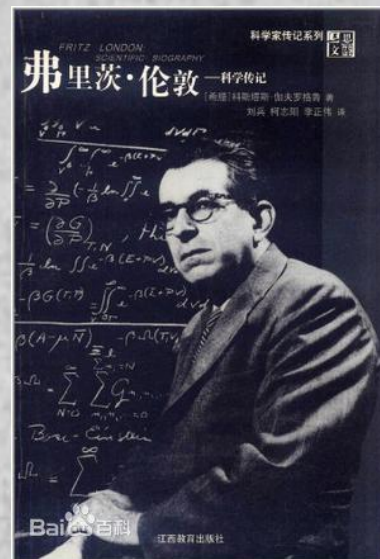
邱海霞



现代价键理论



物理学家海特勒
(1904-1981)



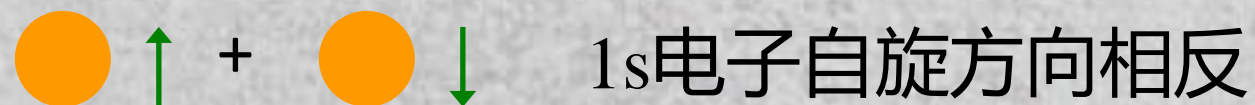
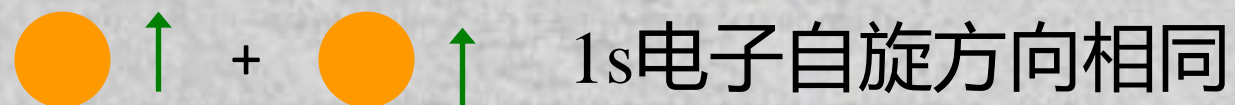
物理学家伦敦
(1900-1954)

1927年用量子力学处理氢分子，提出了
现代价键理论，解释了共价键的本质



现代价键理论

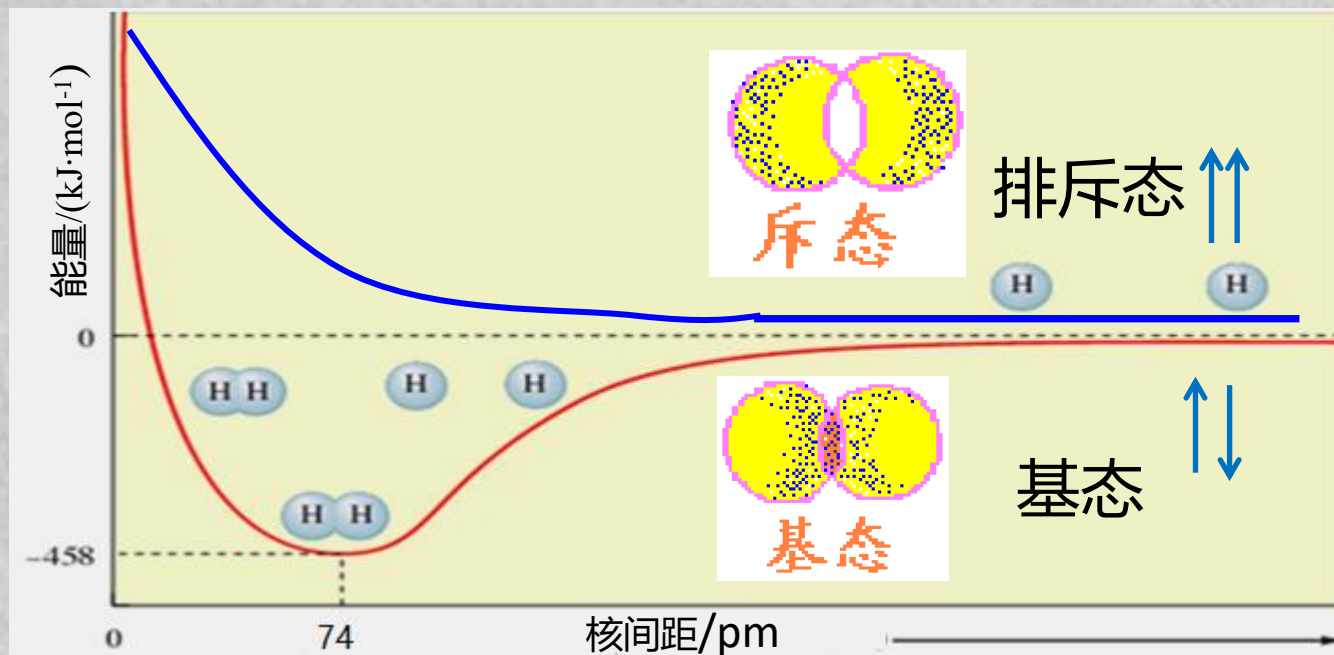
两个H形成H₂



通过解薛定谔方程，得出系统能量的变化



共价键的本质



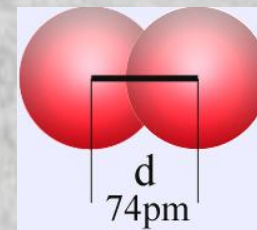
氢分子的能量与核间距的关系图

$$E = -458 \text{ kJ mol}^{-1} \quad d = 74 \text{ pm} < 2a_0 \quad (a_0 = 53 \text{ pm})$$

共价键的形成动力 共价键的本质

能量降低

原子轨道重叠





电子配对原理

共价键

原子之间由于成键电子的原子轨道发生重叠而形成的化学键

自旋相反的单电子配对成键

有多少单电子, 能形成多少个键

共价单键



共价双键



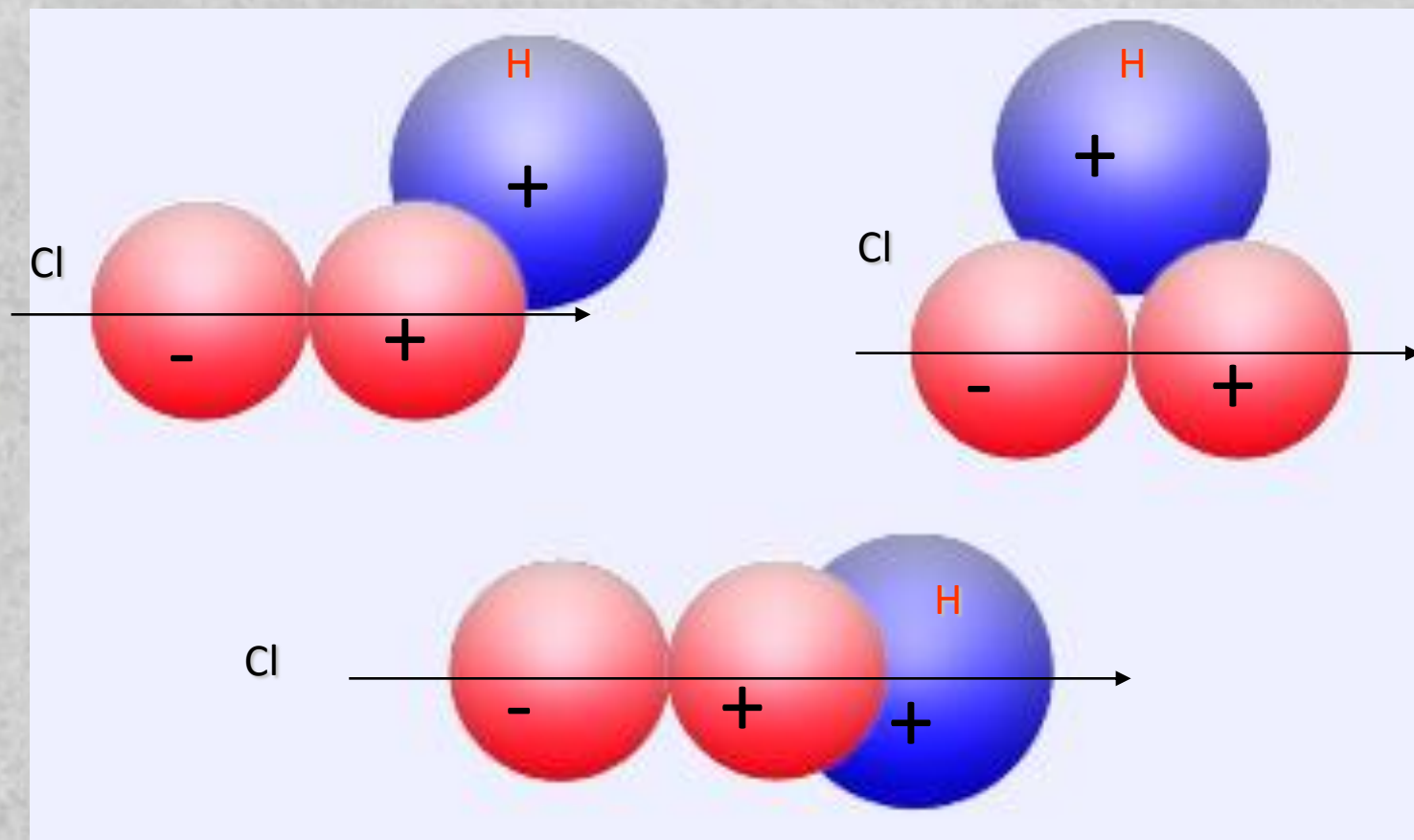
共价三键





最大重叠原理

原子轨道重叠程度越大，共价键越牢固。

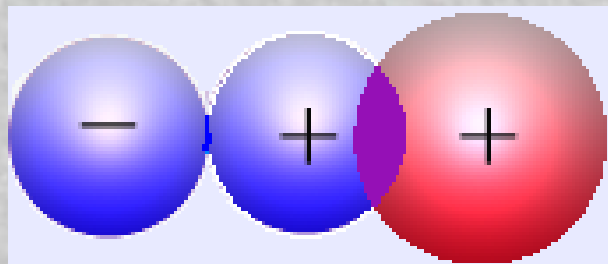


HCl分子的成键示意图

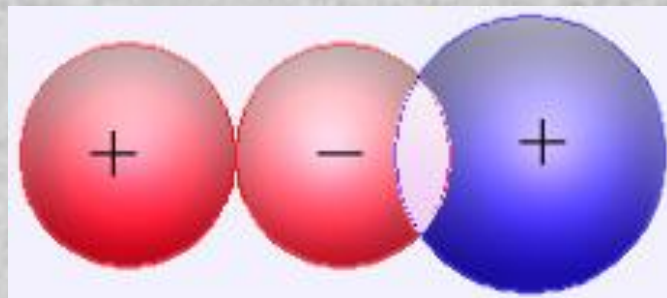


对称性匹配原理

原子轨道的重叠，必须是**同号重叠**



原子间电子的概率密度增大,形成化学键。

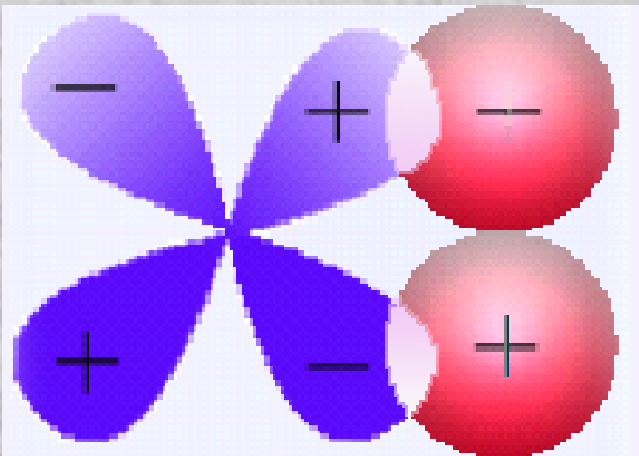
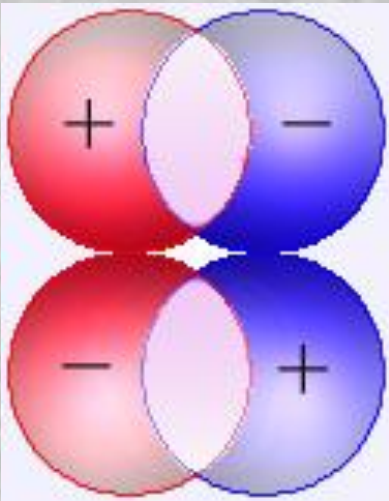
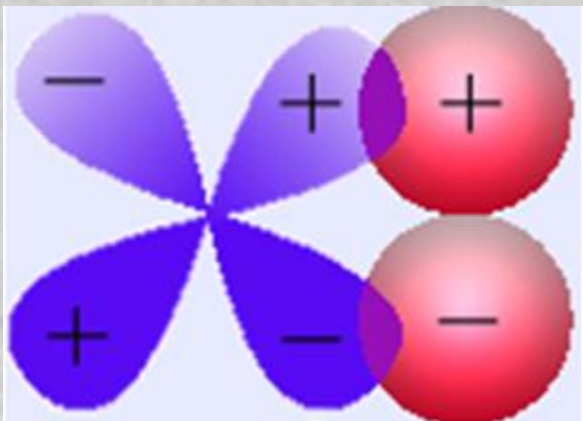
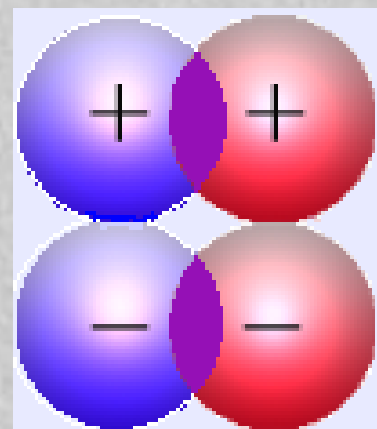


原子间电子的概率密度几乎等于零，难以成键。

p_x-s



对称性匹配原理



$$p_y-p_y$$

$$d_{xy}-p_x$$



共价键的特征

饱和性

有

电子配对后不再与第三个电子成键

方向性

有

除s轨道，最大重叠必有方向