原子-化学键-分子

量子理论

- 量子学说起源: 氢原子光谱/能级、波粒二象性(德布罗意波长)、测不准原理
- **薛定谔方程**: 波函数的物理含义、四个量子数的含义和取值限制、轨道的含义、轨道的形状

原子

- 原子轨道:
 - 电子能量及离核远近和量子数的关系、简并、
 - 屏蔽效应、钻穿效应、能级分裂、能级交错
 - 电子排布规律: 能量从低到高、Pauli不相容原理、Hund规则、
 - 周期表的分区: 周期数、主族、副族、IIIV族、零族
 - 电子构型、电子轨道图、价电子的概念
 - 原子半径、电离能、电子亲和能、电负性和周期表关系:同组和同周期如何变化、 典型的例外(轨道半满、镧系收缩、F和CI电负性差异及来源)

化学键

各种化学键的本质: 静电作用 or 电子轨道重叠、理解饱和性方向性的来源、各种化学键强度差异的来源和规律

共价键理论: 八隅体原则、价键理论、价层电子对互斥理论、分子轨道理论

- 八隅体原则: 如何书写Lewis结构
- **价键理论、 价层电子对互斥理论**: σ键和π键的区别; 杂化轨道(键角、分子几何构型、能量和成分的关系、等性杂化和不等性杂化)、价层电子对计算、<mark>对称分布原则</mark>、电子对之间排斥力顺序、图12.21 (分子构型及其变体)
- **分子轨道理论**: 和杂化轨道的区别、分子轨道的数量和能级、成键轨道和反键轨道、能画出简单的分子轨道能级示意图 (B2、C2、N2 vs O2、F2)、组成分子轨道三个原则 (对称性匹配、能量近似、最大重叠)、键级、磁矩

分子极性: 偶极矩和电价性、化学键极性vs分子极性 配位化合物:

- 内届、外界、配体、配位原子、配位数vs配体数、螯合物
- 命名: 某化某 vs 某酸某, 常见配体的名称、配位原子数
- 异构:结构异构vs空间异构(几何异构vs旋光异构),能推出几何异构异构体数量、
- 配合物的价键理论:空轨道+孤对电子、内轨型vs外轨型(如何判断、性质差异)、磁矩、空间构型(表14.10)

分子间作用力

- 取向力、诱导力、色散力; 氢键
- 各种力的本质和适用范围、影响因素
- 色散力的影响因素、与物性(熔点、沸点、溶解度)关系
- 氢键:如何判断是否形成氢键、氢键强弱、对物性的影响

晶体

- 各种晶体类型的定义及特点 (表13.5)
- 7种晶系14种空间点阵

气体

- 理想气体(稀薄气体:温度不太低、压力不太高)、非理想气体的修正(分子体积、内聚力)
- pV = nRT、 $p_AV = n_ART$ 、 $pV_A = n_ART$: 分压和分体积不能同时出现在一个公式里

液态-气态-固态

- 平衡
- 用气体扩散和分子间相互作用的竞争解释气液相变
- 蒸发、沸腾、冷凝、蒸气压、过热、凝固、过冷
- Clapeyron-Clausius方程
- 水的相图: 三相点、凝固点、三条线、四个区

溶液

- 各种浓度的定义
- 溶解度: 竞争因素、相似相溶、变化规律
- 依数性: 四种 (哪种最基本) 、对应数学公式、电解质溶液的修正
- 胶体:溶胶胶束结构(图4.10)、带电特征、聚沉的影响因素

热力学

- 热力学三大定律、体系的划分、状态函数、广度量和强度量
- 焓(变)、熵(变)、内能(变)、吉布斯自由能(变)的定义、生成x、反应x、指定物质的x变为零?
- 等压热和等容热容的定义和差异、体积功、非体积功
- 热力学标准态的含义:压力、浓度、(温度无定义)
- 热化学方程式(1mol反应什么意思?)、Hess定律的灵活应用
- 可逆过程:可逆膨胀体系做功最多,吸热也最多;可逆压过程体系做功最小,吸热也最少
- 熵:单位、各种状态熵的大小、不同物质熵的大小、温度的影响

- 自发过程的判据: $\Delta G = \Delta H T\Delta S$ 、 $\Delta_r G_m^o = \Sigma \nu_i \Delta_f G_m^o$ 、 <mark>非标态如何计算</mark>、转变温度
- 温度、压力、浓度如何影响吉布斯自由能变

化学平衡

- 平衡常数、反应商、平衡移动原则(压力、浓度、温度 有公式)、多重平衡
- 平衡常数和Gibbs自由能变、任意状态的Gibbs自由能变(公式?)

酸碱平衡

- 酸碱质子理论、共轭酸碱的定义、酸碱的强弱 (表8.2)
- 近似计算原则 $c/K_a > 400$, K_a 、 K_b 和 K_w 关系
- 多重弱酸 (多重弱碱) 各种电离产物的计算: 第一步
- 缓冲溶液:组成、缓冲范围、缓冲能力、抗酸组分、抗碱组分、计算公式
- 同离子效应

沉淀溶解平衡

- 溶度积的概念, 对应的反应方程式形式、离子积
- 溶解度vs溶度积
- 同离子效应、盐效应
- 沉淀溶解、转化、分步沉淀的计算原则: 如何判断反应方程式, 对应的平衡常数
- 沉淀的形成、恰好沉淀、完全沉淀

氧化还原、电化学

- 电极电势和电池电动势
- 电极反应、还原电对、电极电势、标准电极电势、电池符号
- 标准电极电势和氧化性还原性强弱的关系
- **电池电动势和反应Gibbs自由能关系**、电极电势的间接计算
- 电池电动势和电极电势的Nernst方程(具体公式、有弱电解质或者沉淀参与时)
- $ullet E^o_{AgCl/Ag}=?$

配位平衡

- 稳定常数的概念
- 有弱电解质、沉淀物质参与的配位平衡

化学动力学

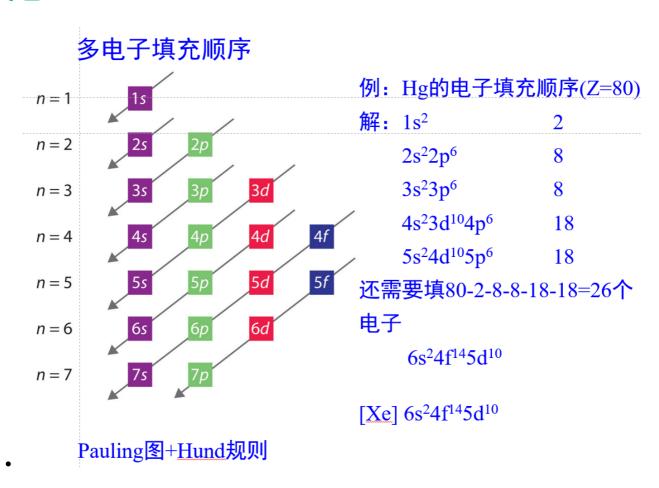
• 质量作用定律,根据不同浓度反应速率计算反应级数

- 基元反应、非基元反应、p137汇总表格、半衰期、各级反应速率常数的单位
- Arrhenius公式,活化能,温度的影响
- 活化能和焓变的关系

自己汇总公式

- 判断反应自发性的几种判据 ΔG 、 ΔE_{cell} 、KvsQ 、 $K_{sp}vsQ$
- 高温 $\Delta_r G_m^o$ 如何计算,非标态 $\Delta_r G_m$ 如何算
- $ullet E^o_{AqCl/Aq}=?$, $E^o_{Aq(NH_3)_2/Aq}=?$
- 化学平衡常数和 $\triangle G$ 关系
- 电池电动势和 ΔG 关系
- 温度对蒸气压的影响公式、温度对平衡常数的影响公式、温度对化学反应速率常数的影响公式
- 缓冲溶液pH值计算公式

其它



4.1 同核双原子分子的分子轨道能级图

2s与2p能量差大

2s与2p能量差小

