



# The Shapes and Structures of Molecules

## Part I

### The Electronic Structures of Atoms and Molecules, and Chemical Reactions

### Chapter 3 Reactions

Prof. Dr. Xin Lu (吕鑫)

<http://pcoss.xmu.edu.cn/xlv/courses/fchem1/index.html>

Email: [xinlu@xmu.edu.cn](mailto:xinlu@xmu.edu.cn)

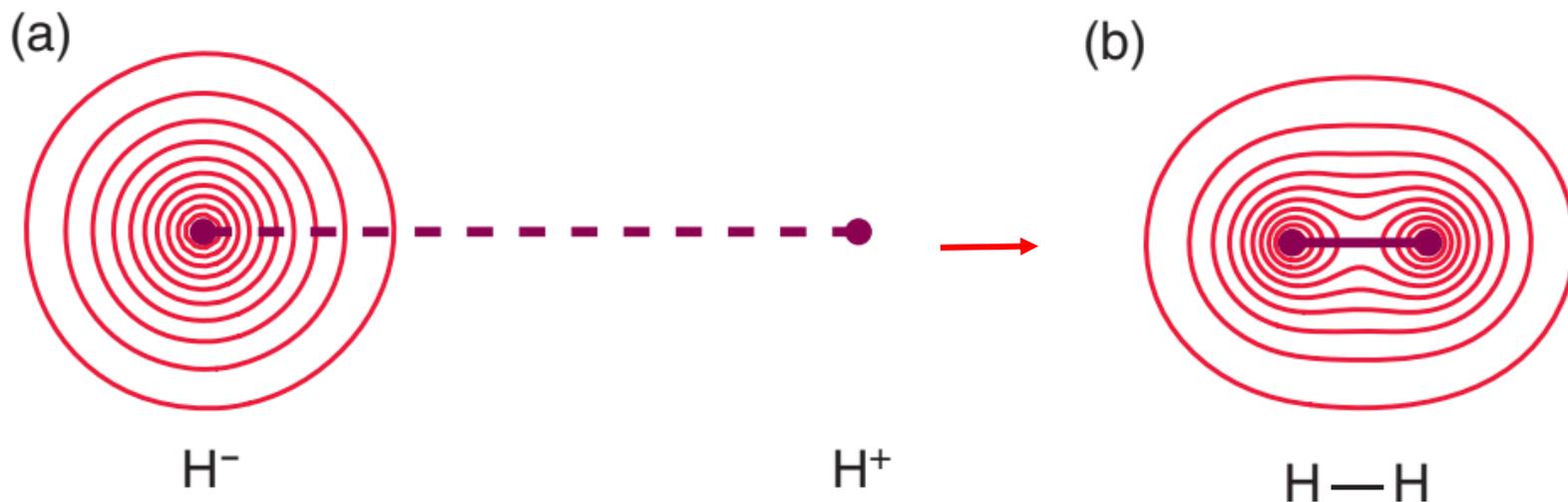


### 3. 反应 (Reactions)

通过对分子轨道能量和形状的理解，可以归纳出分子反应的规律：

- 一个物种中**最高能量的电子**，与另一物种(**合适的空轨道**)相互作用后，其**能量会降低!**
- 由这些高能量电子所属分子轨道的形状可以推测两个物种分子是如何相互作用的。

#### 例1: $\text{H}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2$



- 对复杂分子反应，反应物分子轨道的变化情况更加复杂!
- 如何更简练地描述化学反应呢?

- $\text{H}^-$ 与 $\text{H}^+$ 离子由静电作用吸引靠近，到一定距离后，1s轨道重叠，电荷重排形成H-H共价键!



## 3.1 描述化学反应



### 3.1.1 弯曲箭头 (Curly arrow)

化学家一般用弯(曲)箭头来演示化学反应中电子的重新分布:

- 一个弯箭头表示一个电子对的移动方向;



- 半箭头(或称鱼钩箭头)表示 单个电子的运动方向;





# 3.1.2A 制备硼氢化锂 (lithium borohydride)

(反应过程各分子的LMO间相关性)

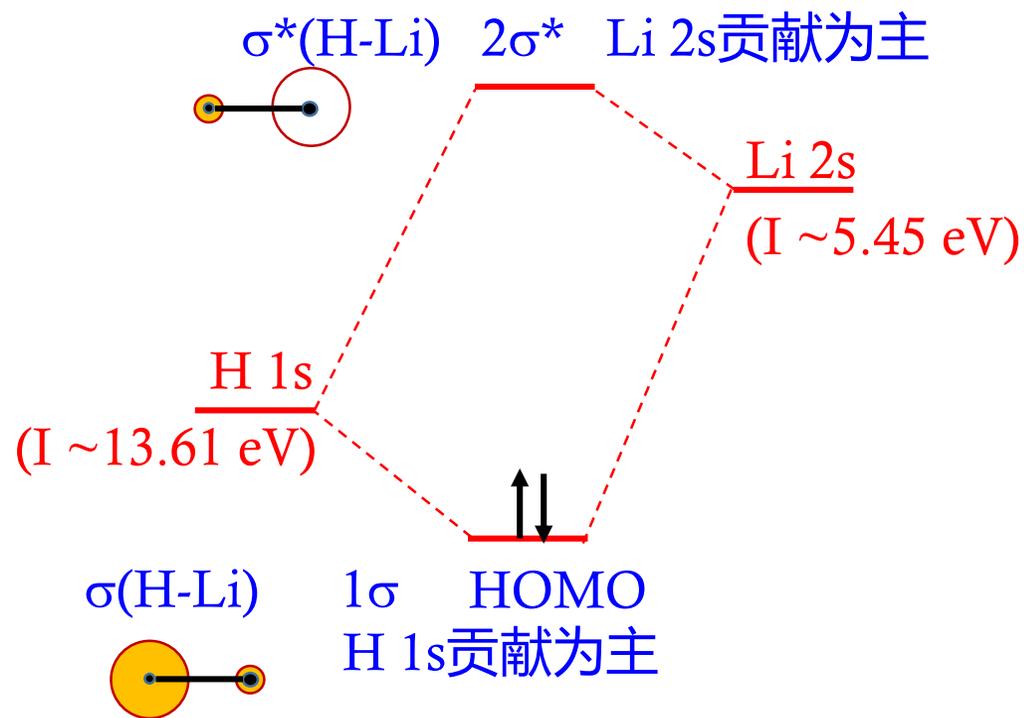
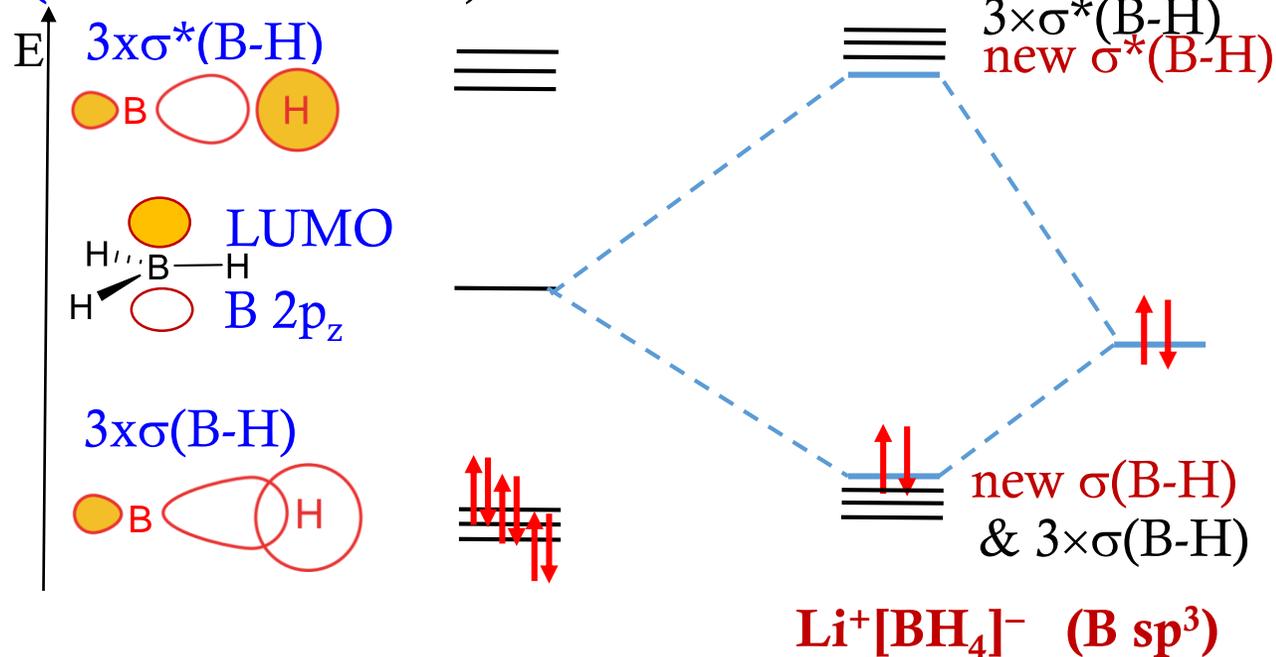
- 将硼烷气体(实际上是乙硼烷 $B_2H_6$ )通入到氢化锂的乙醚溶液中反应生成硼氢化锂:



- $BH_3$  的MOs (平面三角形; 若不知其结构, 可先用VSEPR判断, 再判断杂化轨道类型)

- $LiBH_4$ 是远比 $LiH$ 温和的负氢亲核试剂!
- $LiH$ 的MO (不考虑 $Li$  1s):  $\begin{matrix} (+) & (-) \\ & LiH \end{matrix}$

(7 AOs  $\rightarrow$  7 LMOs):





# 3.1.2B 制备硼氢化锂 (lithium borohydride)

## 反应过程各分子的正则分子轨道间相关性

- 氢化锂与硼烷反应生成硼氢化锂：  

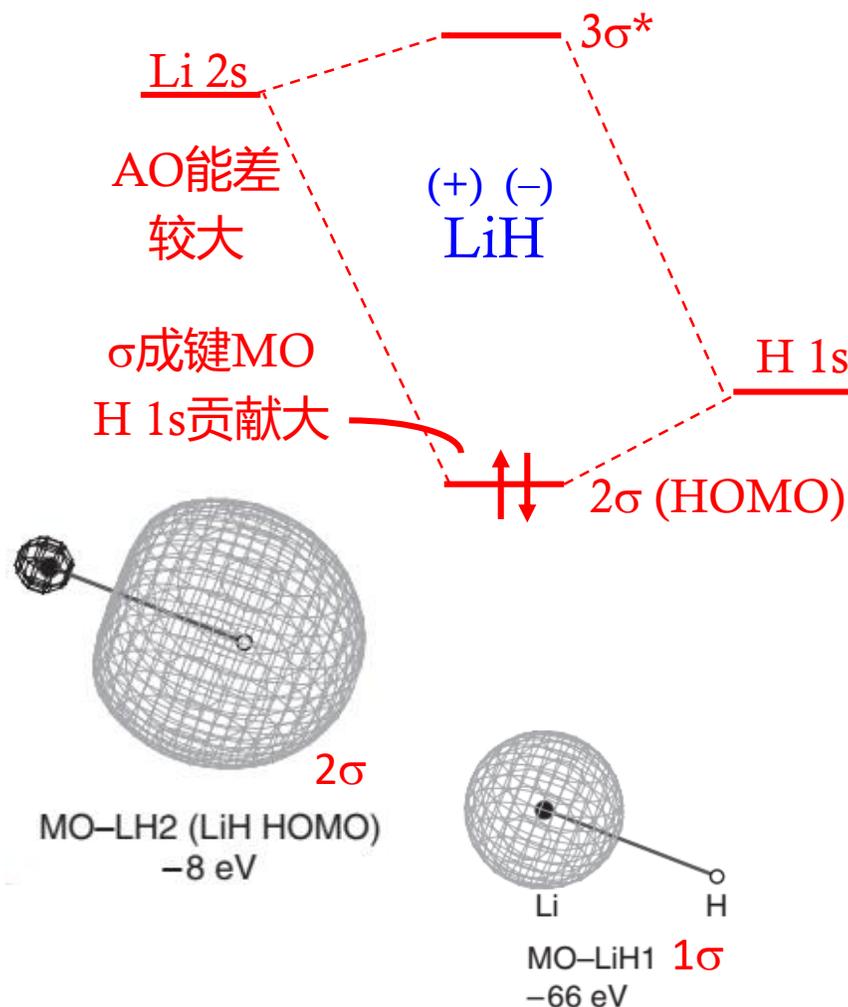
$$\text{LiH} + \text{BH}_3 \rightarrow \text{LiBH}_4$$
- 将硼烷气体(实际上是乙硼烷 $\text{B}_2\text{H}_6$ )通入到氢化锂的乙醚溶液中就能发生该反应；
- 首先考虑LiH的分子轨道(QM计算结果):

Li 1s 能量极低且收缩，不参与成键

→ LiH最低能量 $1\sigma$  MO (-66 eV)

Li 2s (IE~5.45 eV) & H 1s (IE~13.6eV)

→ LiH  $2\sigma$  MO 极性强、离子性明显!



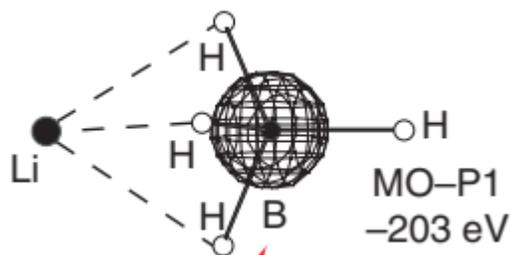
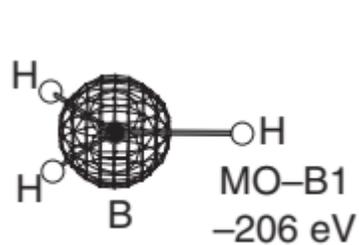


## 3.1.2B 制备硼氢化锂 (lithium borohydride)

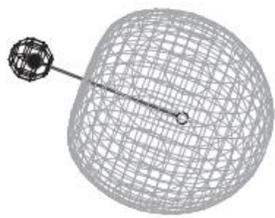


### 反应过程各分子的正则分子轨道间相关性

- $\text{BH}_3$  和产物  $\text{LiBH}_4$  中能量最低的分子轨道为 B 1s AO 所贡献，因更大的  $Z_{\text{eff}}$ ，其能量比 Li 1s AO 低得多， $\sim 203 \text{ eV}$ 。

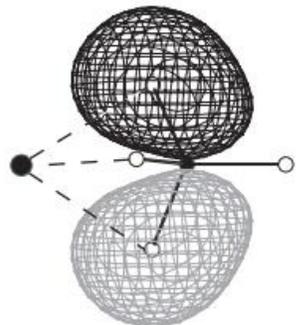


Lithium hydride MOs



MO-LH2 (LiH HOMO)  
-8 eV

Lithium borohydride MOs

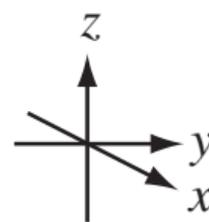


MO-P6 (LiBH<sub>4</sub> HOMO)  
-11 eV

Borane MOs

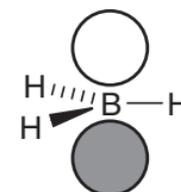


MO-B5 (BH<sub>3</sub> LUMO)  
+2 eV if occupied



非键  
(B 2p<sub>z</sub>)

# LiH、BH<sub>3</sub>、LiBH<sub>4</sub> 分子轨道及其能量

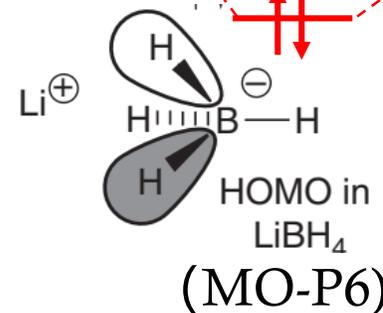


Unoccupied MO

LUMO  
of BH<sub>3</sub>  
(MO-B5)



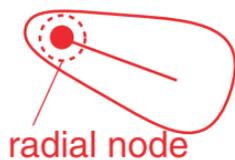
HOMO  
of LiH  
(MO-LiH2)



成键MO  
(B 2p<sub>x</sub> + H1s)

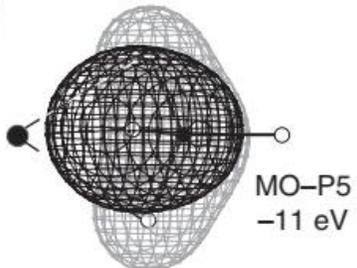
成键MO  
(B 2p<sub>y</sub> + H1s)

成键MO  
(B 2s + H1s)

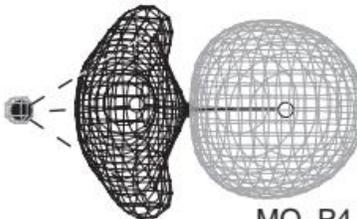


成键MO  
(B 2p<sub>z</sub> + Hs)

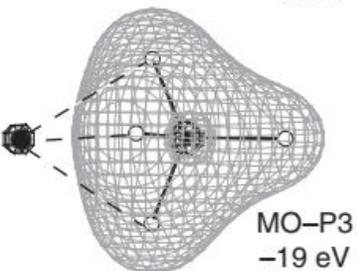
反应与产物  
中这部分轨道相似!



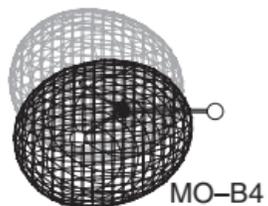
MO-P5  
-11 eV



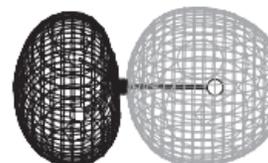
MO-P4  
-12 eV



MO-P3  
-19 eV



MO-B4  
-14 eV



MO-B3  
-14 eV

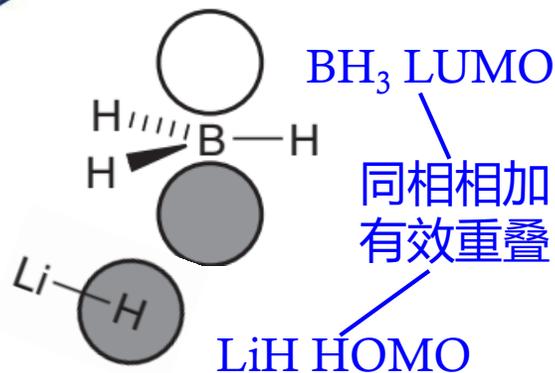


MO-B2  
-19 eV

反应过程各分子的正则分子轨道间相关性



# 反应机理



这是常用的表达方式！！  
但是隐含了使用者对反应物  
与产物分子轨道图像的理解！

both e<sup>-</sup> in bond left,  
leaving lithium as the  
+ve ion

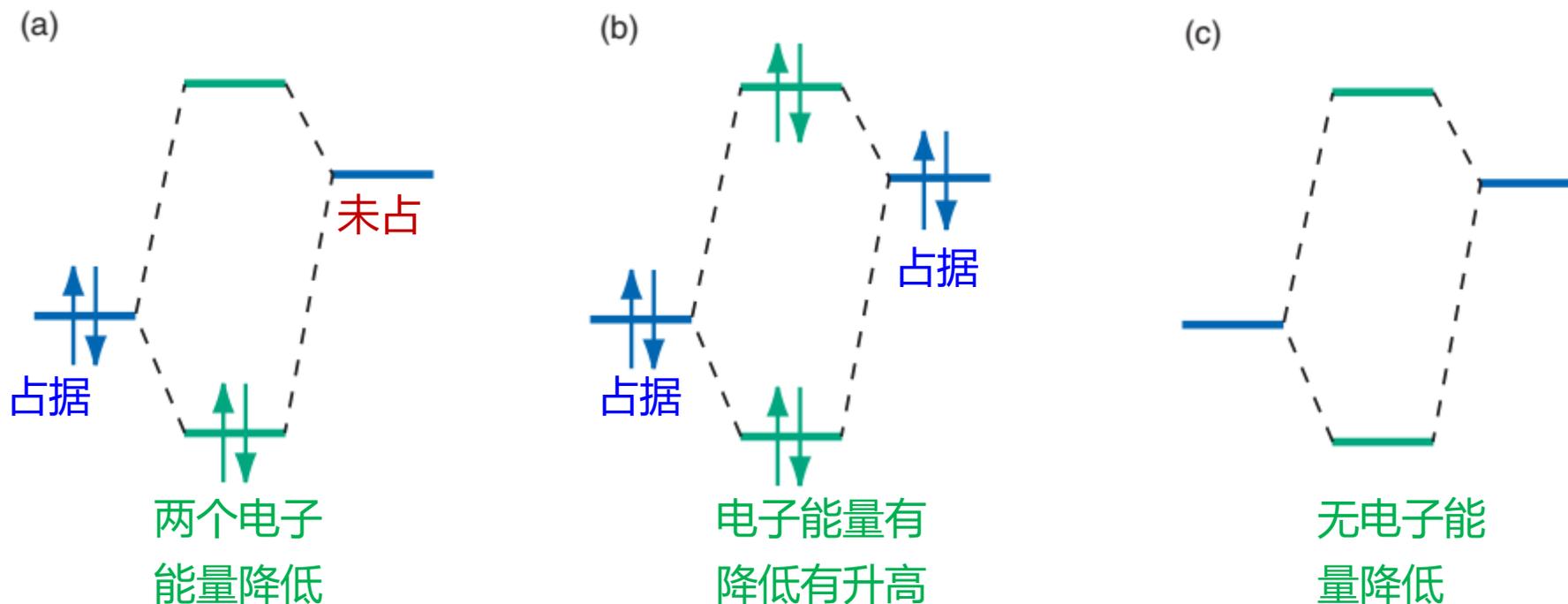
## 3.1.3 小结

- ◆ 产物的分子轨道可以看成是由反应物的分子轨道相互作用形成的；
- ◆ 反应物和产物的一部分分子轨道在反应前后几乎保持不变；
- ◆ 化学反应中最重要的相互作用一般发生在一个反应物的HOMO与另一反应物的LUMO之间，导致反应物中最高能量电子的能量降低；（即无须同时关注所有MOs的变化！）
- ◆ 弯箭头机理可以帮助我们理解反应中关键轨道的相互作用



## 3.2 HOMO-LUMO相互作用

- ◆ 一个分子的**占据轨道**与另一分子的空轨道相互作用（**能够相互作用的前提是什么？**）会导致**电子能量**的降低，这是分子间发生化学反应的驱动力！

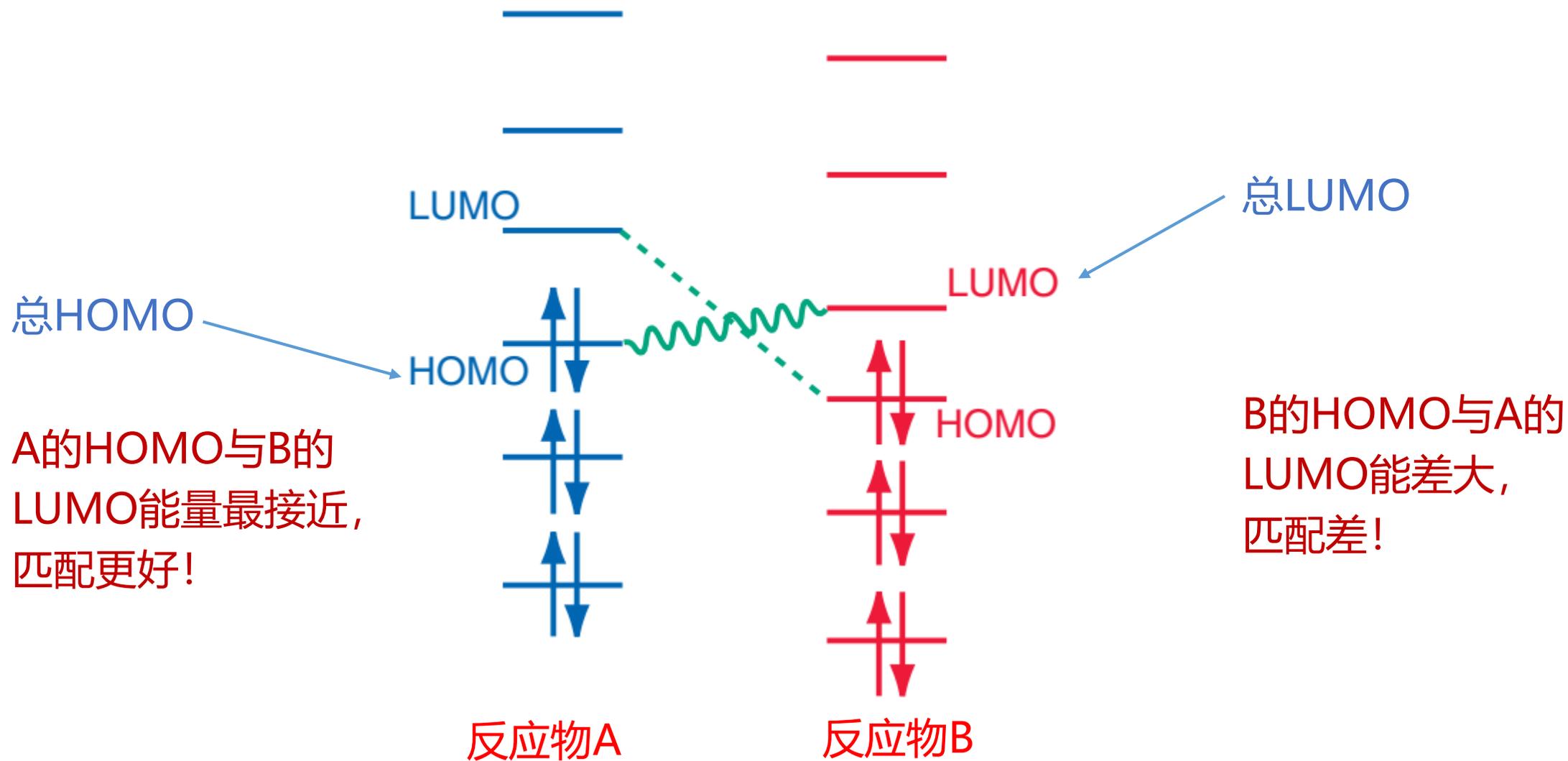


- ◆ 但是，两个物种的**占据轨道间或空轨道间的相互作用并不产生这种效果！**
- ◆ 因此，我们时常关注反应物间的HOMO-LUMO相互作用，以理解反应的微观机制！



# HOMO-LUMO相互作用

- ◆ 两个反应物间存在**两组**HOMO-LUMO相互作用，**能量最近那组的相互作用最强**





# HOMO-LUMO相互作用—反应的对称性规律(化学史)



- 前线分子轨道理论(**Frontier molecular orbital theory, FMO**):  
由福井谦一 (K. Fukui)于上世纪五十年代初提出. (*J. Chem. Phys.* 1952, 20, 722.)
- 轨道对称性守恒原理(**The Principle of Orbital Symmetry Conservation**):  
由 R.B. Woodward (1965诺贝尔化学奖) 和 R. Hoffmann提出. (*JACS*, 1965, 87, 395.)
- Fukui 和 Hoffmann获1981年诺贝尔化学奖.



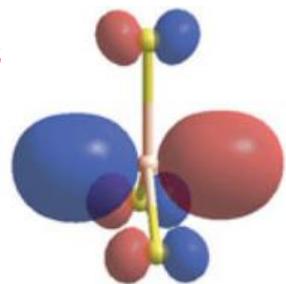
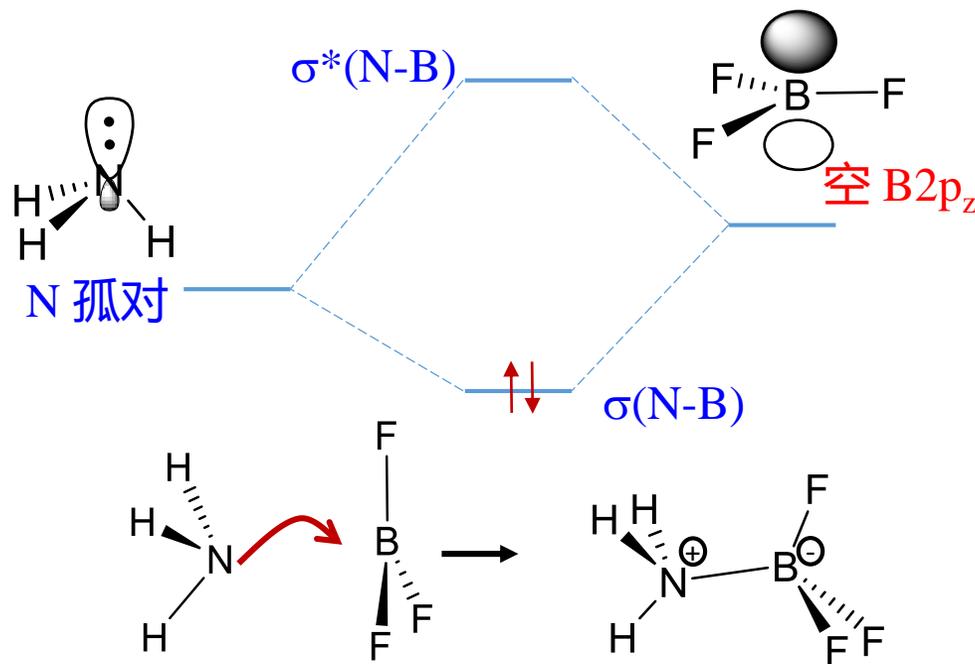
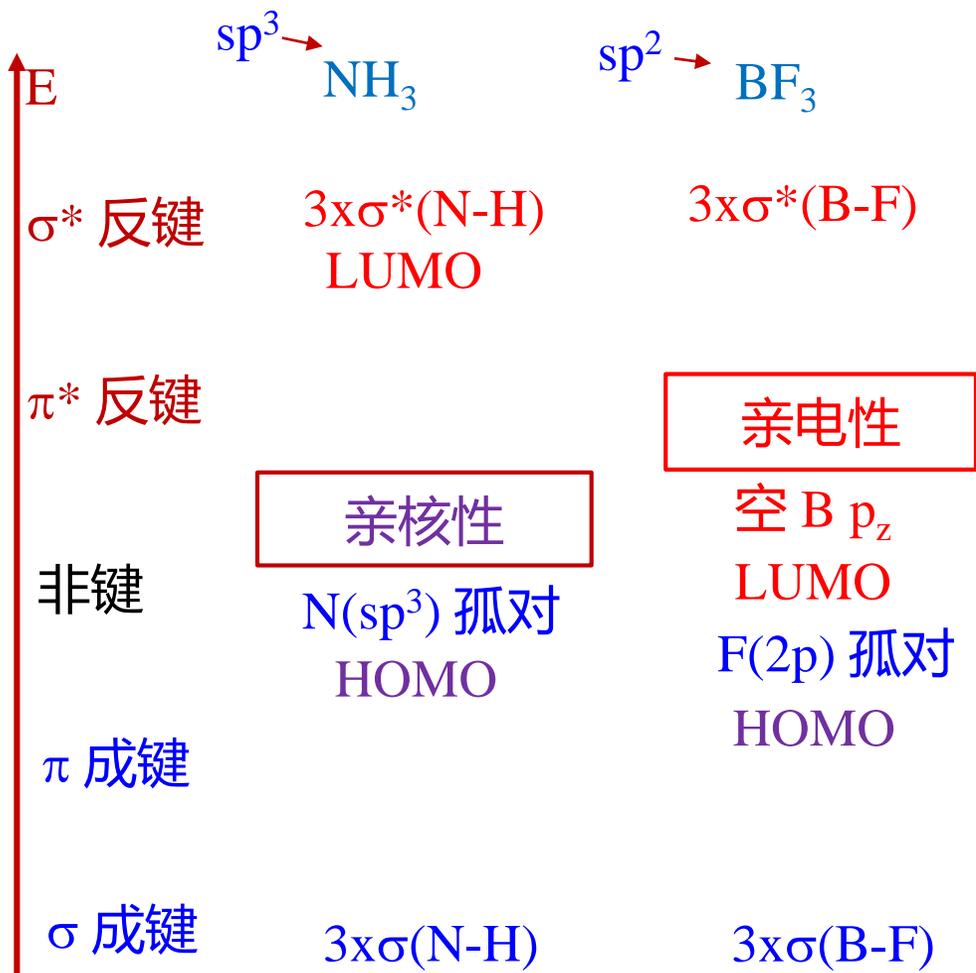


# 3.2.1 HOMO-LUMO相互作用实例

◆ 分子轨道能级相对顺序规律 --- 帮助判断分子中的HOMO与LUMO轨道!

• 原理上应使用离域分子轨道图像, 为简便起见日常多使用定域分子轨道图像!

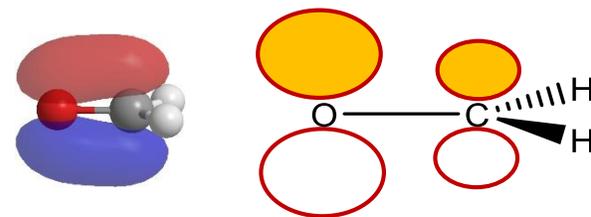
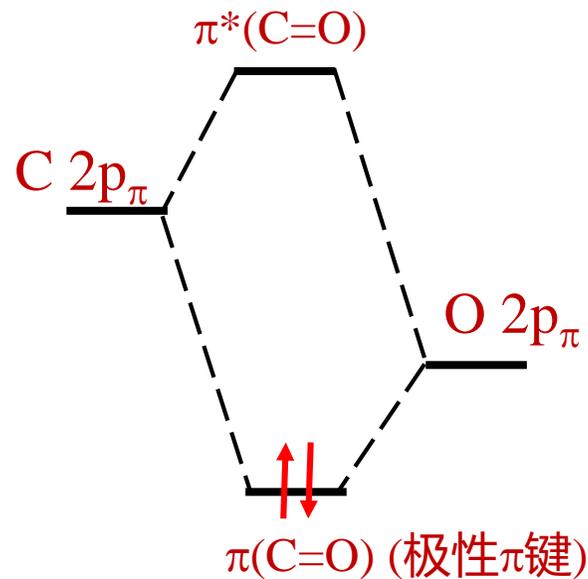
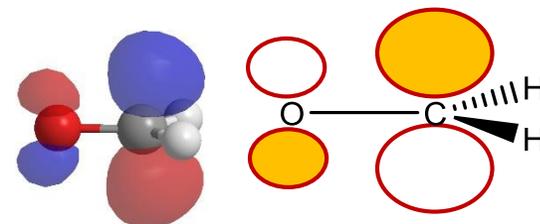
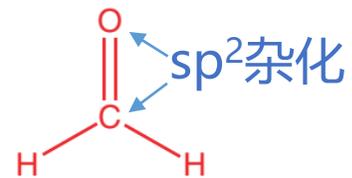
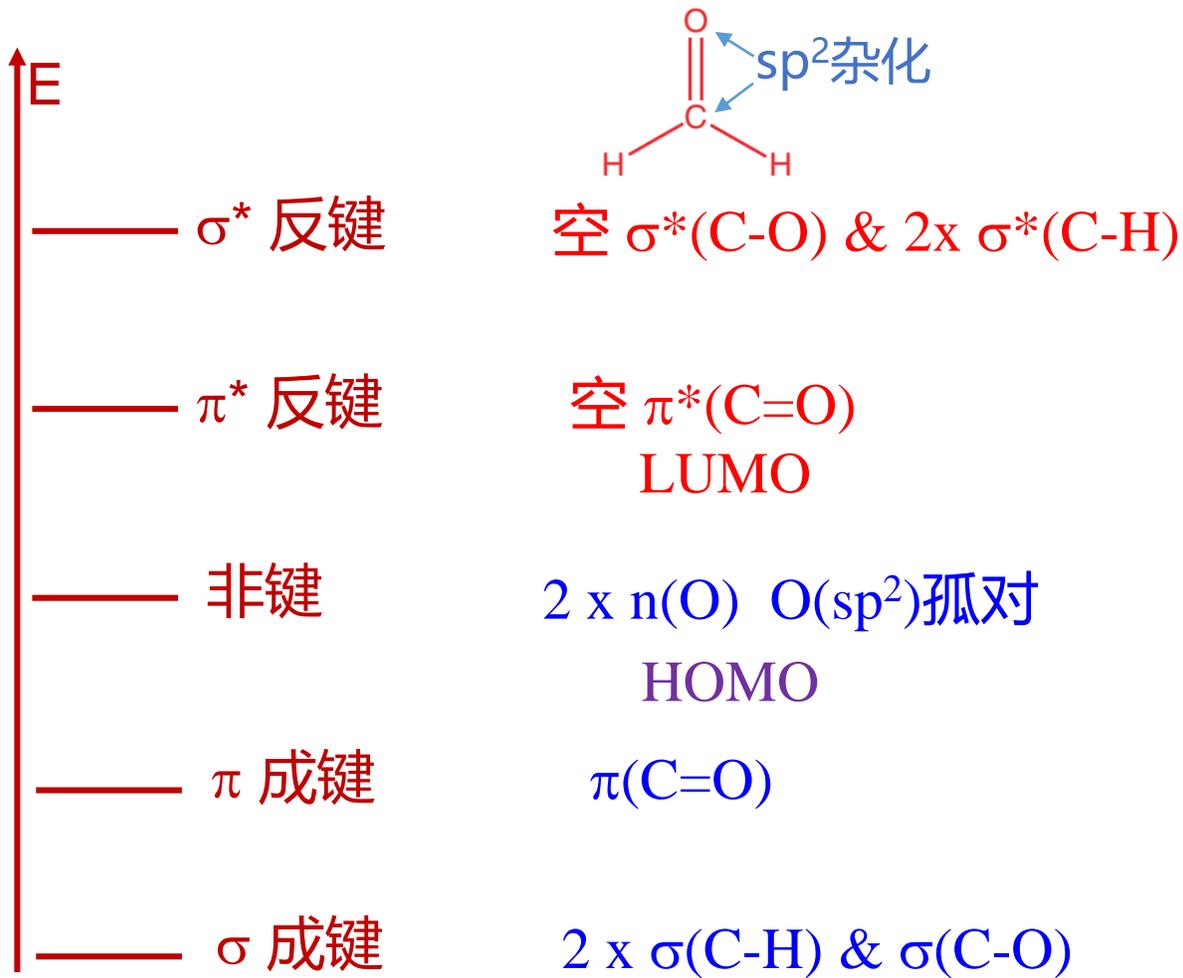
- 先判断分子结构 (VSEPR) 和杂化轨道类型
- 分析各分子的 $\sigma$ 键骨架、 $\pi$ 键、非键 ...!
- $\text{NH}_3$ 和 $\text{BF}_3$ 的反应及机理



$\text{BF}_3$  正则分子轨道的LUMO, 主成分为  $B2p_z$ .



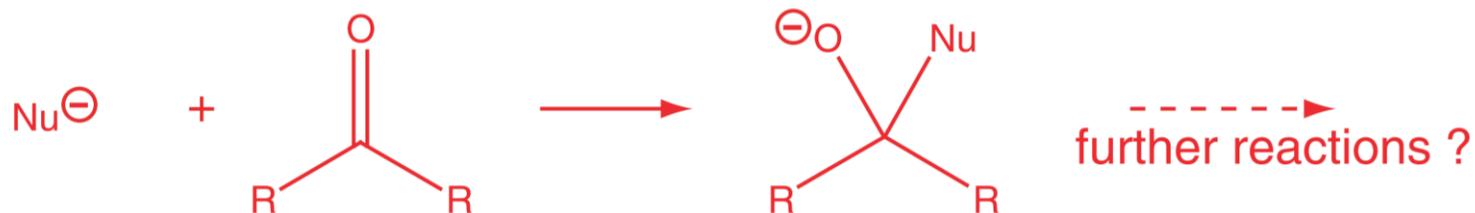
# Q: 判断CH<sub>2</sub>O分子的HOMO&LUMO (LMO图像!)





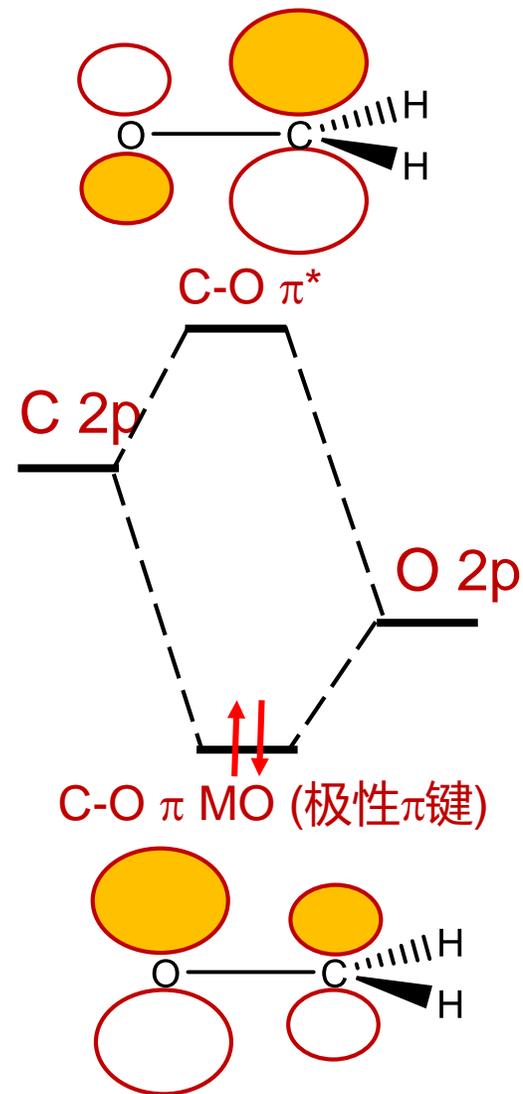
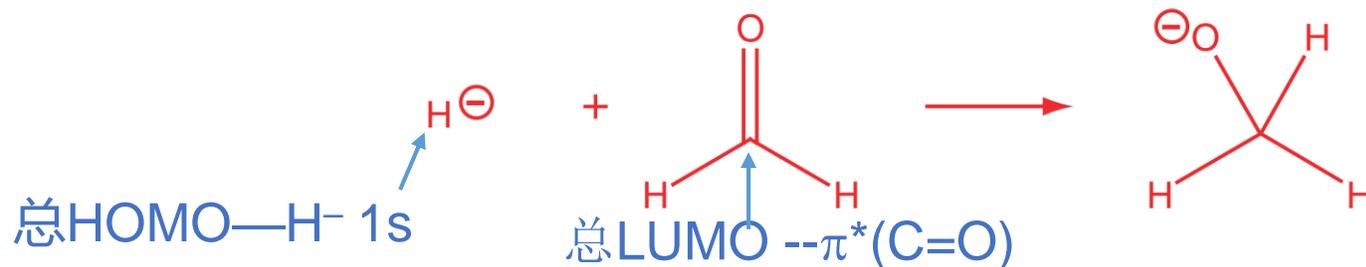
### 3.3 对羰基的亲核加成 (nucleophilic addition to the carbonyl group)

- ◆ 亲核物种(nucleophile),  $\text{Nu}^-$ , 进攻羰基打开其 $\text{C}=\text{O}$   $\pi$ 键形成新键 – 一类重要反应!



常用亲核物种:  $\text{OH}^-$ 、 $\text{CN}^-$ 、还原剂如 $\text{ABH}_4$ (负氢添加剂,  $\text{A}=\text{Li}, \text{Na}$ ,  $\text{B}=\text{B}, \text{Al}$ )、烷基锂( $\text{R-Li}$ )等

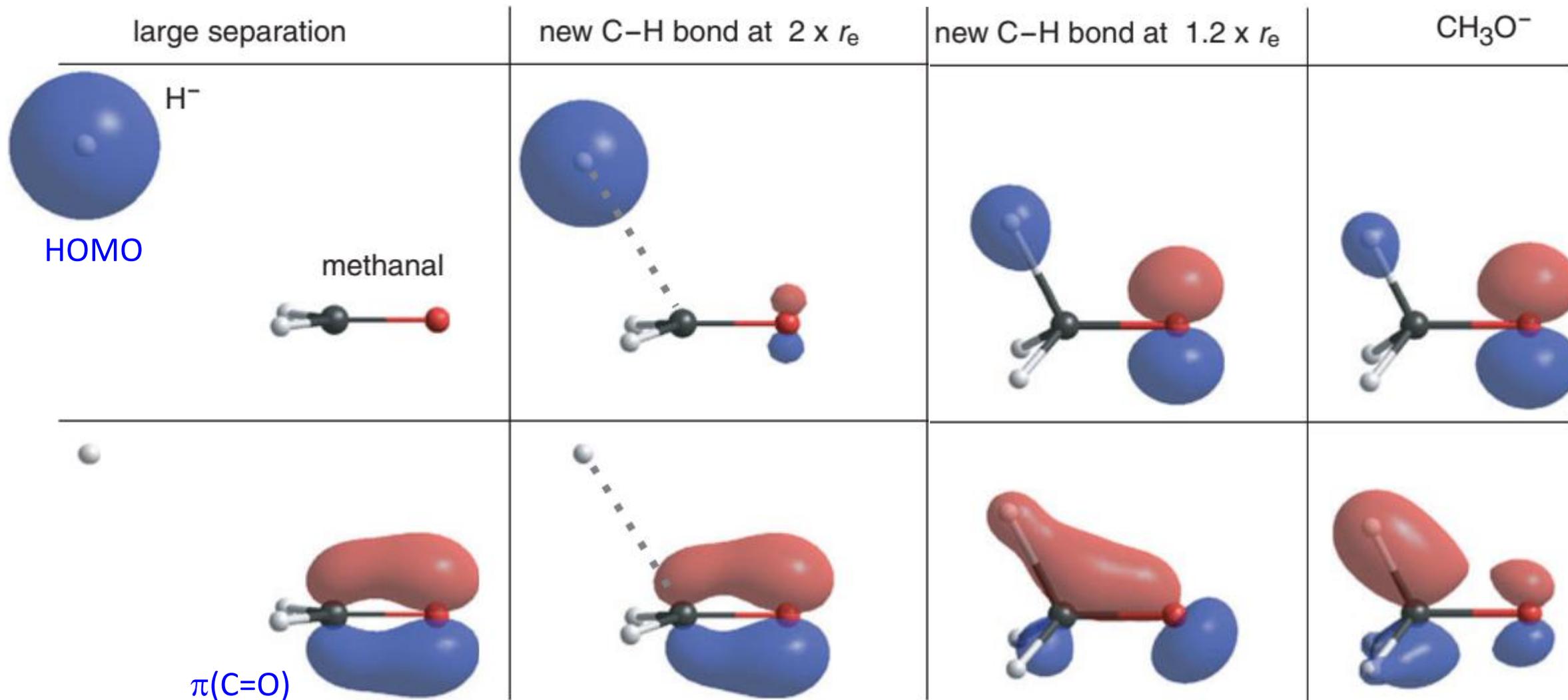
- ◆ 例: 负氢亲核进攻(简化模型, 实际使用 $\text{YH}_4^-$ ,  $\text{Y}=\text{B}, \text{Al}$ )





### 3.3.1 对羰基亲核加成：轨道相互作用机制

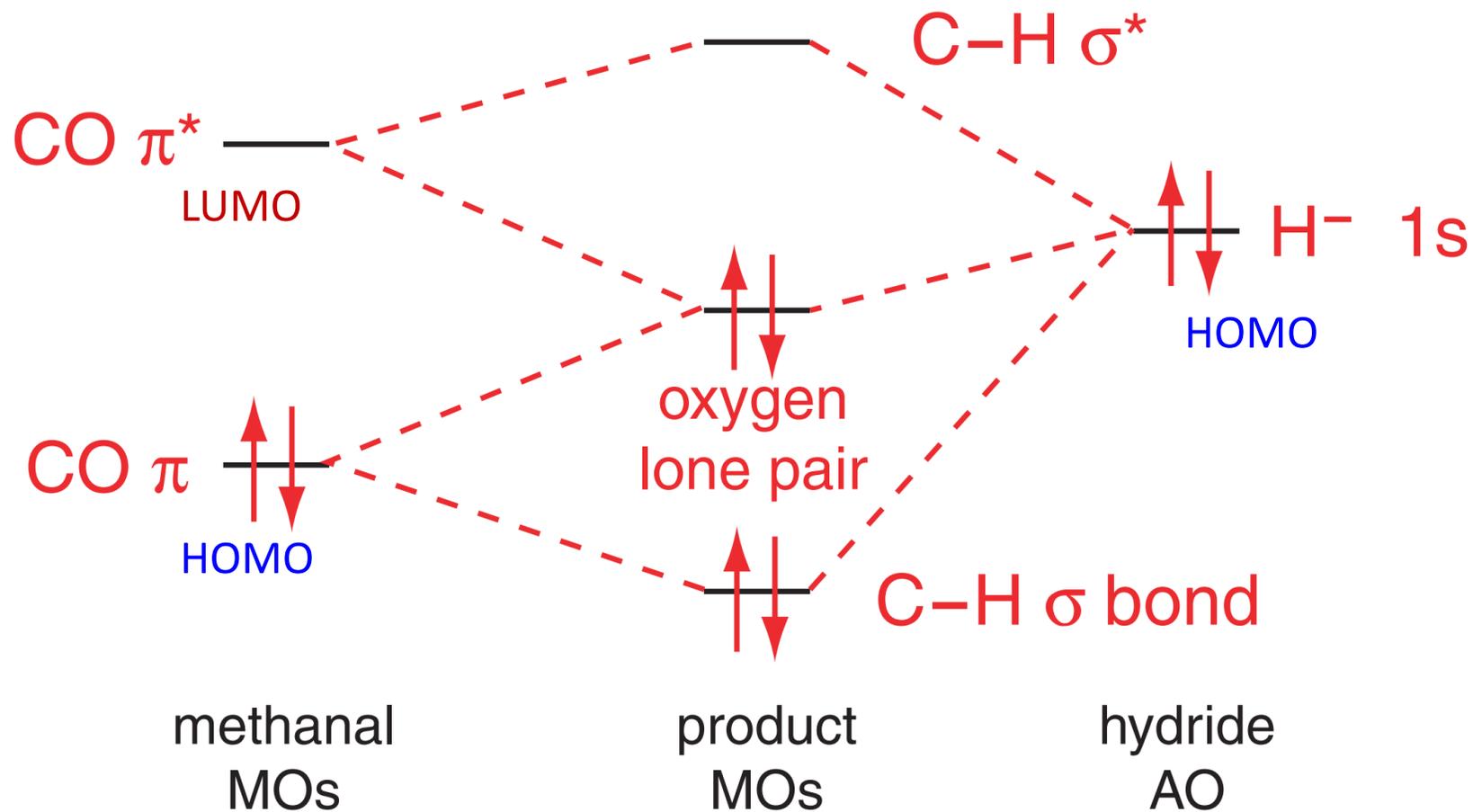
负氢亲核进攻羰基 - C=O  $\pi$ 键断裂过程的轨道演变过程 (QM计算, 离域分子轨道图像)





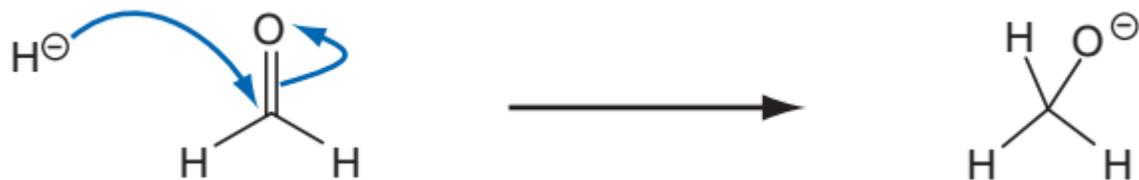
### 3.3.1 对羰基亲核加成：轨道相互作用机制

负氢对羰基亲核加成反应的前线轨道能级相关图



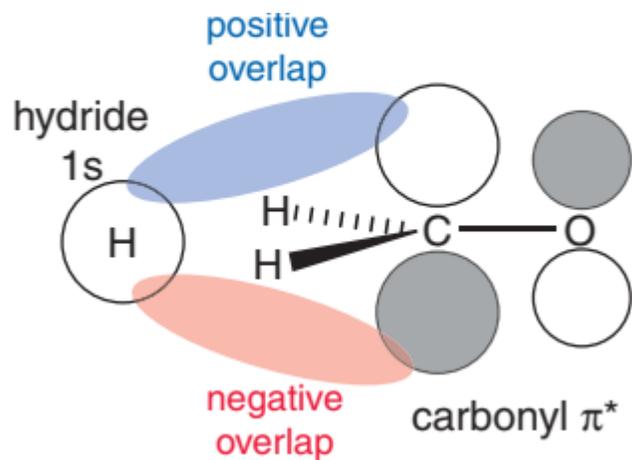


# ◆ 弯箭头机理



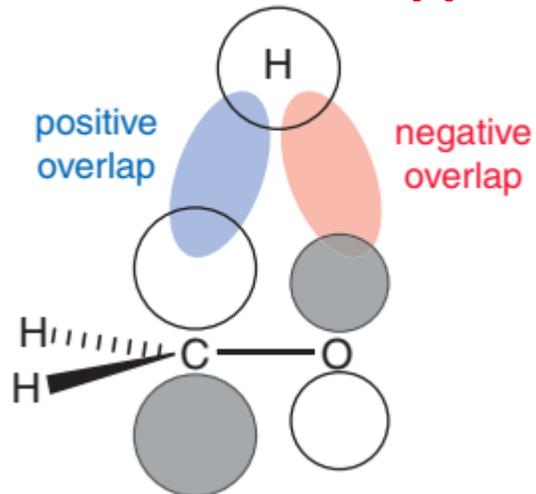
# ◆ 亲核进攻的几何模式

(a) 面内进攻 **X**



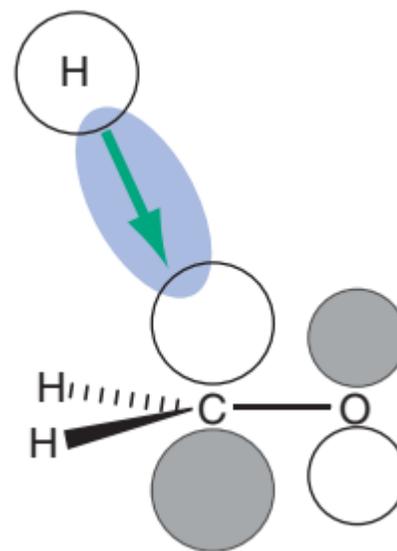
对称性不匹配  
电子对排斥能极大

(b) 正上方进攻 **X**



对称性不匹配  
占据轨道间排斥能较大

(c)

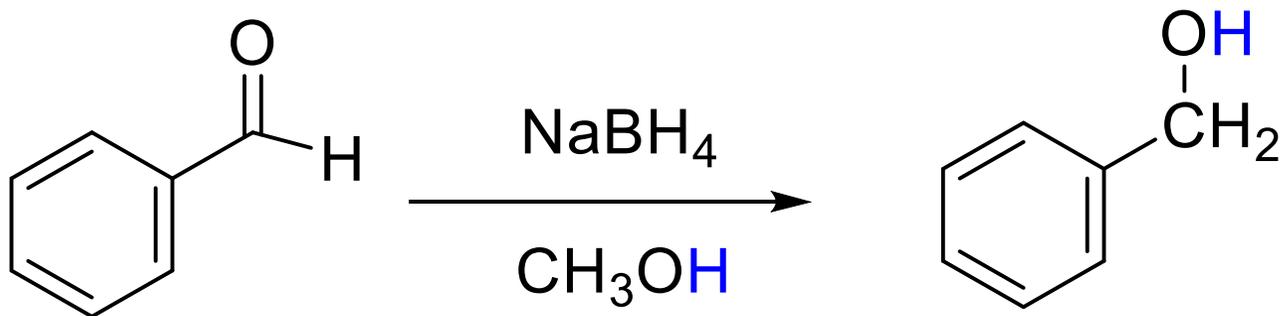


$\angle\text{HCO} \sim 107^\circ$

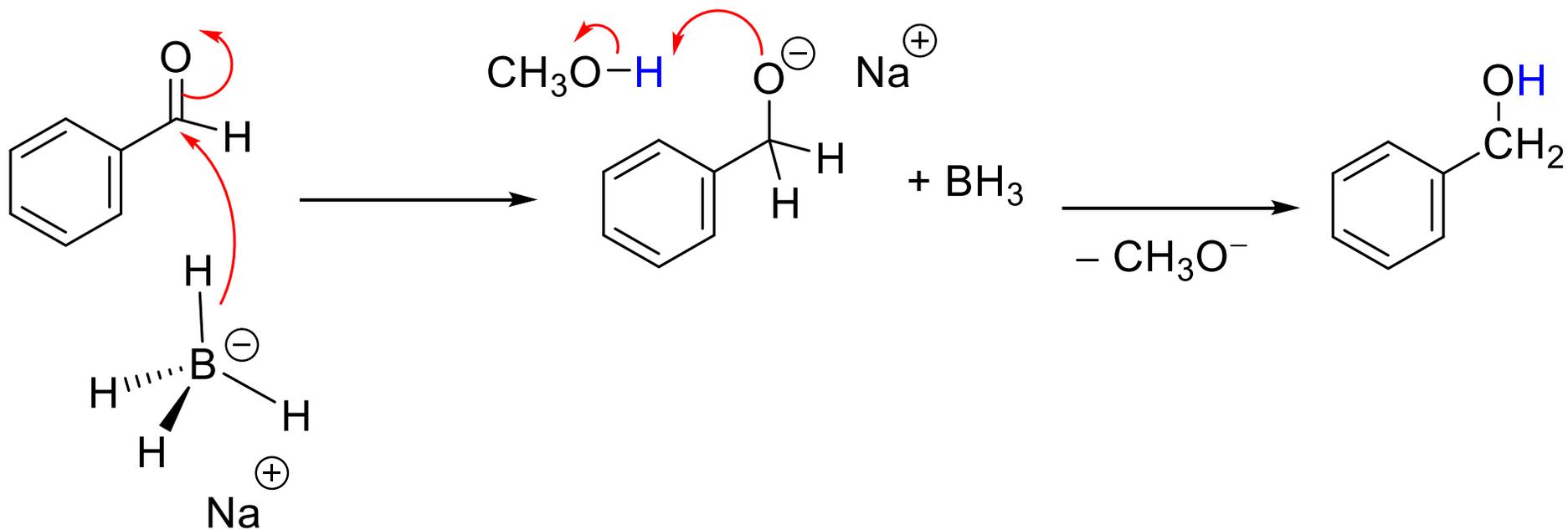
- 最大轨道重叠
- 最小的占据轨道间排斥能!  
(回顾VSEPR)



# 负氢亲核加成到羰基的反应实例



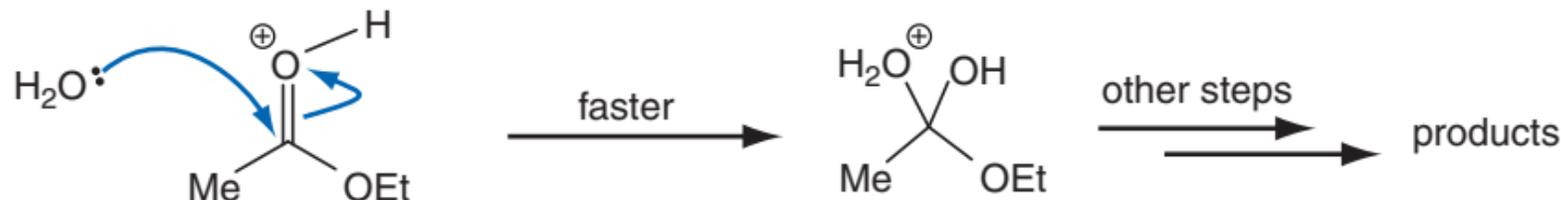
## • 机理





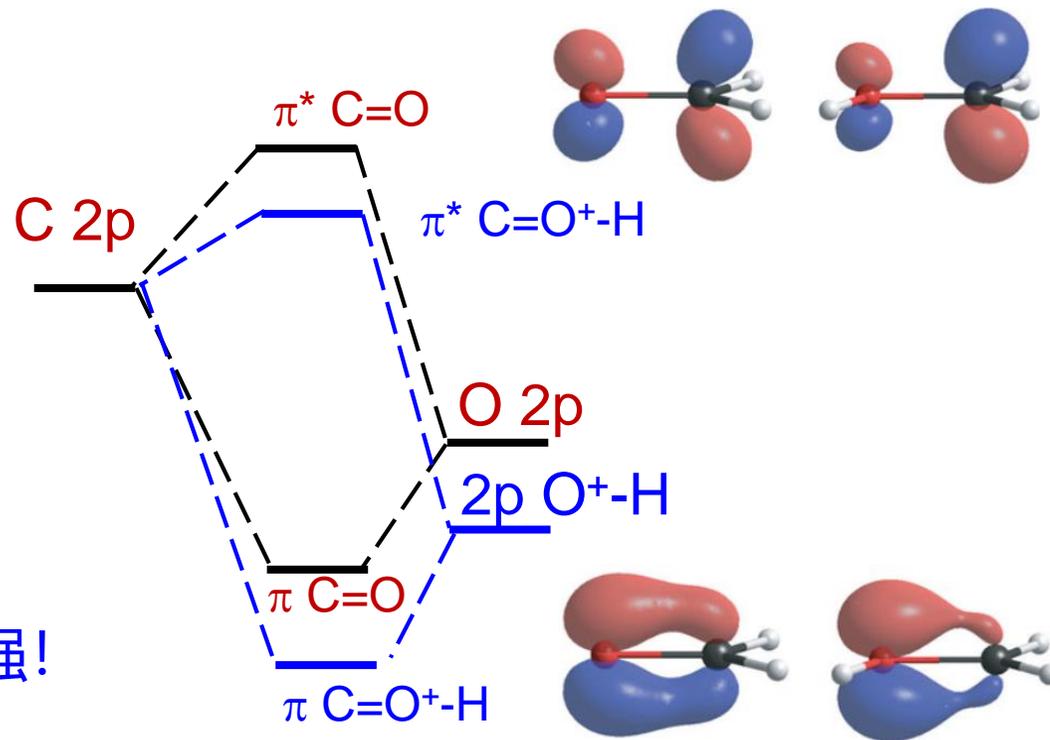
### 3.3.2 对羰基亲核加成：质子或路易斯酸催化机制

- 羰基质子化或与金属阳离子配位后，会更有利于亲核加成反应，例如乙酸乙酯水解反应在pH=1时比在pH=7时快数千倍！



- 质子或 $M^{n+}$ 配位到羰基O端的效果：

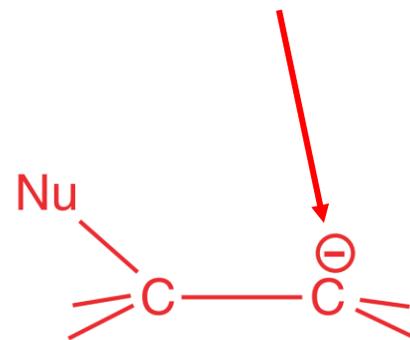
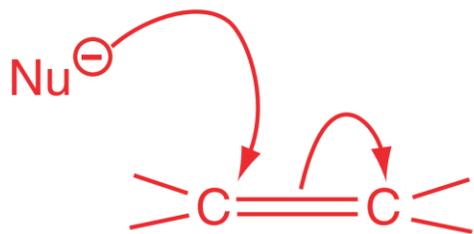
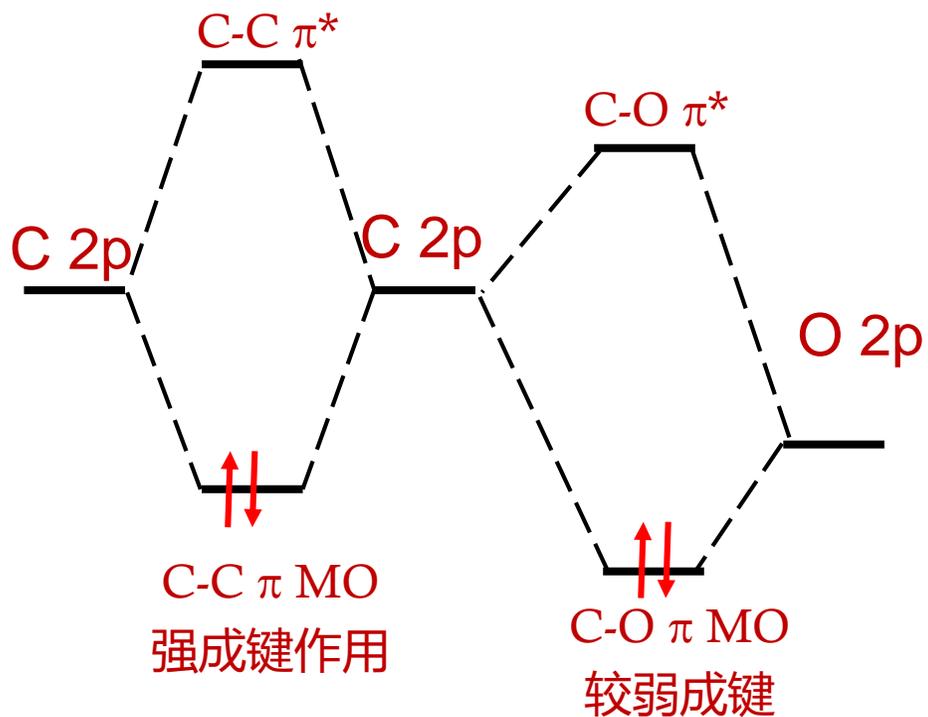
- 1) 共享了羰基O的孤对电子密度
- 2) 提升了O原子价层的有效核电荷！
- 3) C=O  $\pi$  成键轨道的极性更强，能量更低；
- 4) C=O  $\pi^*$  轨道能量更低，亲电反应性明显增强！





### 3.4 对其它 $\pi^*$ 轨道的亲核加成: $C=C$ vs $C=O$

- ◆ 对烯烃 $C=C$ 键的亲核加成一般不易发生: 不具极性, 且反键轨道能量过高!



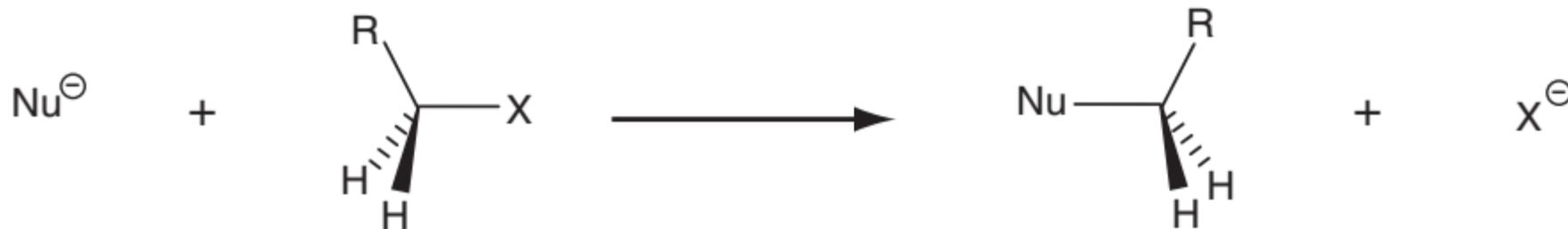
该分子轨道中  
电子能量过高!



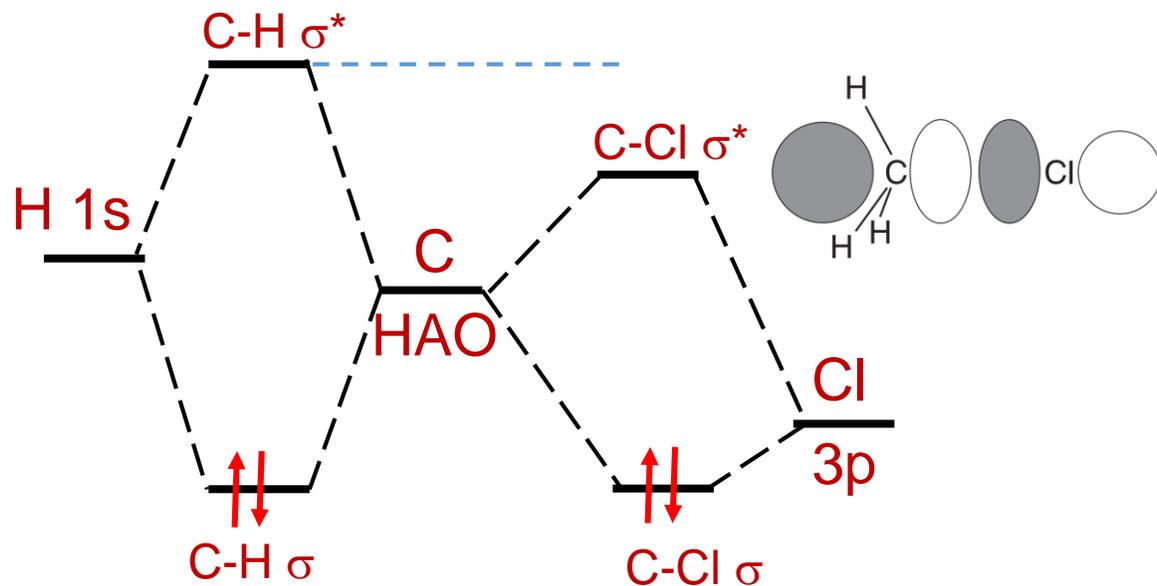
## 3.5 亲核取代



- ◆ 亲核物种(的HOMO)进攻分子的 $\sigma^*$  MO, 导致分子的 $\sigma$ 键断裂, 形成新的 $\sigma$ 键!



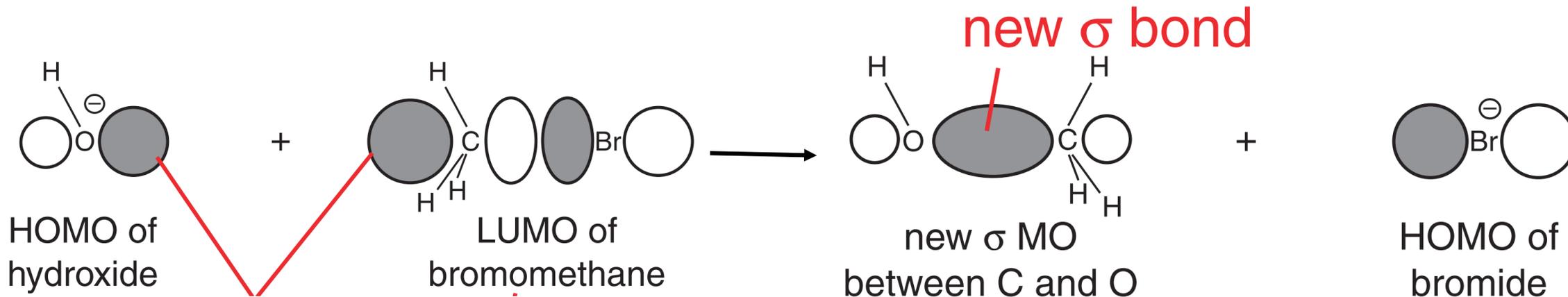
- ◆ 卤代烃如 $\text{CH}_3\text{X}$  ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) 是常见的发生C-X键活化取代的反应物种。



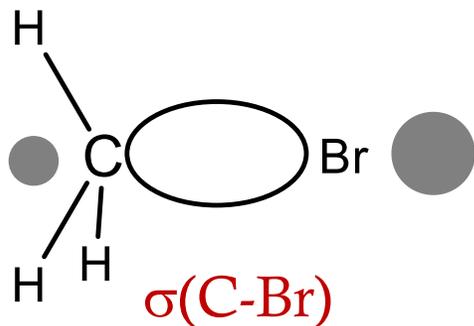
- C-Cl  $\sigma$  成键较弱: 两组分AOs在能量和尺寸(C 2p vs. Cl 3p)两方面的匹配度都比较差!
- C-Cl  $\sigma^*$  亲电性远强于 C-H  $\sigma^*$ , 主要组分为C HAO.



# 3.5 亲核取代



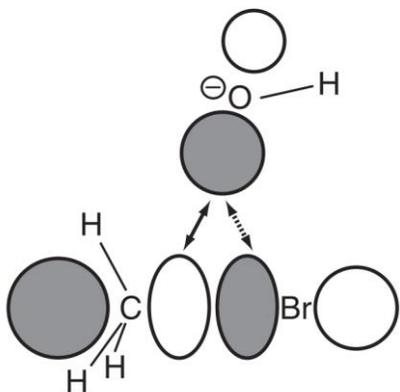
可形成新的成键相互作用  
 $\sigma^*(\text{C}-\text{Br})$  MO



Q: 请借鉴 负氢亲核进攻羰基的轨道相关图, 构筑该取代反应的轨道相关图。

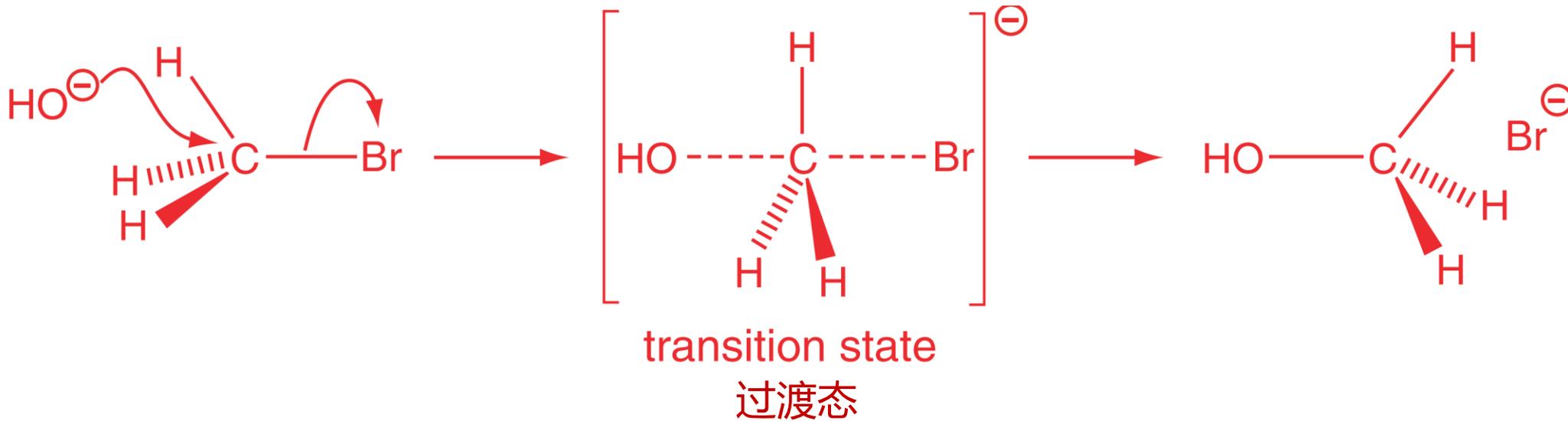


# 3.5 亲核取代



无有效成键作用, 且  
与C-Br  $\sigma$ 键电子排斥

Q: 若过渡态结构中 $\text{CH}_3$ 可看成是 $\text{sp}^2$ 杂化, 设O-C-Br为z轴, O、C、Br等用价层 $p_z$ 轨道参与形成过渡态结构的三中心键, 试画出过渡态结构中O-C-Br三中心键的分子轨道能级图

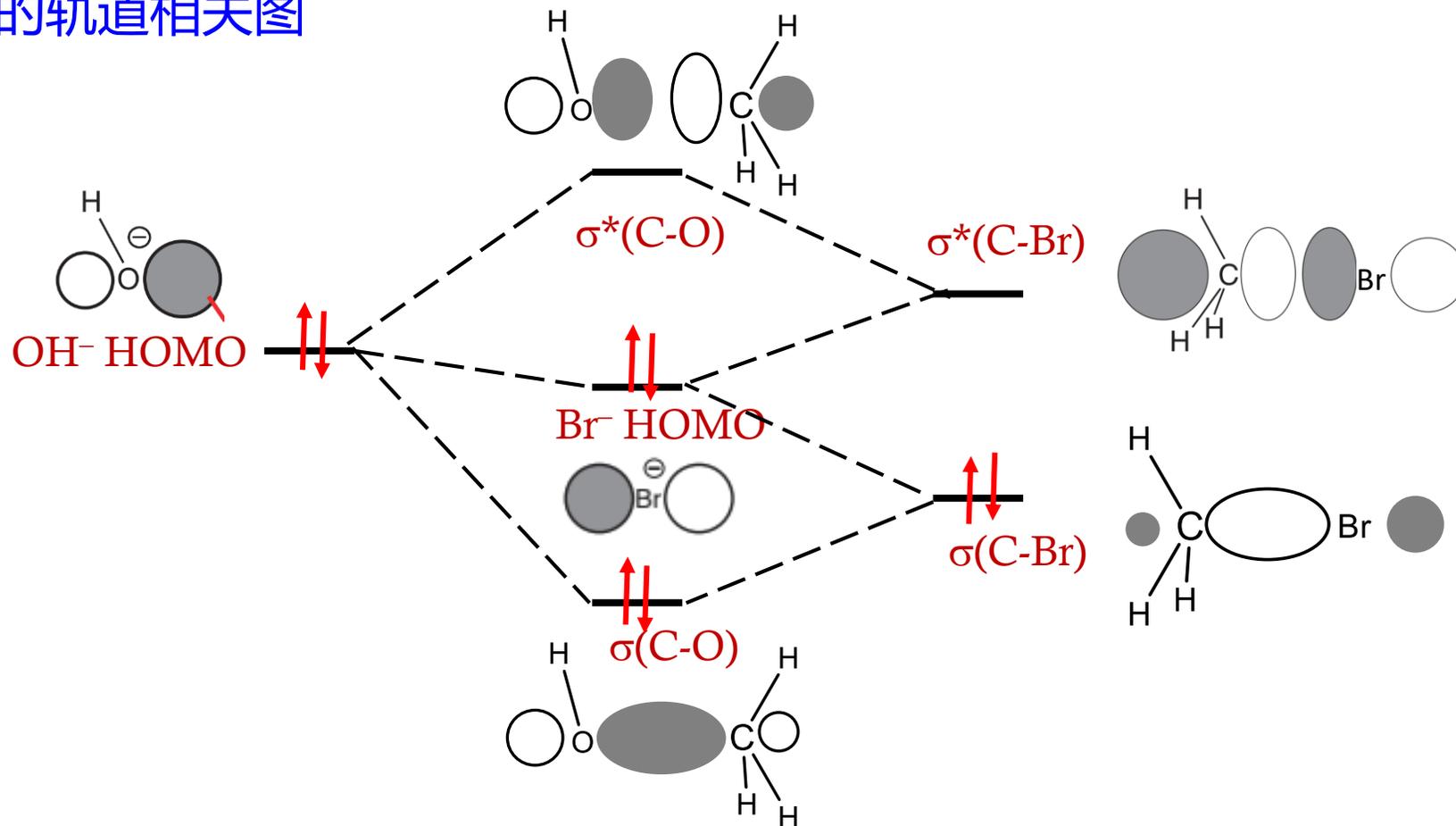




# 3.5 亲核取代



反应物-产物的轨道相关图





## 3.6 分子内轨道相互作用

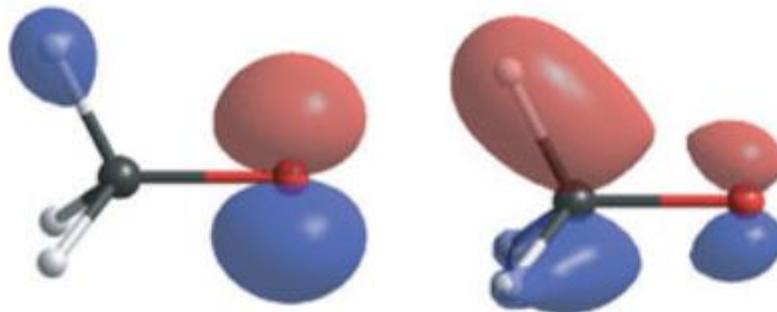
◆ 通过前面的学习，我们知道对分子间轨道相互作用的描述与理解可使用：

- 正则分子轨道(CMO)图像：更准确，但不太便于直观想象！
- 定域分子轨道(LMO)图像：不太准确，但因符合所谓的“化学直觉”而便于直观想象！

后者因而是绝大多数(实验)化学家的最爱！

◆ “**分子内轨道相互作用**”指的是分子内LMOs间的相互作用，而正则分子轨道则会自然且内禀地考虑了分子内(对称性匹配的)各原子轨道间的相互作用！

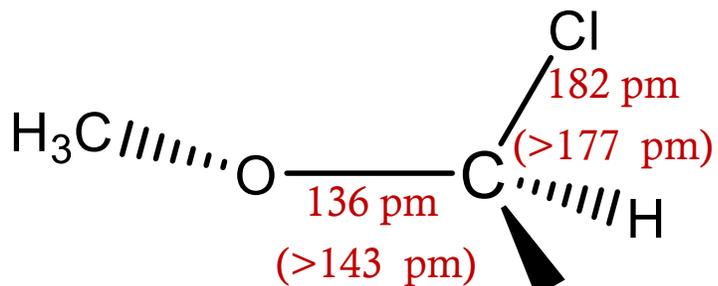
例如， $\text{CH}_3\text{O}^-$ 的两个占据CMOs：





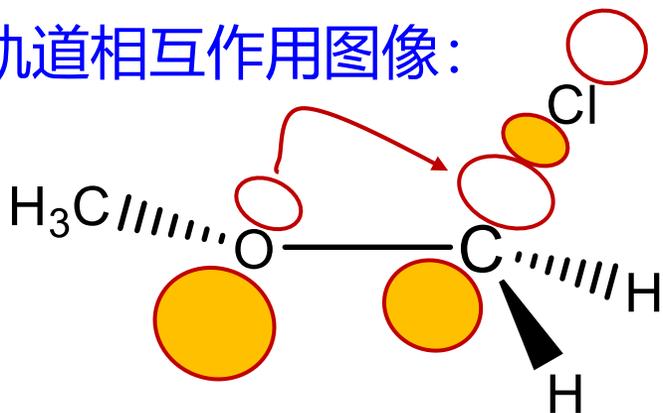
### 3.6.1 分子内轨道相互作用与反应性

例2:  $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{Cl}$



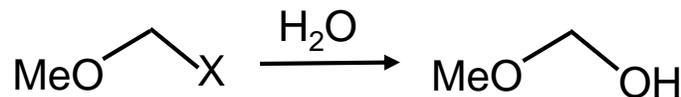
LUMO  $\sim \sigma^*(\text{C-Cl})$   
 HOMO  $\sim n(\text{Cl } 3p)$   
 $\sim 2 n(\text{O } sp^3)$

轨道相互作用图像:



$n(\text{O } sp^3) \rightarrow \sigma^*(\text{C-Cl})$   
 (LUMO)

- 因  $n(\text{O}) \rightarrow \sigma^*(\text{C-Cl})$  的相互作用 -- 超共轭 或  $\sigma$ 共轭 (hyperconjugation)
- O-C键长比一般O-C单键略短
- C-Cl键长比一般C-Cl单键略长  $\rightarrow$  易发生异裂!



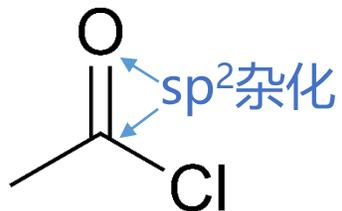
	relative rates
X = OMe	1
X = Cl	$3.8 \times 10^9$

画出上述水解反应的机理(思考题)

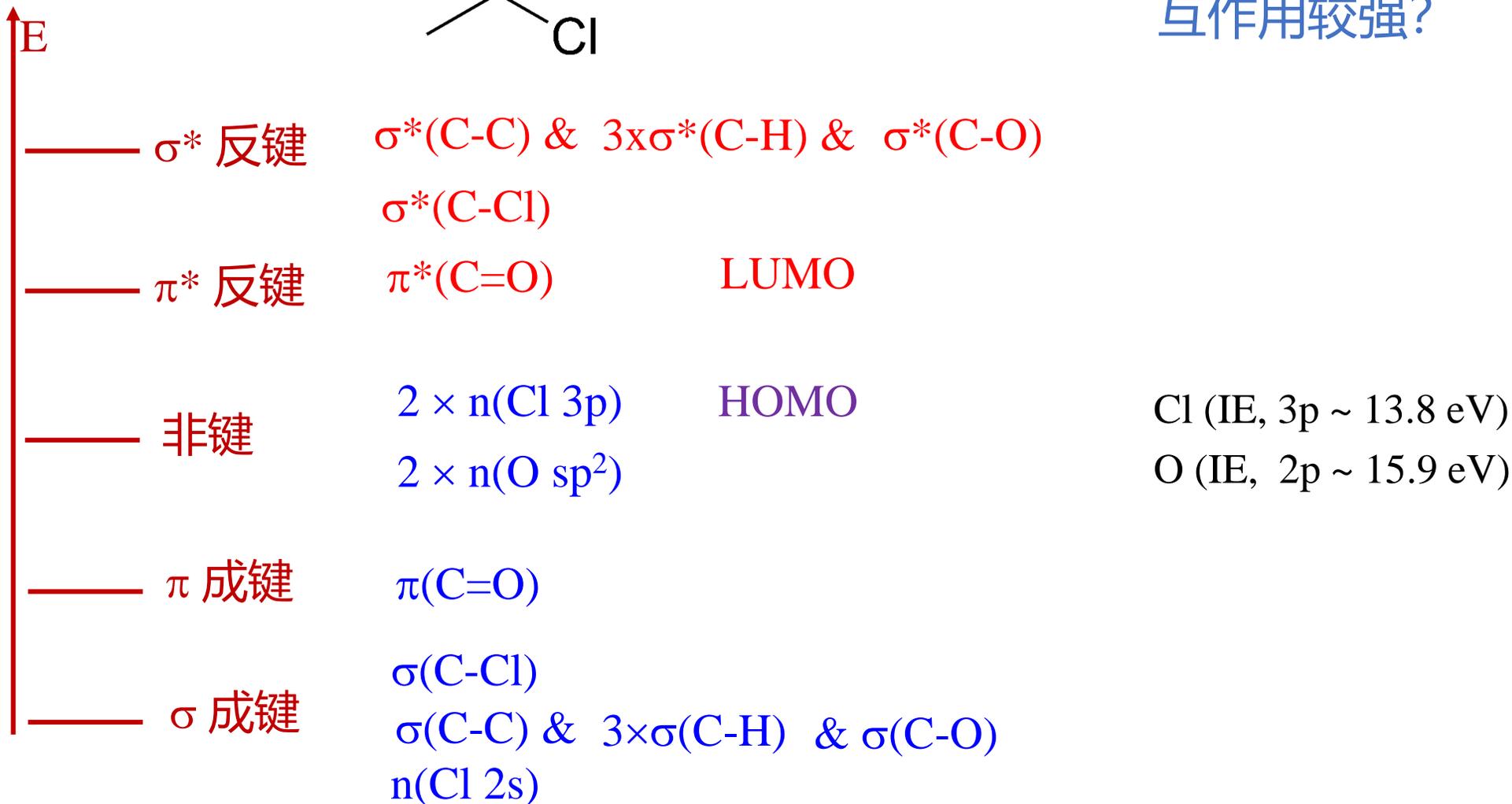


# Q: 判断乙酰氯(CH<sub>3</sub>COCl)的HOMO&LUMO (LMO图像!)

Acetyl chloride



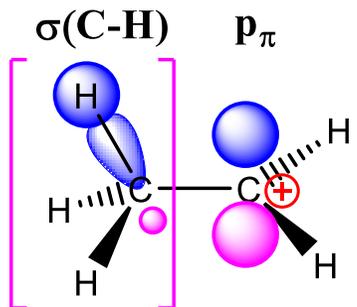
有哪些分子内轨道相互作用较强?





### 3.6.2 分子内轨道相互作用

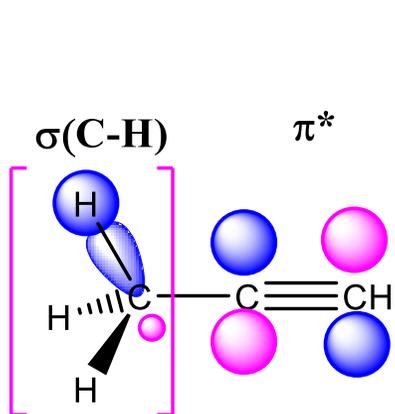
常见的超共轭效应: C-H  $\sigma \rightarrow$  空  $p_{\pi}$  AO ( $C^+$ ) or  $\pi^*$  MO

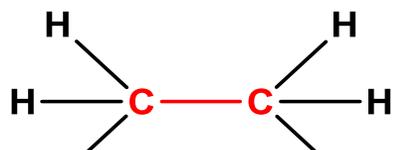
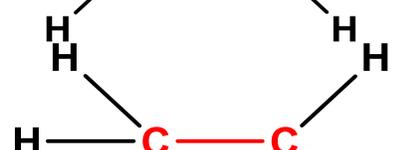


碳正离子稳定性顺序:



$H_3C-C(sp^n)$  HAO-HAO bond length (Å) bond energy(kJ.mol<sup>-1</sup>)



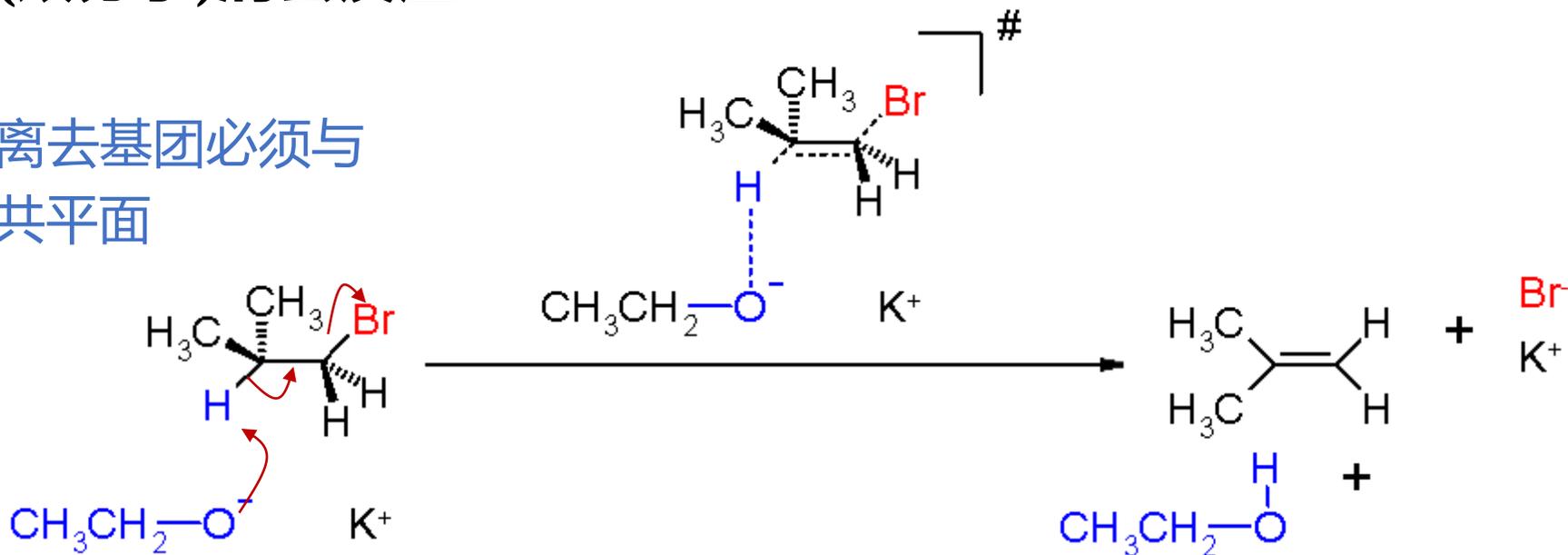
	$sp^3-sp^3$	HAO 的S成分越多, 轨道能量越低 越收缩!	1.54	346.3	超共轭效应增强 ↓ C(sp <sup>3</sup> )-H 的质子酸性增强
	$sp^3-sp^2$		1.51	357.6	
	$sp^3-sp$		1.46	382.5	



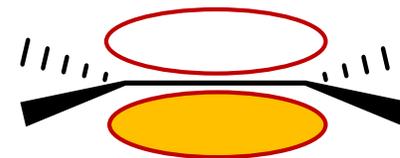
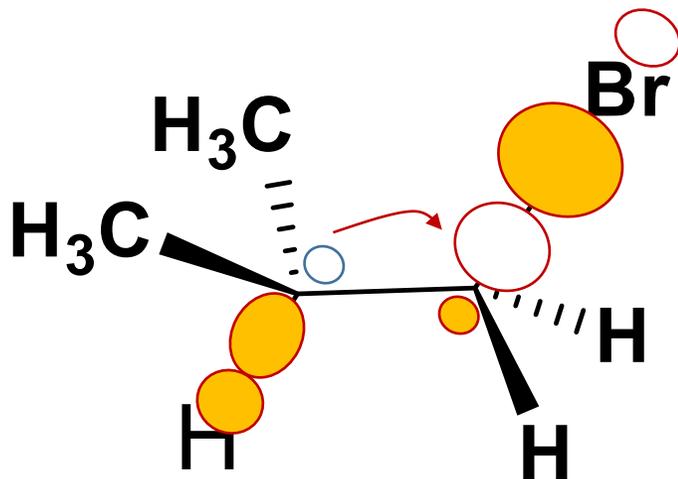
### 3.6.3 E2(双分子)消去反应



► 立体专一性： 离去基团必须与消去的β氢反式共平面



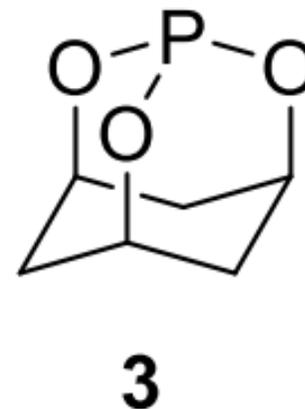
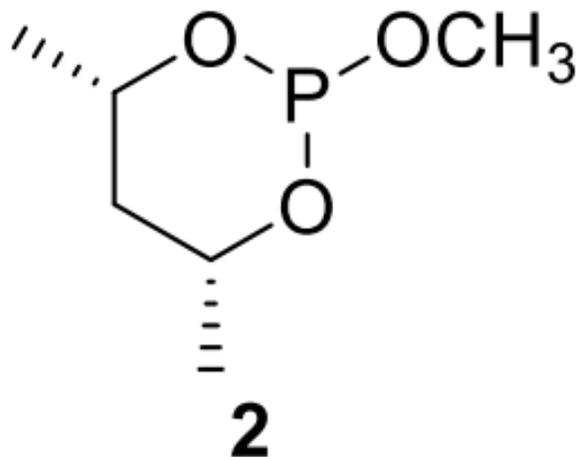
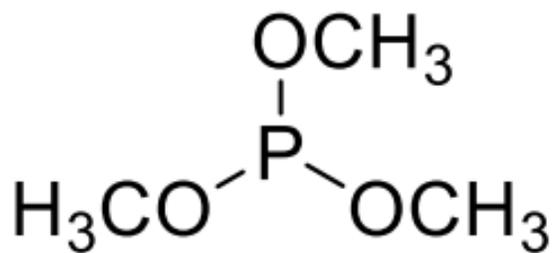
LUMO:  $\sigma^*(\text{C-Br})$



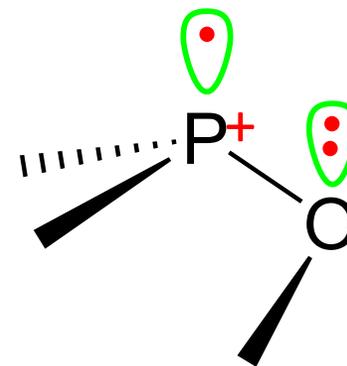
分子内轨道相互作用提升了H(-C)的质子特性 (亲电性)



### 3.6.4 分子内相互作用与电离势



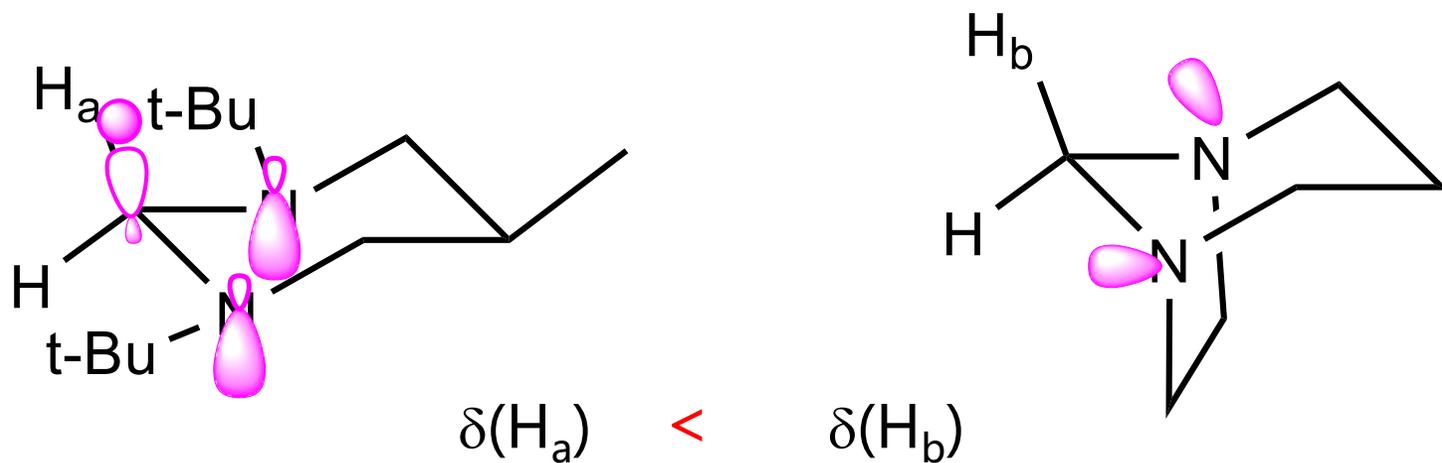
- 哪个分子的电离势最小？（第37届全国化竞决赛第二场题）
- LMO图像下, 各个分子的HOMO?
- 分子内轨道相互作用: 电离前 or 电离后?





### 3.6.5 分子内相互作用与NMR化学位移

$^1\text{H}$  NMR 化学位移值  $\delta(\text{H})$  大小比较 (提示: H核外电荷密度越低,  $\delta(\text{H})$ 越大)



$n(\text{N}) \rightarrow \sigma^*(\text{C}-\text{H}_a)$  的相互作用

$\text{H}_a$ 更富电子, 化学位移更高场!



# End of Part II

作业:

- 习题: 27-32
- 复习: pp. 319-342, PW&JK



# 基于量子力学的原子、分子结构理论



电子运动状态：分立能级--能量量子化、波函数(原子轨道、分子轨道)--空间量子化  
**原子结构**

## 单电子原子--氢原子、类氢离子

◆ 电子能级： $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} R_H$

( $n$ 为主量子数, 里德堡常数 $R_H = 13.6 \text{ eV}$ )

◆ 原子轨道  $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$

**轨道类型(形状)** — 电子运动的轨道角动量量子数 $l$

$(0 \leq l \leq n-1) \quad l = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \dots$

AO类型:  $s \quad p \quad d \quad f \quad g \quad h \dots$

**轨道方向** — 磁量子数  $m_l$  ( $-l \leq m_l \leq l$ ), 有 $2l+1$ 个可及取值

◆ 能级简并度 $g$ --能量相同的原子轨道数(不考虑电子自旋)

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

◆ 电子自旋—自旋量子数 $s(=1/2)$ 及自旋磁量子数 $m_s(\pm 1/2)$

## 多电子原子--单电子近似(轨道近似)

◆ 电子能级： $E_i = -R_H \times \frac{Z_{eff,i}^2}{n_i^2}$

( $Z_{eff} = Z - \sigma$  ~ 相应原子轨道的有效核电荷;  
 $\sigma$ ~原子中其它电子对核电荷的屏蔽效应)

◆ 原子轨道~类氢原子轨道  $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$

◆ 钻穿效应:  $ns > np > nd > nf$

→ 同一主量子数原子轨道能级分裂:

$$E(ns) < E(np) < E(nd) < E(nf)$$

(同一亚层的AO能量简并!)

◆ 周期律: 同一周期由左至右, 原子价层轨道的 $Z^*$ 不断增大, 轨道能级能量愈来愈低, 电离能愈来愈大, 原子电负性愈来愈强!



# 基于量子力学的原子、分子结构理论

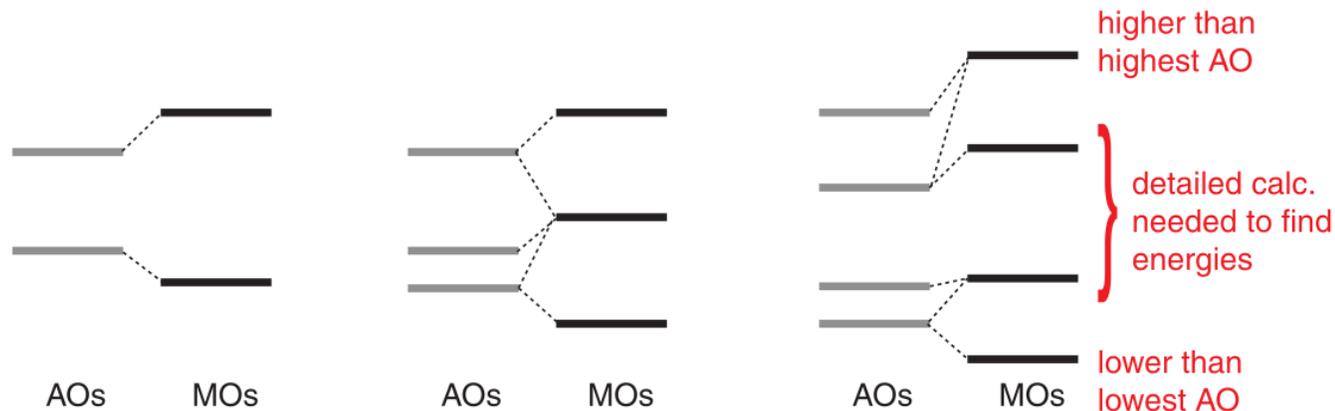


电子运动状态的量子力学描述：分立能级--能量量子化、波函数(原子轨道、分子轨道)--空间量子化

## 分子结构 (I)

### ◆ 分子轨道理论

- 原子的价层AO与电子参与成键;
- LCAO-MO近似:  $\psi(\text{MO}) = \sum_i c_i \phi_i$  ( $\phi_i$ 为AO)
- 轨道数守恒: 分子轨道数 = 原子轨道数

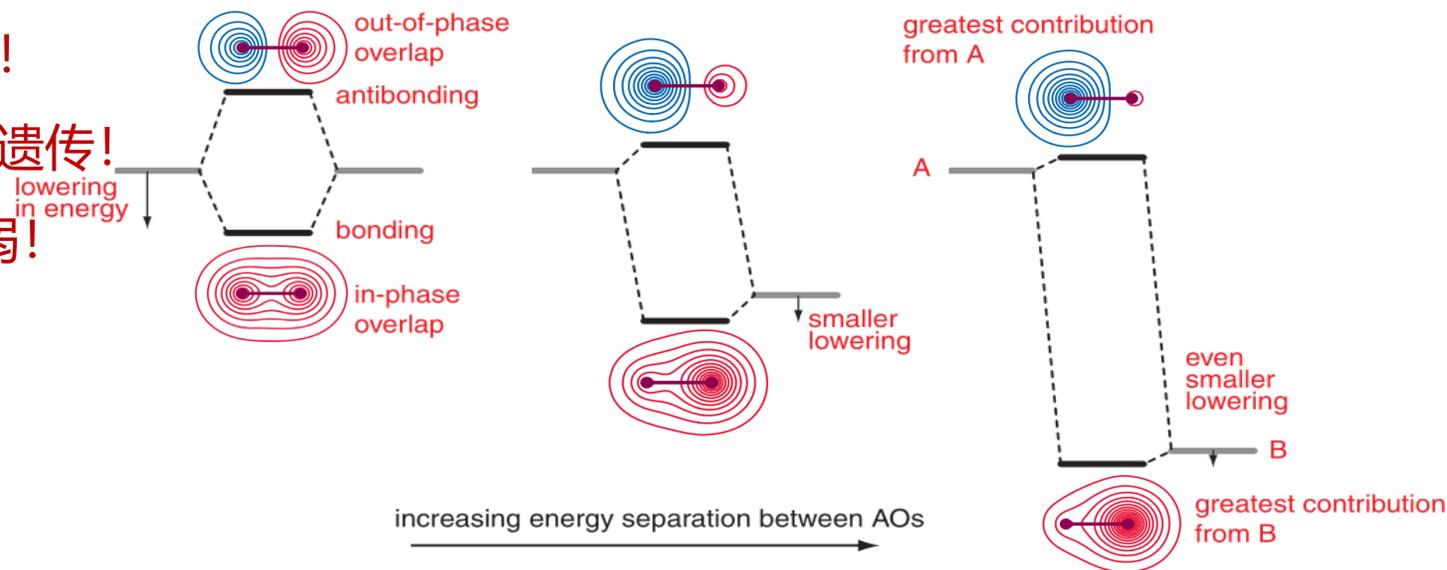


### ◆ 原子轨道间成键(分子轨道)的规则与规律

- 对称性匹配: 有效重叠, 波函数对称性遗传!
- 能量相近: 成键稳定效应最大化, 轨道能量遗传!
- AO尺寸愈大或AO尺寸差异愈大, 成键越弱!

→ 同类AO间成键的MO能级由低到高的顺序:

$$\sigma < \pi \ll \pi^* < \sigma^*$$





# 基于量子力学的原子、分子结构理论

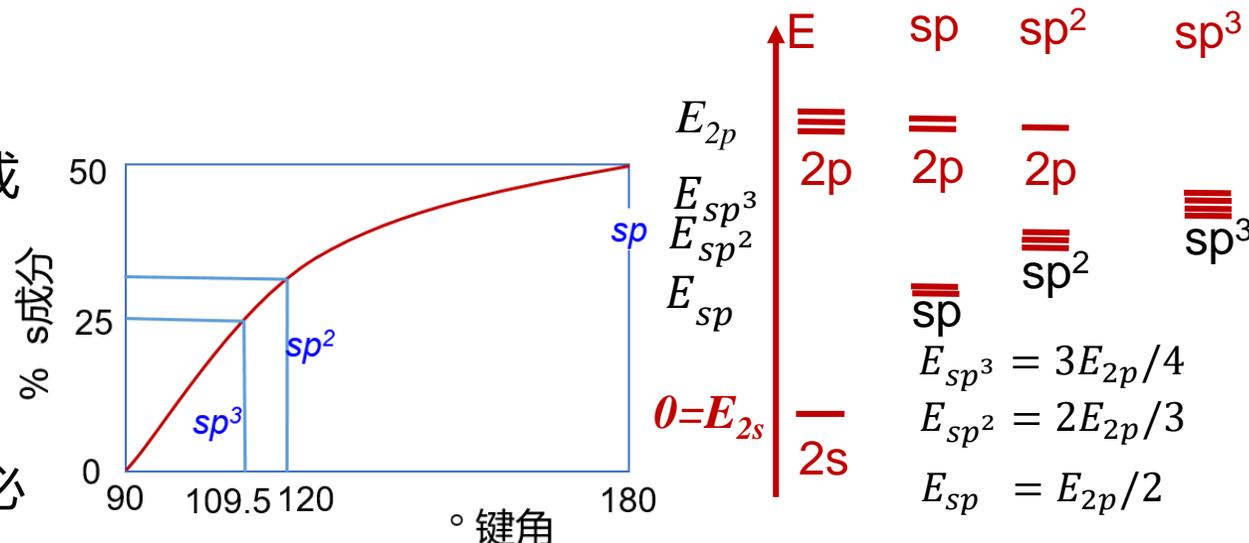


电子运动状态的量子力学描述：分立能级--能量量子化、波函数(原子轨道、分子轨道)--空间量子化

## 分子结构(II)

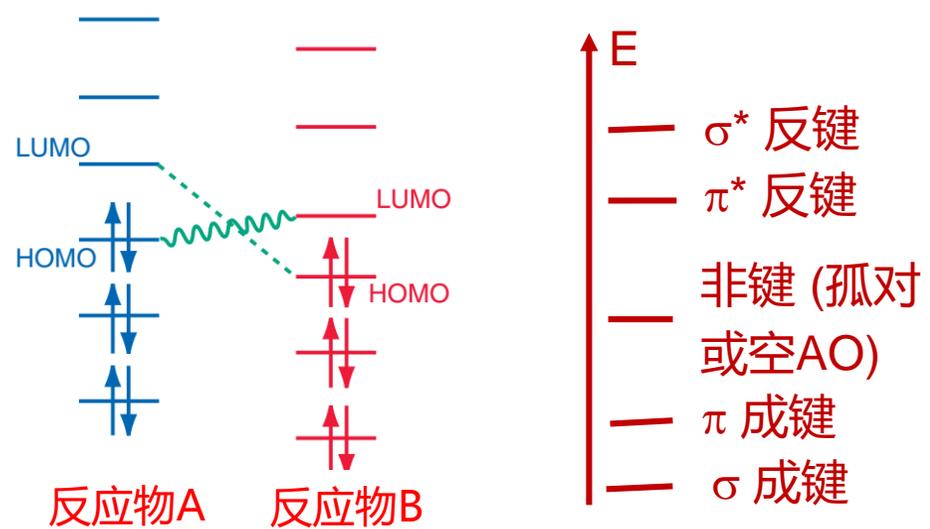
### ◆ 多原子分子的定域分子轨道图像

- **LMO**: 假设相邻原子各贡献一个价层AO用于形成定域( $\sigma$ -/ $\pi$ -)分子轨道(成键&反键LMO)
- **HAO**: 必要时需要杂化原子轨道(HAO) ;
- **各LMO能量**: 与AO能量及AO间成键强弱相关!
- **( $\pi$ )共轭体系**: 存在明显的共轭(离域)稳定效应, 必须使用离域MO图像!



## 分子反应与机理

- ◆ **反应驱动力**: 一个分子的HOMO与另一分子的LUMO相互作用导致**最高能量电子**的能量降低
- ◆ 两个反应物间存在**两组**HOMO-LUMO相互作用, **能量最近**那组的**相互作用最强**。





# 判断分子反应性的基本步骤



## 第一步：判断反应物几何结构

若已知反应物的化学配比及大致的基团分布，则需要结合VSEPR判断各个中心原子的价电子对总数及配位结构；若已知几何结构，则进行下一步；

◆ **第二步：**判断各原子的杂化轨道类型

◆ **第三步：**判断各原子间的 $\sigma$ 键和 $\pi$ 键(含成键与反键LMOs)、以及非键的孤对或空AO；

◆ **第四步：**判断是否存在离域大 $\pi$ 键, 如果有, 需借助正弦波规律判明其 $\pi$ -HOMO与 $\pi$ -LUMO的组成及形式, 并分别与非键的孤对或空AO比较能级相对高低；

◆ **第五步：**把每个反应物的所有LMOs基于能量由低到高的顺序排列(如右图), 判明每个反应物的HOMO和LUMO, 进而判断反应物之间能量最近的那组HOMO-LUMO相互作用！

◆ **第六步：**基于最重要的HOMO-LUMO作用, 判断反应物间的电子对重排情况, 画出玩箭头；对每个基元反应均重复上述过程！

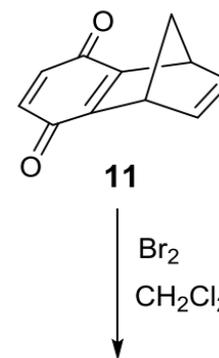
◆ **注：**上述步骤一般确保能出动力学驱动的反应机理(包括区域选择性和产物)；对热力学驱动的反应则通常会最选择放热最剧烈的产物, 需比较平行反应产物的相对稳定性！





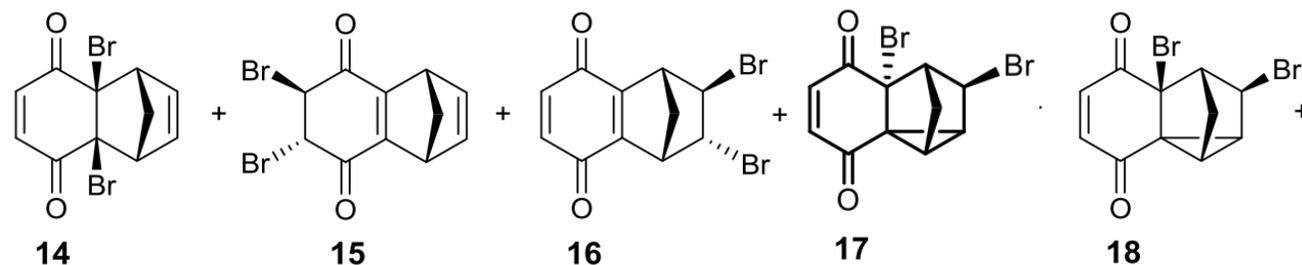
判断以下反应的机理并说明其不同温度下反应选择性的根源。

低温下，反应选择性受动力学因素控制，可分析基元反应的始态结构；  
高温下选择性极可能受热力学因素控制，可考虑基元反应终态稳定性！



◆始态效应：源自反应物的HOMO、LUMO活性！--判断反应物的HOMO、LUMO及相对能级高低，明确关键的活性轨道对！

◆终态效应：源自Hammond postulate—机理相同时，产物越稳定，反应放热越剧烈，能垒越低！ --判断产物的HOMO、LUMO及相对能级（或稳定性）高低！



Temperature	Yields in %				
	14	15	16	17	18
77 °C <sup>a</sup>	50	50	-	-	-
25 °C <sup>a</sup>	47	45	2	2	1
0 °C <sup>b</sup>	44	42	8	2	1
-50 °C <sup>b</sup>	-	-	63	17	13
-78 °C <sup>b</sup>	-	-	64	15	14

<sup>a)</sup> Isolated yields, <sup>b)</sup> Yields were determined with <sup>1</sup>H-NMR spectroscopy



1) 判断反应性(包括酸碱性、区域选择性、立体选择性等) 与反应机理的基本操作程序及判断依据有哪些?

2) 判断以下反应的机理并说明其选择性的判断依据。

解: 涉及的反应类型为烯烃的溴加成。

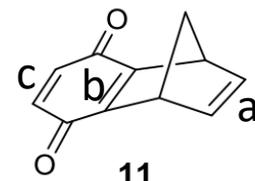
初始反应物11中有三个C=C双键, 分别标记为a、b、c以是区别, 后两个在苯醌基团中, 因共轭效应及C=O的吸电子效应,  $\pi$ 键能量低于a, 该分子HOMO应为定域于a的C-C $\pi$ 键, LUMO应以C=O $\pi$ 反键与b\c中 $\pi$ 反键的组合为主。

从反应产物的区域选择性看:

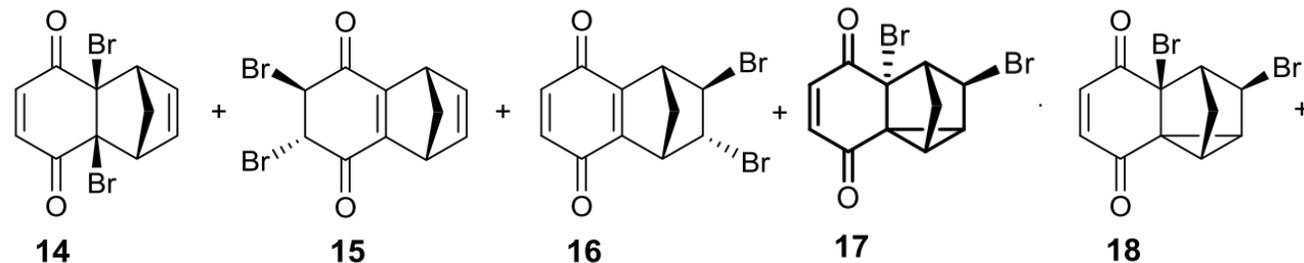
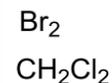
i) 低温下起始于a, 反应由11的HOMO主导, 当需要Br<sub>2</sub>的LUMO参与;

ii) 高温下起始于b、c, 反应并非由11的HOMO或LUMO主导, 可能为自由基型反应

苯醌并降冰片烯



11



Temperature	Yields in %				
	14	15	16	17	18
77 °C <sup>a</sup>	50	50	-	-	-
25 °C <sup>a</sup>	47	45	2	2	1
0 °C <sup>b</sup>	44	42	8	2	1
-50 °C <sup>b</sup>	-	-	63	17	13
-78 °C <sup>b</sup>	-	-	64	15	14

<sup>a</sup>) Isolated yields, <sup>b</sup>) Yields were determined with <sup>1</sup>H-NMR spectroscopy

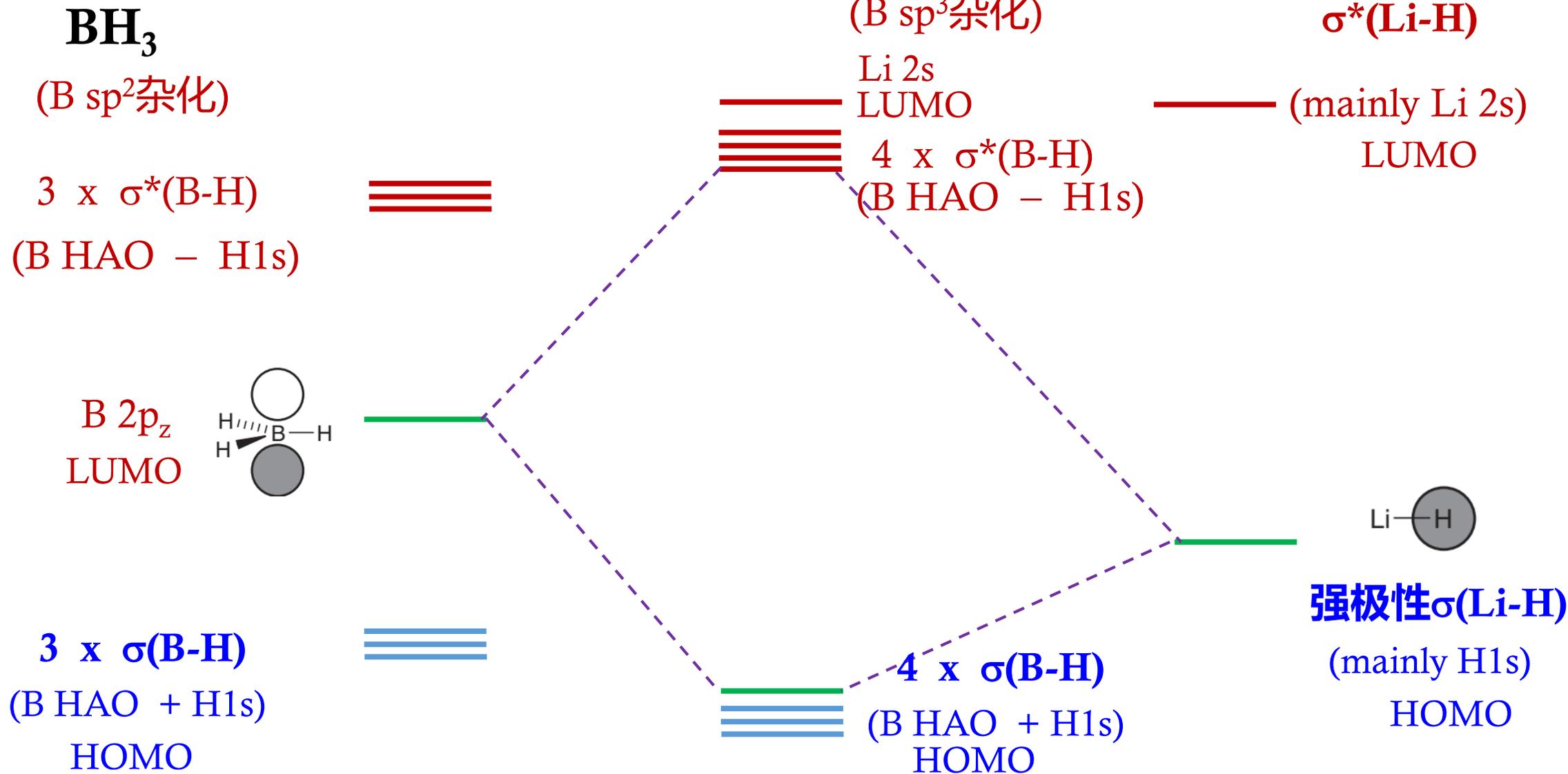
## 结束语

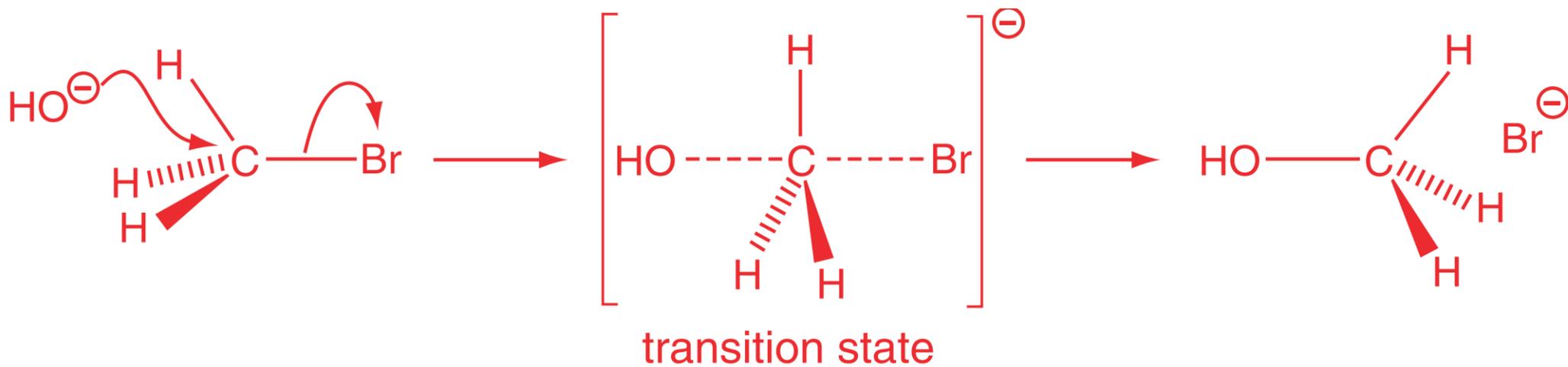
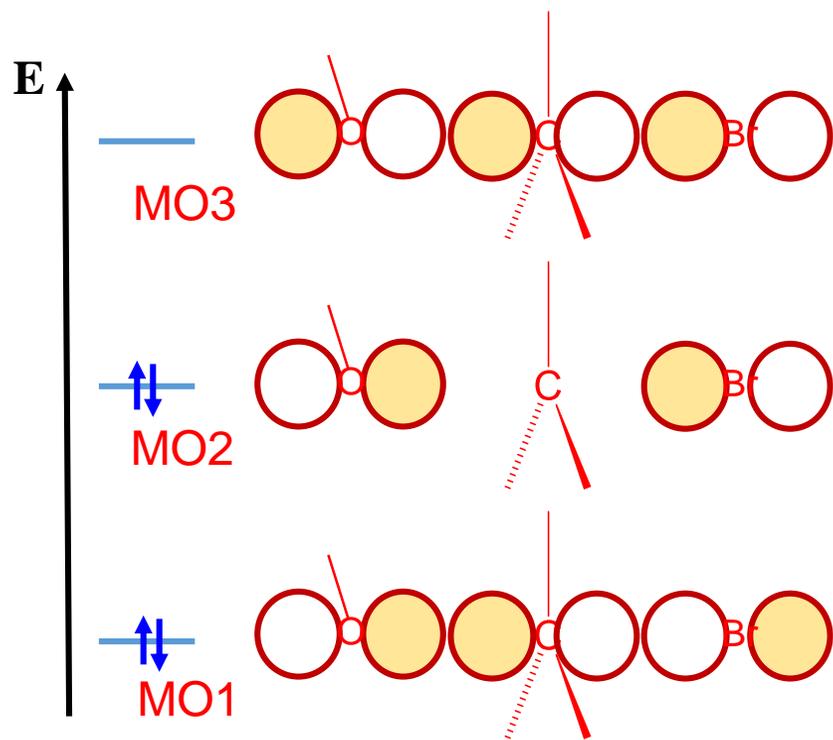
- ◆ 现代化学键理论建基于量子力学
- ◆ 各种现代化学测量学工具均基于量子力学原理
- ◆ 量子力学已经深度而广泛地渗透到现代科学研究和人类日常生活!
- ◆ 化学, 正是这种深度而广泛渗透得以实现并最大限度造福人类的中心科学!

THANKS FOR YOUR ATTENTION!



# LMO 图像

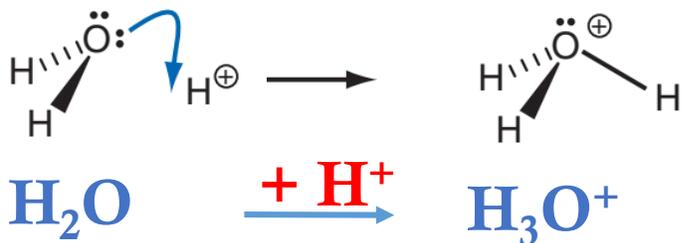






# 3.1.2 H<sub>2</sub>O质子化

## [H<sub>2</sub>O+H<sup>+</sup>]体系的(占据)分子轨道



Mainly O2p  
nonbonding

Mainly O2p  
nonbonding

Mainly O2p  
minor 2xH 1s  
Weakly bonding

O2p & 3xH 1s  
bonding

O2p & 2xH 1s  
bonding

O2p & 3xH 1s  
bonding

O2s & 2xH 1s  
bonding

O2s & 3xH 1s  
bonding  
新O-H键生成

