

EC_basic_part2_full.mp4 视频内容总结

该视频是 BAS Inc.出品的电化学入门基础知识系列第二篇，聚焦于分子的电子分布形态和氧化还原电位。

★原子核外的电子排布和原子轨道

- 电子排布原则：
 - 能量最低原理：电子优先占据能量低的轨道。
 - 泡利不相容原理：同一轨道上最多容纳两个自旋相反的电子。
 - 洪特规则：电子在简并轨道上排布时，尽可能分占不同轨道且自旋平行。
- 电子轨道形状：包括 s、p、d 等轨道类型，每种轨道具有不同的形状和能级。

★分子中的化学键 — 共价键

- 共价键分类：
 - 按共用电子对数：单键、双键、三键。
 - 按电子对偏移：极性键、非极性键。
 - 按电子云重叠方式： σ 键、 π 键。
- Lewis 共价键理论：通过共用电子对形成稳定分子，符合“八隅律”。

★现代共价键理论（VB 法，杂化轨道，VSEPR 规则）

- 价键理论（VB 法）：共价键的本质是原子间轨道重叠，降低能量而成键。
- 杂化轨道理论：
 - s、p 轨道混合形成新的杂化轨道（如 sp^3 、 sp^2 、 sp ），增强成键能力。
 - 典型分子结构：甲烷（ sp^3 ）、乙烯（ sp^2 ）、乙炔（ sp ）。
- 价层电子对互斥理论（VSEPR）：
 - 电子对间相互排斥，决定分子形状。
 - 电子对数与分子立体结构的关系：直线型、三角形、四面体等。

★分子轨道理论（MO 法）

- 成键轨道与反键轨道：
 - 同相位轨道重叠形成成键轨道，降低能量。
 - 反相位轨道重叠形成反键轨道，升高能量。
- 轨道重叠的对称性法则：轨道重叠需在对称性相同时发生。
- 第二周期元素等核双原子分子的外层分子轨道：展示不同分子的分子轨道能级和电子排布。

★前沿分子轨道理论 HOMO, LUMO 与氧化还原电位

- 前沿轨道理论：电子供体的 HOMO 与电子受体的 LUMO 相互作用对反应至关重要。
- 电极电位与氧化还原反应：电极电位控制电子得失，影响氧化还原反应的方向和速率。

- **实例分析**：氧分子在吡啶中的电化学氧化还原反应，展示前沿分子轨道在反应中的作用。

· 总结

- **分子电子分布与性质**：分子的电子分布状态决定其化学反应性和物理特性。
- **理论应用**：通过 VB 法、杂化轨道理论、VSEPR 规则、MO 法和前沿轨道理论，可以深入理解分子的结构和性质，以及电化学氧化还原反应的机制。

该文件系统地介绍了从基础电子排布到高级分子轨道理论的知识，为理解电化学反应和分子性质提供了坚实的理论基础。