

## <<分子结构与反应活性>>

### 图书基本信息

书名：<<分子结构与反应活性>>

13位ISBN编号：9787122016300

10位ISBN编号：7122016307

出版时间：2008-1

出版时间：7-122

作者：陈荣业

页数：317

字数：470000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<分子结构与反应活性>>

### 内容概要

分子结构与反应活性的关系（简称结-活关系）历来是有机化学界关注的热点之一。

因为在有机合成实践中几乎每个项目甚至每一天都会遇到同样的问题：什么样的合成路线是高选择性、高收率、低成本的？

反应过程中会产生哪些主、副产物？

什么样的反应条件会减少副产物、提高选择性？

分子结构与反应活性正是揭示这些问题的。

本书以作者亲身经历的实践经验为基础，以经典的物理学、化学的基本理论为指导，参阅了若干有机合成文献，从大量具体的实例中总结概括出一些结-活关系的新规律以与读者共享。

希望本书对从事有机合成产品的相关研究开发人员、高校师生认识分子结构与反应活性的关系起到启迪作用。

读者阅读后，对本书中的新观点将不断地产生认同和共鸣，且将加深理解有机反应的内在规律，达到提高有机合成研究开发水平之目的。

## &lt;&lt;分子结构与反应活性&gt;&gt;

## 书籍目录

第1章 分子的结构、振动与电荷分布 1.1 形成共价键原子的三个特征——杂化轨道、共价半径和电  
1.1.1 原子的杂化轨道 1.1.2 原子的范德华半径和共价半径 1.1.3 电负性 1.2 共价键的几何特征与电  
子特征 1.2.1 共价键的几何特征—键长和键角 1.2.2 共价键的电子特征—键能和极性 1.3 有机分  
子结构 1.3.1 分子轨道理论与前线轨道 1.3.2 碳氢化合物的分类及特征 1.4 分子结构与电荷分布  
1.4.1 分子结构与分子内的运动 1.4.2 分子、离子与电荷分布 1.4.3 分子的共振 1.4.4 共振对取代芳  
烃反应活性的影响 1.5 分子间的化学反应 1.5.1 化学反应的分类 1.5.2 化学反应的过程 1.5.3 化学反  
应的难易 1.6 运用概念解题 1.7 争议问题讨论 1.8 本章要点提示 参考文献第2章 诱导效应、共  
轭效应的动态观察 2.1 诱导效应与共轭效应 2.1.1 诱导效应 2.1.2 共轭效应 2.1.3 诱导效应、共  
轭效应之间的影响 2.2 电子效应的标准与比较标度 2.2.1 静态电子效应与动态电子效应 2.2.2 静态诱  
导效应、共轭效应的标度 2.2.3 取代基静态电子效应的比较 2.3 动态下的电子效应 2.3.1 电子效  
应的动态变化趋势 2.3.2 动态电子效应对单卤芳烃定位规律的影响 2.3.3 芳烃动态电子效应分析  
2.4 动态下的电子效应方向 2.4.1 动态下氯代芳烃的电子效应 2.4.2 氰基电子效应的动态变化  
2.4.3 动态下氯原子电子效应的实例与点评 2.4.4 芳烃动态电子效应的普遍性规律 2.5 运用概念解  
题 2.6 争议问题讨论 2.7 本章要点提示 参考文献第3章 反应活性的光谱解析 3.1 有机分子的  
红外吸收光谱与化学反应活性 3.1.1 分子红外吸收光谱的基本原理 3.1.2 基团伸缩振动频率的影响  
因素 3.1.3 红外光谱振动频率与基团反应活性的关系 3.2 核磁共振谱与化学反应活性 3.2.1 核  
磁共振的基本原理 3.2.2 质子化学位移及其影响因素 3.2.3  $^{13}\text{C}$ 化学位移的影响因素 3.2.4 取代  
芳烃 $\rho$ 值影响因素解析 3.2.5 NMR化学位移与化学反应活性的关系 3.3 运用概念解题 3.4 争议问题  
讨论 3.5 本章要点提示 参考文献第4章 分子内的空间诱导效应与空间共振 4.1 空间诱导效应的  
起源、特点与作用 4.2 空间诱导效应的表现形式 4.2.1 超共轭效应 4.2.2 场效应 4.2.3  $\pi$ 交叉  
效应 4.2.4 取代芳烃的邻位效应 4.3 取代芳烃邻位的空间诱导效应与空间共振 4.3.1 静态下芳  
烃邻位的光谱特征 .....第5章 溶剂对有机反应速率的影响 第6章 评估结-活关系的基本原理第7章  
离去基团的离去能力第8章 亲核试剂的活性比较第9章 亲电试剂的活性比较第10章 重排反应的  
规律与特点第11章 用结-活-关系验证反应机理第12章 极性反应的催化第13章 有机基团的保护  
第14章 芳烃上的极性反应第15章 周环反应的结构与活性第16章 自由基反应与工艺安全第17章  
结-活-关系的应用编后语

## &lt;&lt;分子结构与反应活性&gt;&gt;

## 章节摘录

第1章 分子的结构、振动与电荷分布 有机化学是研究碳的化学，碳原子处于元素周期表的第二周期第IV主族，恰在电负性强的卤素和电负性弱的碱金属之间，正适合与多种元素形成共价键有机化合物。

不同原子的外层电子构型依原子核数量的不同有不同的排布。

在形成共价键的有机分子中，一原子区别于其它原子的显著特征是其分子结构（几何形状、杂化方式）、范德华半径、共价半径（体积）和电负性（电）。

1.1 形成共价键原子的三个特征：杂化轨道、共价半径和电负性 1.1.1 原子的杂化轨道  
根据价键理论，不同原子外层的自旋相反的电子间相互配对使每个原子的外层均达到不含未成对电子的饱和状态时形成共价键；能量相近的原子轨道间可进行杂化、重组，形成数量相等、能量相等的杂化轨道，这样可使成键能力更强，成键后分子体系能量更低、更稳定；电子将尽可能占据数量相等的不同轨道。

碳原子的外层电子构型为 $2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ ，2，有一个2s轨道和三个相互垂直的2p轨道。

当一个2p电子被激发至2p<sub>z</sub>轨道时，碳的外层四个轨道中各有一个未成对电子，此时碳原子的外层电子构型为 $2s^1 2p_x^1 2p_z^1$ ，因而有三种不同的杂化方式。

<<分子结构与反应活性>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介, 请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>