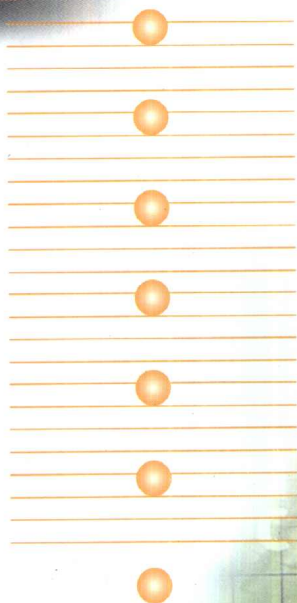


Instant Notes

有机化学

ORGANIC CHEMISTRY

现代生物学精要速览中文版



CH₃

[英] G. 帕特里克 著
李艳梅 译

 科学出版社
www.sciencep.com



25

62

1713u

现代生物学精要速览中文版

有机化学

[英] G. 帕特里克 著

李艳梅 译

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书是目前国外畅销的优秀教材“*Instant Notes in Organic Chemistry*”的中译本,由英国著名大学具丰富教学经验的一流教授编写,清华大学化学系李艳梅教授翻译。全书以简洁的形式概括了核心的有机化学知识,既全面重点地阐述了基本理论和主要技术,又突出介绍了学科发展的前沿和动态。

本书编写风格独特、取材新颖;文字通俗易懂、简明扼要;插图简练、便于记忆;每一部分都列出要点、相关主题和进一步阅读书目,重点和主线清晰明确。本书专为大学生设计,适合作为基础课有机化学的教材,快速指导学生掌握和复习有机化学基础知识;同时对授课教师制定教学计划和备课也大有帮助。

P. Patrick

Instant Notes in Organic Chemistry

Original edition published in the United Kingdom under the title of *Instant Notes in Organic Chemistry*

©BIOS Scientific Publishers Limited, 2000

图字 01-2000-2221

图书在版编目 (CIP) 数据

有机化学/〔英〕帕特里克 (Patrick, G.) 著;李艳梅译. —北京:科学出版社, 2003.1

(现代生物学精要速览中文版)

书名原名: *Instant Notes in Organic Chemistry*

ISBN 7-03-009616-9

I. 有… II. ①帕…②李… III. 有机化学 IV. 062

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2001) 第 046579 号

责任编辑: 谢灵玲 王 澍 / 责任校对: 陈玉凤

责任印制: 刘士平 / 封面设计: 王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

丽源印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2003年1月第一版 开本: 787×1092 1/16

2003年1月第一次印刷 印张: 20 3/4

印数: 1—3 000 字数: 471 000

定价: 39.00元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈新欣〉)

前 言

这本教科书旨在提供有机化学的综合性基本知识，适合本科生学习化学、化学相关课程或以有机化学作为辅助课程的课程。本书集中了在完成基础或导论性的普通化学课程之后所开的有机化学课程中所共同涉及的核心章节。

有机化学课程既可使一些学生如痴如醉，也可使一些学生“一头雾水”。有些学生能够迅速入门，而有些人不管如何努力，也始终摸不着“头脑”。可以肯定的是，本课程的一个主要困难是它所涉及的诸多素材。当学生们不得不学习看起来无止境反应，尤其是开始画反应机制及弯箭头时，很多人感到迷茫，他们好像只看到一个混乱的迷宫，其中的曲线无处不在、通向各个方向。有机反应机制或概念常常最难掌握。与这些困难常常相伴的是当前所使用的有机化学教材往往都超过 1200 页，且价格不菲。

本书尝试着把有机化学的基本内容压缩成便于使用的 300 多页教材，并且对学生友好，不需要学生花大量“血本”。通过只对基本主题进行压缩而不是展开大量枯燥的细节或重复的例子，本书实现了这一点。此外，在每节开头的要点部分总结了所包括的内容，有助于集中学习本质内容。

有机化学是一门特殊的课程，随着学习的不断深入，它变得越来越容易。这个说法看起来似乎无法接受，尤其是对那些既要努力熟悉命名规则，又要记住和掌握大量反应及其机制的一年级学生。然而，这些章节是这门课程的基础，一旦掌握了，那么有机化学的整体轮廓就会变得十分清晰。

在这里，对反应机制的理解至关重要。它可以理顺不同官能团之间反应的逻辑关系，进一步把一系列明显不相关的枝节融入一个容易理解的主题，使得记忆反应变得极其容易。

一旦体验到了这种愉悦的感觉，就可以很快地理解和掌握与有机化学有关的课程，如遗传学和生物化学等。掌握了有机化学，就能更好地理解生命科学和人体是如何在分子水平工作的。它也有助于理解疾病和人体障碍所涉及到的分子机制，并进一步理解治疗疾病的药物是如何设计的——药物化学。

以上所述并不是有机化学所涉及的全部内容。对有机化学的理解有助于工业化学家或化学工程师解决化学过程中出现的预期不到的副反应问题，有助于农业科学家理解植物和农作物体内发生的分子反应过程，有助于环境友好的除草剂和杀真菌剂的设计和合成，它也有助于法医分析一种难以区分的白色粉末——海洛因或面粉？

有机化学所涉及到的科学领域是无止境的——设计太空服、发展新的照相染料以及发明微电子中的新的分子技术——这样的例子还可以举很多。有机化学是一门令人兴奋的学科，它可使人们对分子及其性质有本质的了解。

本书前几章的排列次序很重要。前两部分是结构和成键，它对后面的内容起着至关重要的作用，如为什么碳可以形成四根键？什么是杂化？

关于官能团的第三部分对于学生能否将迷宫似的有机化合物所经历的反应进行分类整理来说至关重要。紧接着就是立体化学及包含反应和机制的基本理论的 E 章和 F 章，如什么是亲核试剂和亲电试剂？机制的含义是什么？弯箭头代表什么？

其他章节可按任何次序学习，这些章节主要讲授在化学和生物化学中具有重要意义的常见官能团的反应和机制。

希望本书对学生们学习有机化学真正有用。一旦领会了有机化学的整体内容，他们将阅读更多的内容并进入一个真正激动人心的分子科学世界。

目 录

丛书序	
译者序	
前 言	
A 结构和成键	(1)
A1 碳的原子结构	(1)
A2 共价键和杂化	(3)
A3 sp^3 杂化	(5)
A4 sp^2 杂化	(8)
A5 sp 杂化	(14)
A6 键和杂化中心	(17)
B 烷烃和环烷烃	(19)
B1 定义	(19)
B2 结构的表示	(20)
B3 命名	(22)
C 官能团	(27)
C1 官能团的定义	(27)
C2 脂肪与芳香官能团	(29)
C3 分子间作用力	(30)
C4 特性与反应	(33)
C5 含官能团化合物的命名	(35)
C6 一级、二级、三级和四级的含义	(44)
D 立体化学	(47)
D1 构造异构体	(47)
D2 构型异构体——烯烃和环烷烃	(48)
D3 构型异构体——光学异构体	(51)
D4 构象异构体	(59)
E 亲核试剂和亲电试剂	(65)
E1 定义	(65)
E2 带电荷反应物种	(66)
E3 中性无机反应物种	(68)
E4 有机反应物种的结构	(71)
F 反应和机理	(75)
F1 反应	(75)

F2 机理	(77)
G 酸-碱反应	(81)
G1 布能斯特-劳里酸碱	(81)
G2 酸的强度	(84)
G3 碱的强度	(90)
G4 路易斯酸碱	(96)
G5 烯醇盐	(97)
H 烯烃和炔烃	(101)
H1 烯烃和炔烃的制备	(101)
H2 烯烃和炔烃的性质	(103)
H3 对称烯烃的亲电加成	(106)
H4 不对称烯烃的亲电加成	(112)
H5 碳正离子的稳定性	(115)
H6 烯烃的氧化和还原	(117)
H7 烯烃的硼氢化	(121)
H8 炔烃的亲电加成	(124)
H9 炔烃的还原	(127)
H10 端炔的烷基化	(129)
H11 共轭二烯烃	(131)
I 芳香族化合物	(135)
I1 芳香性	(135)
I2 芳香族化合物的制备与性质	(137)
I3 苯环的亲电取代	(138)
I4 单取代苯的合成	(146)
I5 单取代芳环的亲电取代	(149)
I6 二、三取代苯的合成	(158)
I7 氧化和还原	(162)
J 醛和酮	(165)
J1 制备	(165)
J2 性质	(167)
J3 亲核加成概述	(170)
J4 亲核加成——带电荷的亲核试剂	(172)
J5 电子效应和立体效应	(177)
J6 亲核加成——氮亲核试剂	(180)
J7 亲核加成——氧和硫亲核试剂	(183)
J8 烯醇负离子的反应	(187)
J9 α -卤代	(194)
J10 还原和氧化	(196)
J11 α , β -不饱和醛酮	(198)

K 羧酸及其衍生物	(201)
K1 结构和性质	(201)
K2 亲核取代	(204)
K3 反应活性	(208)
K4 羧酸的制备	(211)
K5 羧酸衍生物的制备	(213)
K6 反应	(218)
K7 烯醇负离子的反应	(228)
L 卤代烷	(233)
L1 制备和物理性质	(233)
L2 亲核取代	(235)
L3 S_N2 和 S_N1 反应的影响因素	(241)
L4 消除反应	(245)
L5 消除反应和取代反应的竞争	(249)
L6 卤代烷的反应	(251)
L7 金属有机化合物的反应	(254)
M 醇、酚和硫醇	(257)
M1 醇的制备	(257)
M2 酚的制备	(258)
M3 醇和酚的性质	(260)
M4 醇的反应	(264)
M5 酚的反应	(271)
M6 硫醇化学	(275)
N 醚、环氧化物和硫醚	(277)
N1 醚、环氧化物及硫醚的制备	(277)
N2 醚、环氧化物及硫醚的性质	(280)
N3 醚、环氧化物及硫醚的反应	(282)
O 胺和腈	(289)
O1 胺的制备	(289)
O2 胺的性质	(293)
O3 胺的反应	(298)
O4 腈的化学	(304)
补充读物	(307)
索引	(309)

A 结构和成键

A1 碳的原子结构

要点

原子轨道

碳原子有 6 个可占用的原子轨道，即第一层的 s 轨道，第二层的 s 轨道和 3 个 p 轨道。 $1s$ 和 $2s$ 轨道是球形的。 $2p$ 轨道呈哑铃形，根据它们的取向可以区分为 $2p_x$ 、 $2p_y$ 和 $2p_z$ 轨道。

能级

$1s$ 轨道的能量低于 $2s$ 轨道，而 $2s$ 轨道的能量低于 $2p$ 轨道。 $2p$ 轨道能级相同（简并轨道）。

电子排布

碳位于周期表第二周期，其 6 个电子在进入较高能级轨道之前首先填充较低能级的原子轨道（能量最低原理）。每个轨道最多可容纳 2 个自旋相反的电子 [泡利 (Pauli) 不相容原理]。如果轨道的能级相同，电子将占据尽可能多的轨道（洪德 (Hund) 规则)。因此，碳原子的电子排布为 $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ 。

相关主题

共价键和杂化 (A2)

原子轨道

碳原子有 6 个电子，处于元素周期表的第二周期。因此，这些电子可以占据两层原子轨道。第一层最靠近原子核，具有 1 个 s 轨道—— $1s$ 轨道。第二层有 1 个 s 轨道 ($2s$ 轨道) 和 3 个 p 轨道 ($3 \times 2p$)。因此，碳原子共计有 5 个原子轨道供 6 个电子占据。 s 轨道呈球形， $2s$ 轨道比 $1s$ 轨道大得多。 p 轨道呈哑铃形，沿 x 轴、 y 轴和 z 轴三个方向排布，并据此区分为 $2p_x$ 、 $2p_y$ 和 $2p_z$ 原子轨道 (图 A1.1)。

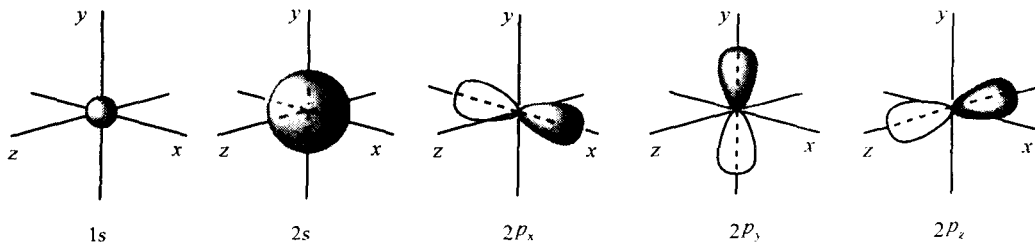


图 A1.1 原子轨道

能级

上述原子轨道并不具有相同的能量 (图 A1.2)。 $1s$ 轨道能量最低， $2s$ 轨道能量高于 $1s$ 轨道， $2p$ 轨道能量最高。3 个 $2p$ 轨道的能量相同，

即它们是简并轨道。

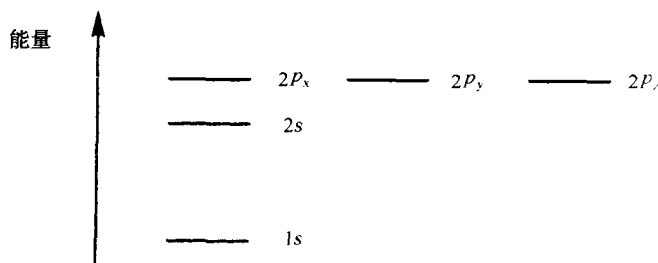


图 A1.2 原子轨道的能级

电子排布

碳位于元素周期表的第二周期，它的 6 个电子首先占据能量较低的原子轨道，这就是**能量最低原理**。因此电子首先占据 $1s$ 轨道，其次是 $2s$ 轨道，最后占据 $2p$ 轨道。根据**泡利 (Pauli) 不相容原理**，每个轨道最多可容纳 2 个电子，且这两个电子自旋方向相反。因此，前 4 个电子首先占据 $1s$ 和 $2s$ 轨道。如图 A1.3，两个分别指向上和下的箭头表示每个轨道上的电子自旋方向相反。其他 2 个电子将进入剩余的 $2p$ 轨道，它们分别进入不同的轨道，这样便有 2 个半充满的轨道和 1 个空轨道。具有相同能量的轨道，仅当所有的简并轨道被半充满之后电子才开始成对，这就是**洪德 (Hund) 规则**。

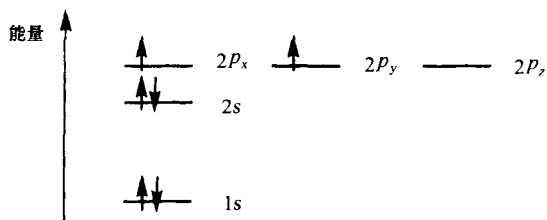


图 A1.3 碳的电子排布

碳的电子排布为 $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ ，上标的数字表示每个轨道的电子数，字母表示相关原子轨道的类型，字母前的数字表示轨道所属的层数。

A2 共价键和杂化

要 点

共 价 键

两个氢原子彼此靠近时，它们的 $1s$ 原子轨道相互作用形成一个成键和一个反键分子轨道 (MO)。当 1 对电子填充到成键分子轨道中且反键分子轨道为空轨道时，便形成一根稳定的共价键。

 σ 键

两个原子轨道头对头重叠形成一个横截面为圆形的键，即为 σ 键， σ 键是一种强键。

杂 化

碳原子的电子排布意味着碳应该形成 2 根键。然而，众所周知碳生成的是 4 根键。在有机结构中，它可以通过被称之为杂化的过程，“混合”价层的 $2s$ 和 $2p$ 轨道。3 种可能的杂化方式为： sp^3 ， sp^2 和 sp 杂化。

相关主题

碳的原子结构 (A1)

sp^2 杂化 (A4)

sp^3 杂化 (A3)

sp 杂化 (A5)

共价键

共价键将一个分子中的两个原子结合在一起，当两个原子轨道重叠产生分子轨道时便形成了共价键。之所以称之为分子轨道是因为该轨道属于整个分子，而并非属于任何单个原子。两个氢原子形成一个氢分子的过程就是一个简单的例子。每个氢原子都有一个半充满的 $1s$ 原子轨道，当两个原子彼此靠近时，两个原子轨道相互作用形成两个分子轨道（形成的分子轨道数须等于生成它的原子轨道数，图 A2.1）

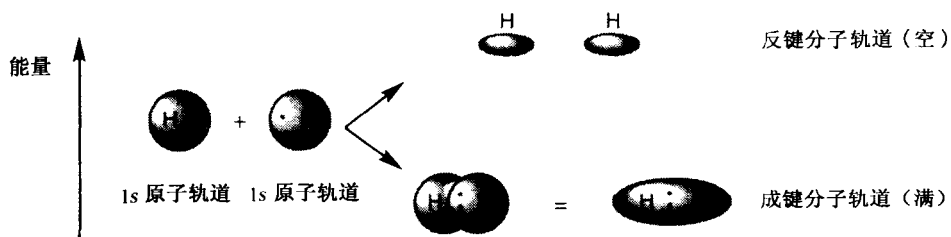


图 A2.1 氢 (H_2) 的分子轨道

分子轨道具有不同的能量。其中之一较原来的原子轨道更稳定，称为成键分子轨道。另一个较不稳定的轨道为反键分子轨道。成键分子轨道呈橄榄球状，由两个 $1s$ 原子轨道结合而形成。由于成键分子轨道更加稳定，两个键电子（分别来自每个氢原子）进入其中并配对。反键分子轨道的能

量较高，由两个变形的球形组成，且未被填充。由于电子全部填充在比原来的原子轨道更稳定的成键分子轨道中，因而能量得到释放，有利于键的形成。以下讨论中，我们重点考虑成键分子轨道，以描述成键和分子形状，然而我们有必要意识到反键分子轨道的存在。

σ 键

氢分子的成键分子轨道便是一个 σ 键的例子： σ 键横截面为圆形，是由两个 $1s$ 原子轨道头对头重叠形成的。这是一种强的相互作用，因而 σ 键是强键。在进一步的讨论中，我们将看到其他原子轨道通过这种相互作用形成 σ 键的例子。

杂化

通过共用未成对电子，原子间可以成键，因而每根键含有两个电子。在 A1 中，我们指出一个碳原子有两个未成对电子，因此一个碳原子应该形成 2 根键。然而碳原子实际上形成了 4 根键！仅有两个未成对电子的碳原子是如何形成 4 根键的呢？

迄今为止我们已经描述了单个碳原子的电子排布。然而，当碳原子成键并成为分子的一部分时，它可以第二电子层（价层）的 s 轨道和 p 轨道“混合”起来。我们称之为杂化，这使得碳原子形成了我们实际观察到的 4 根键。

这种混合过程可以 3 种方式进行。

- $2s$ 轨道与所有的 3 个 $2p$ 轨道混合，称之为 sp^3 杂化；
- $2s$ 轨道与 2 个 $2p$ 轨道混合，称之为 sp^2 杂化；
- $2s$ 轨道与 1 个 $2p$ 轨道混合，称之为 sp 杂化。

A3 sp^3 杂化

要 点

定 义

在 sp^3 杂化中，第二层的 s 轨道和 p 轨道“混合”形成了 4 个能量相同的 sp^3 杂化轨道。

电子排布

每个杂化轨道包含一个未成对电子，因此碳原子可能形成 4 根键。

几何形状

每个 sp^3 轨道均呈变形的哑铃状，其中一个波瓣比另外一个大得多。杂化轨道排列得使它们彼此间相距尽可能地远，4 个大波瓣分别指向四面体的 4 个顶角。 sp^3 杂化解释了饱和烷烃中碳的四面体结构。

 σ 键

两个碳原子的 sp^3 杂化轨道之间或一个碳原子的 sp^3 杂化轨道和氢原子之间形成的强键是 σ 键。两个 sp^3 杂化的碳原子之间 σ 键的形成涉及到两个碳原子的半充满 sp^3 杂化轨道间的重叠。1 个 sp^3 杂化的碳原子和 1 个氢原子之间 σ 键的形成，涉及到碳原子的半充满 sp^3 杂化轨道和氢原子的半充满 $1s$ 轨道之间的重叠。

氮、氧和氟

在有机分子中，氮原子、氧原子和氟原子同样是 sp^3 杂化。氮含有 3 个半充满的 sp^3 轨道，可以形成三角锥形的 3 根键。氧含有 2 个半充满的 sp^3 轨道，可以形成互成角度的 2 根键。氟含有 1 个半充满的 sp^3 轨道，只能形成 1 根键。形成的所有这些键都是 σ 键。

相关主题

共价键和杂化 (A2)

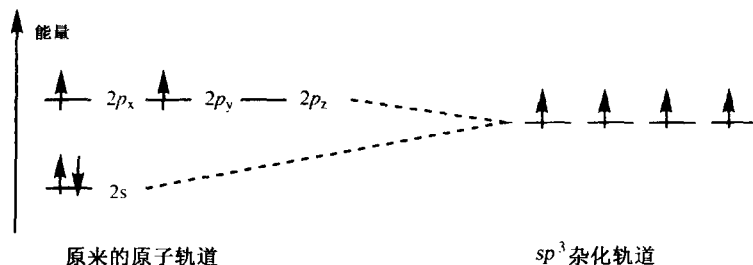
键和杂化中心 (A6)

定义

sp^3 杂化中， $2s$ 轨道和所有 3 个 $2p$ 轨道混合，形成一组 4 个 sp^3 杂化轨道（杂化轨道数目必须等于参与杂化的原来原子轨道数目之和）。杂化轨道之间的能量相同，但与原来原子轨道的能量不同。这种能量差异将影响各个原子轨道的混合。杂化轨道的能量高于原来的 s 轨道，但低于原来的 p 轨道（图 A3.1）。

电子排布

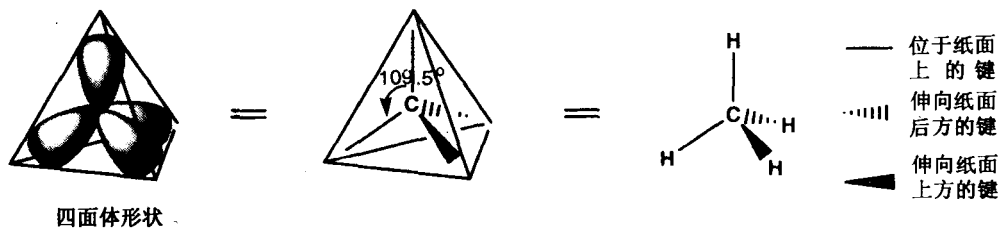
碳的价电子现在可以填充到 sp^3 杂化轨道中（图 A3.1）。原来的 $2s$ 和 $2p$ 轨道中共有 4 个电子。 s 轨道全充满，两个 p 轨道半充满。杂化后共有 4 个能量相同的 sp^3 杂化轨道。根据洪德规则，4 个 sp^3 轨道将均被半充满，也就是说，共有 4 个未成对电子，可以形成 4 根键。

图 A3.1 sp^3 杂化**几何形状**

每个 sp^3 杂化轨道均具有相同的形状——非常变形的哑铃状（图 A3.2）。由于有更多的 p 轨道参与杂化，这种变形的哑铃形状更接近于 p 轨道，而不是 s 轨道。

图 A3.2 sp^3 杂化轨道

每个 sp^3 轨道在空间上彼此相距尽可能地远，各指向四面体的 4 个顶角（图 A3.3）。在这里仅仅显示出大波瓣，每个波瓣间的夹角为 109.5° 。这就是通常所说的**四面体碳**。用普通的短线表示纸面上的键，伸向纸面后方的键用楔形虚线表示，伸向纸面上方的键用楔形实线表示，这样可以描绘出四面体碳三维形状。

图 A3.3 sp^3 杂化碳原子的四面体形状 **σ 键**

一个碳原子的半充满 sp^3 杂化轨道可以与另一个碳原子的半充满 sp^3 杂化轨道成键。如图 A3.4a，两个 sp^3 轨道的大波瓣互相重叠，直接形成强的 σ 键。杂化轨道形成强 σ 键的能力解释了为什么首先发生杂化过程。变形的哑铃形状使得 sp^3 杂化轨道比单纯的 s 或 p 轨道的重叠情况要好得多。 sp^3 杂化碳原子和氢原子之间的 σ 键涉及 1 个碳原子的半充满 sp^3 轨道和氢原子的半充满 $1s$ 轨道（图 A3.4b）。

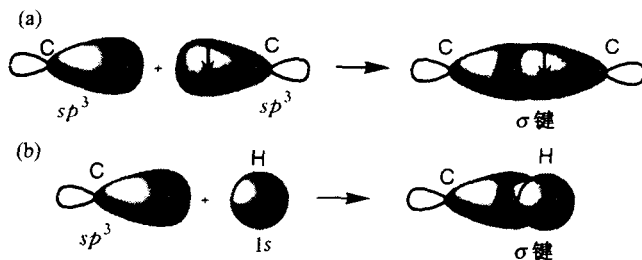


图 A3.4 (a) 2 个 sp^3 杂化碳原子之间的 σ 键；(b) sp^3 杂化碳原子和氢原子之间的 σ 键

氮，氧和氯

氮、氧和氯在有机化合物中也是 sp^3 杂化。氮有 5 个第二层的价电子，杂化后含有 3 个半充满的 sp^3 轨道，可以形成 3 根键。氧有 6 个价电子，杂化后含有 2 个半充满的 sp^3 轨道，可以形成 2 根键。氯有 7 个价电子，杂化后含有 1 个半充满的 sp^3 轨道，可以形成 1 根键。

这三种原子的 4 个 sp^3 轨道有一个或多个轨道被孤对电子占据，呈四面体排列。分别考虑各种原子：氮形成三角锥形，键角略小于 109.5° (约 107°) (图 A3.5a)，这种键角的压缩是由孤对电子占据的轨道造成的，因为孤对电子较化学键占据更多的空间；氧形成折线形，两对孤对电子将键角从 109.5° 压缩到约 104° (图 A3.5b)。

醇、胺、卤代烷和醚均形成含有氮、氧或氯的 σ 键。这些原子和碳原子之间的键由各原子的半充满 sp^3 轨道互相重叠形成。含有氢原子的键 (如 O—H 键和 N—H 键) 由氢原子的半充满 $1s$ 轨道和氧原子或氮原子的半充满 sp^3 轨道重叠形成。

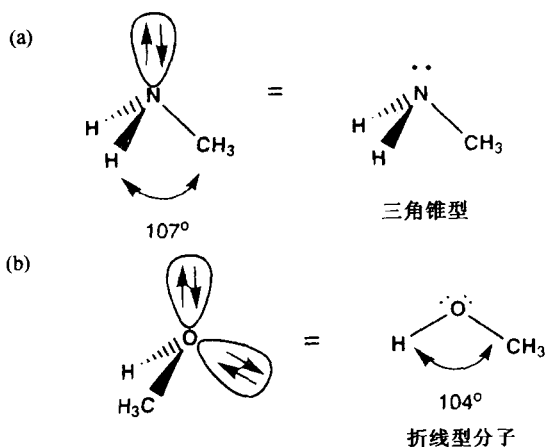


图 A3.5 (a) sp^3 杂化氮的几何形状；(b) sp^3 杂化氧的几何形状

A4 sp^2 杂化

要 点

定 义

sp^2 杂化中, 1 个 $2s$ 轨道和 2 个 $2p$ 轨道“混合”形成 3 个能量相同的 sp^2 杂化轨道。剩余的一个 $2p$ 轨道能量稍高于杂化轨道。

电子排布

碳原子的每个 sp^2 杂化轨道含有 1 个未成对电子。另外还有 1 个半充满的 $2p$ 轨道, 因此可生成 4 根键。

几何形状

每个 sp^2 轨道均呈变形的哑铃状, 其中一个波瓣比另外一个大得多。余下的 $2p$ 轨道呈对称的哑铃状。3 个 sp^2 轨道的主瓣分别指向三角形的 3 个角, $2p$ 轨道垂直于该三角形所在的平面。

烯 烃

每个 sp^2 杂化的碳原子以 3 个 sp^2 杂化轨道形成 3 根 σ 键。剩余的 $2p$ 轨道与相邻的 $2p$ 轨道“肩并肩”重叠形成 1 根 π 键。 π 键比 σ 键弱, 但足以阻止 $C=C$ 键的旋转。因此烯烃是平面型的, 每个碳呈平面三角形。

羰 基

氧原子和碳原子均为 sp^2 杂化。碳原子有 3 个 sp^2 杂化轨道, 可以形成 3 根 σ 键, 其中 1 根键与氧原子相连。氧原子以 1 个 sp^2 轨道与碳形成 σ 键。碳原子和氧原子的 p 轨道用于形成 1 根 π 键。

芳 香 环

芳香环由 6 个 sp^2 杂化碳原子构成。每个碳原子形成 3 根 σ 键, 并组成一个平面环。每个碳原子剩余的 $2p$ 轨道垂直于这个平面, 并与两侧相邻的 $2p$ 轨道发生重叠。这意味着在整个环的周围形成了一个分子轨道, 因此这 6 个 π 电子在环的周围发生离域。这使得环的稳定性增加, 因此芳香环不如烯烃活泼。

共轭体系

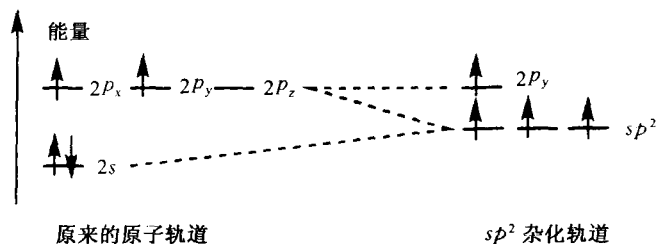
共轭体系含有交替的单键和双键, 例如共轭烯烃和 α, β -不饱和羰基化合物。在这种体系中, 一个 π 键的 p 轨道可以与相邻 π 键的 p 轨道发生重叠, 使得连接它们的键带有部分双键的性质。这种部分离域增加了共轭体系的稳定性。

相关主题

烯烃和炔烃的性质 (H2) 性质 (J2)
共轭二烯烃 (H11) α, β -不饱和醛酮 (J11)
芳香性 (I1) 结构和性质 (K1)

定义

sp^2 杂化中, s 轨道与 2 个 $2p$ 轨道 (如 $2p_x$ 和 $2p_z$ 轨道) 混合, 形成 3 个能量相同的 sp^2 杂化轨道, 剩余的 $2p_y$ 轨道不受其影响。杂化轨道的能量高于原来的 s 轨道, 但低于原来的 p 轨道。剩余的 $2p$ 轨道 (本例中为 $2p_y$ 轨道) 保持原来的能级 (图 A4.1)。

图 A4.1 sp^2 杂化

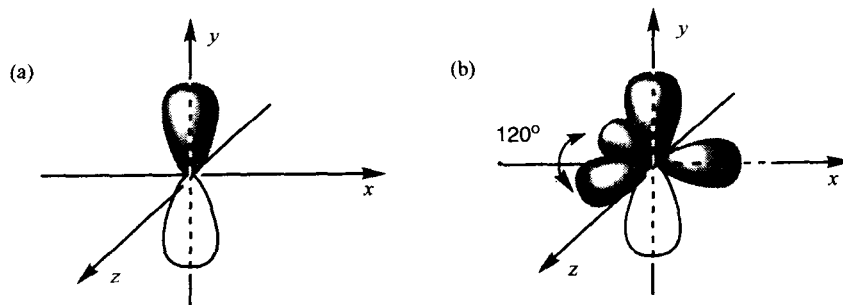
电子排布

碳原子有 4 个价电子，排布到 3 个 sp^2 轨道和剩余的 $2p$ 轨道。根据洪德规则，3 个电子首先分别进入杂化轨道，均为半充满状态。剩余的 1 个电子要么进入半充满的 sp^2 轨道与原先的电子配对，要么占据 $2p_y$ 空轨道。通常情况下，电子在填满相同能级的轨道后再占据更高能级的轨道。然而，如果轨道间的能量相差很小（如本例），电子更易进入能量较高的 $2p_y$ 轨道。这样便有 3 个半充满 sp^2 轨道和 1 个半充满 p 轨道（如图 A4.1），碳原子因此可以形成 4 根键。

几何形状

$2p_y$ 轨道呈正常的哑铃状。 sp^2 轨道呈变形的哑铃状，与 sp^3 轨道形状相似。但是 sp^2 轨道大小瓣间的差异比 sp^3 轨道的更大。

杂化轨道和 $2p_y$ 轨道在空间的分布使得彼此间相隔尽可能地远。 $2p_y$ 轨道的两个波瓣占据 x 轴和 z 轴所在平面的上下方（如图 A4.2a）。3 个 sp^2 轨道（仅画出大波瓣）在剩余空间的分布使得杂化轨道与 $2p_y$ 轨道及杂化轨道之间相隔尽可能地远。因此，它们均分布在 $x-z$ 平面上，分别指向三角形的三个顶角（平面三角形；图 A4.2b），每个瓣间的夹角为 120° 。现在可以观察 sp^2 杂化碳原子的成键情况：

图 A4.2 (a) $2p_y$ 轨道的几何形状；(b) $2p_y$ 轨道和 sp^2 杂化轨道的几何形状

烯烃

sp^2 杂化导致 3 个半充满 sp^2 杂化轨道形成平面三角形，这 3 个轨道在成键中的用途解释了烯烃的形状，如乙烯（ $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ ）。考查 C—H 键，氢原子的半充满 $1s$ 轨道和碳原子的半充满 sp^2 轨道形成一根强的 σ 键