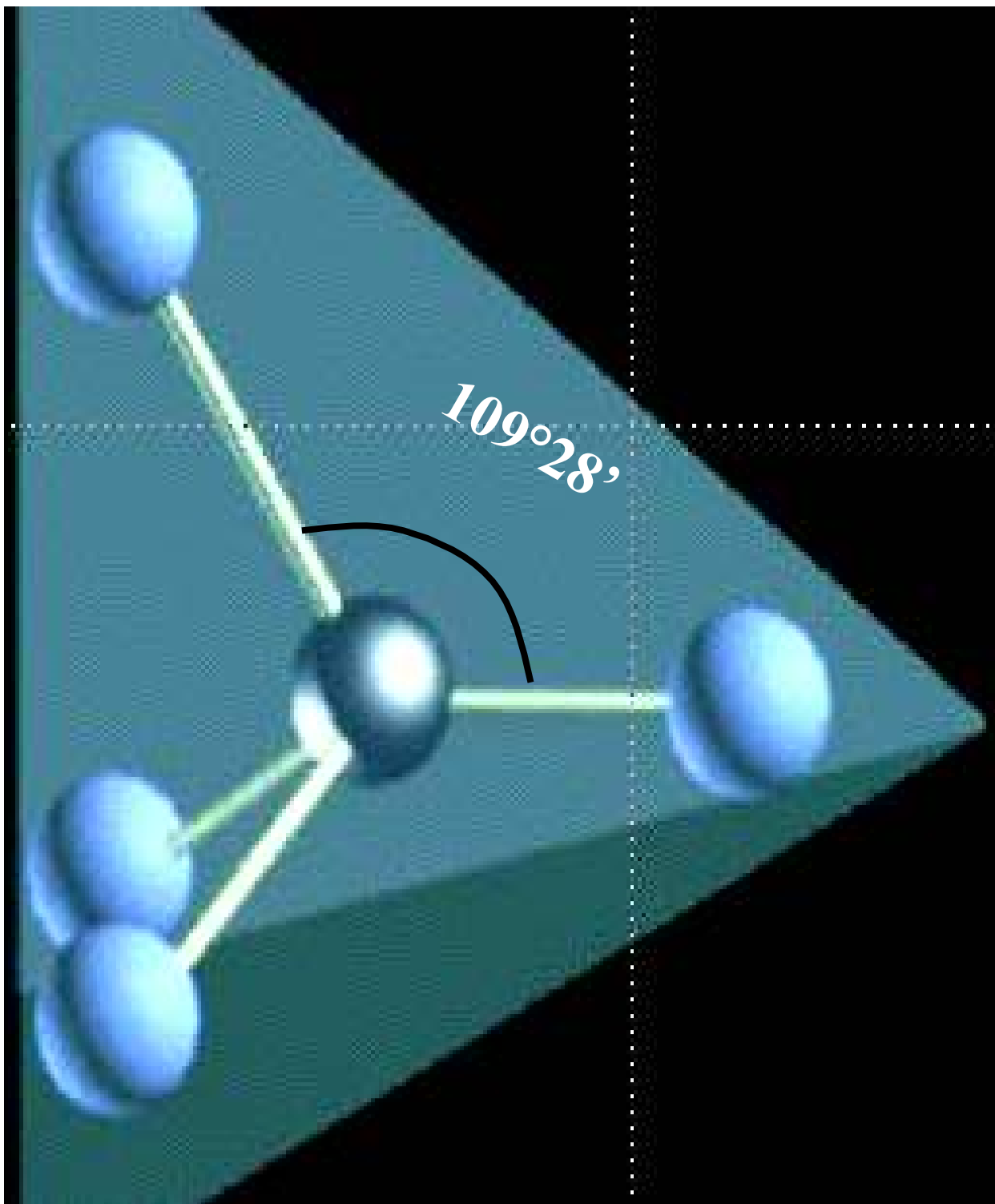


第二节

分子空间构型



杂化轨道理论

—解释分子的立体构型

杂化轨道的概念

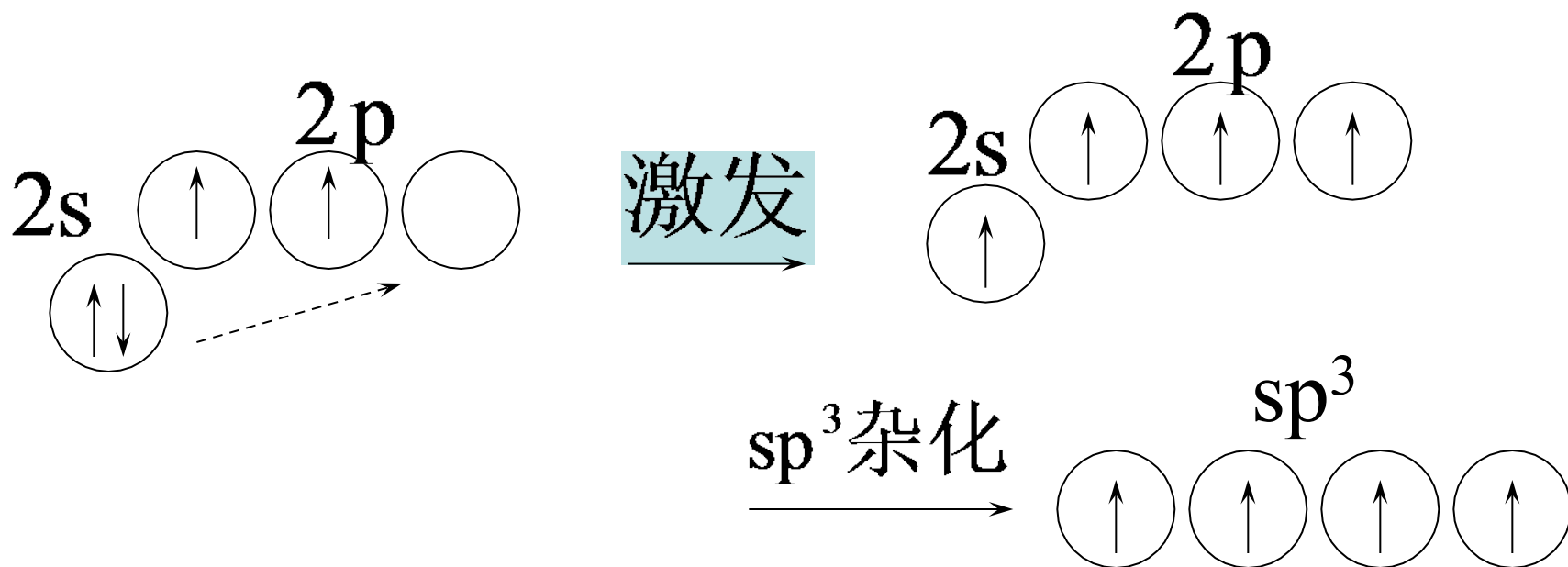
在形成多原子分子的过程中，中心原子的若干能量相近的原子轨道间经过相互的混杂后，形成相同数量的几种能量与形状都相同的新轨道。

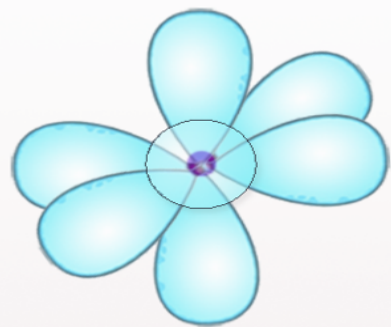
※杂化轨道只用于形成 σ 键或者用来容纳孤对电子

剩余的p轨道能够形成 π 键

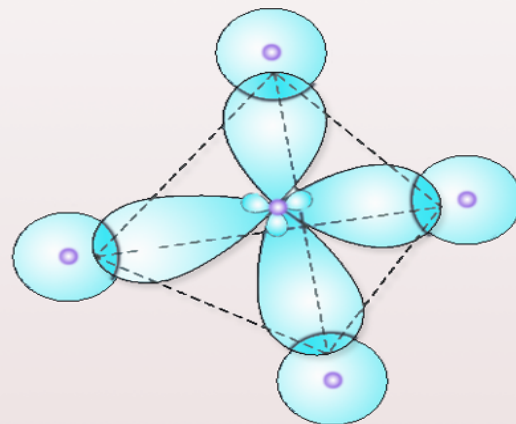
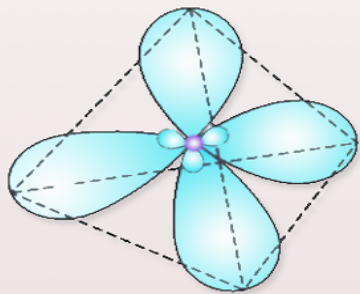
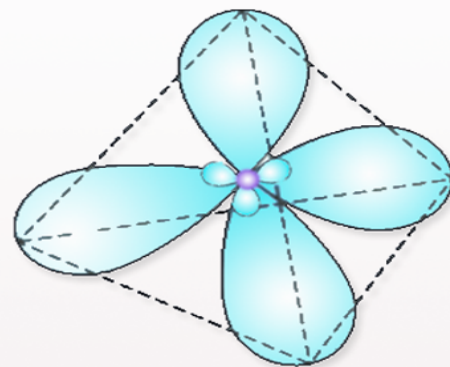
杂化轨道理论

CH_4 的形成





sp^3



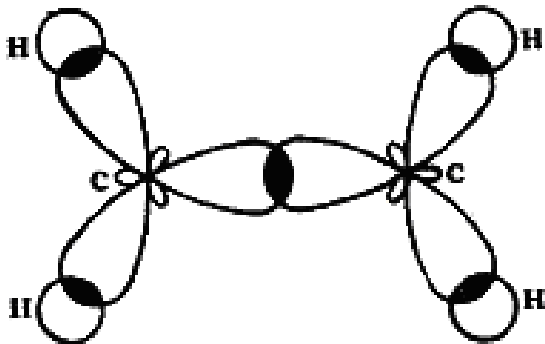
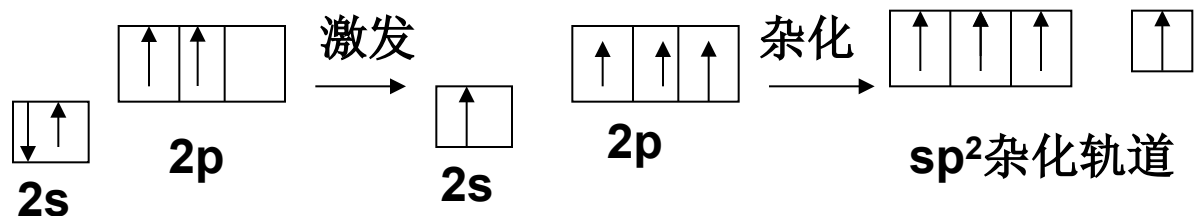
H

C

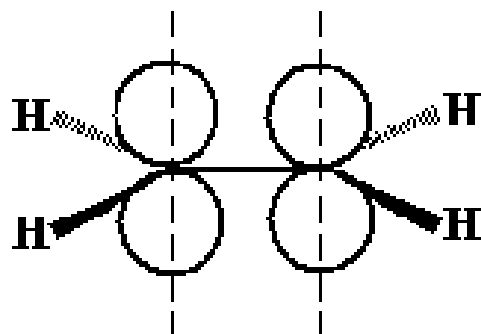
CH₄

sp^2 杂化轨道

如 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$: C的电子构型: $1s^2 2s^2 2p^2$



乙烯分子的 σ 骨架

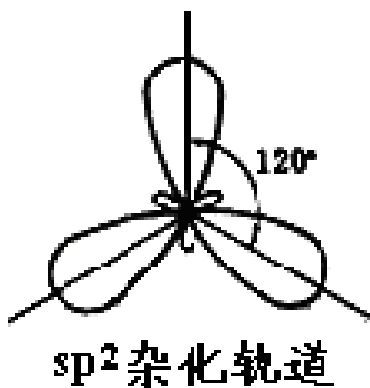
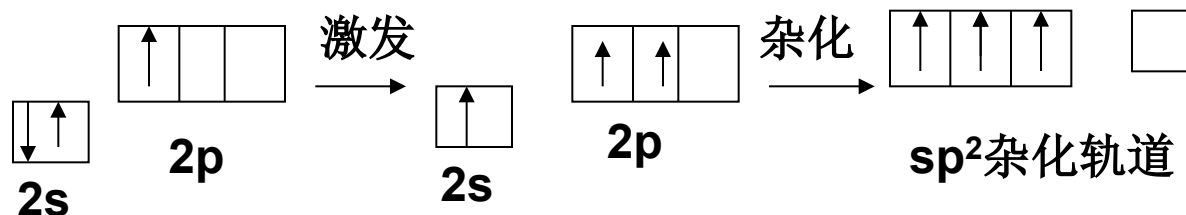


两个碳原子上都有一种与 σ 骨架平面垂直的未杂化的 p 轨道，它们相互平行，彼此肩并肩重叠形成 π 键：

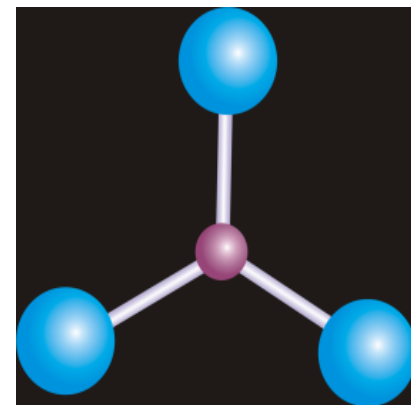
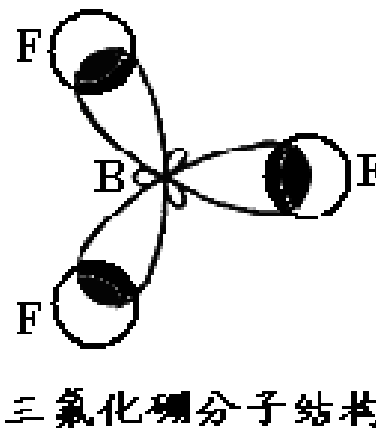
sp^2 杂化轨道

一种s轨道与两个p轨道杂化，得三个 sp^2 杂化轨道，三个杂化轨道在空间分布是在**同一平面**上，互成 **120°** 。

如 BF_3 ：B的电子构型： $1s^2 2s^2 2p^1$



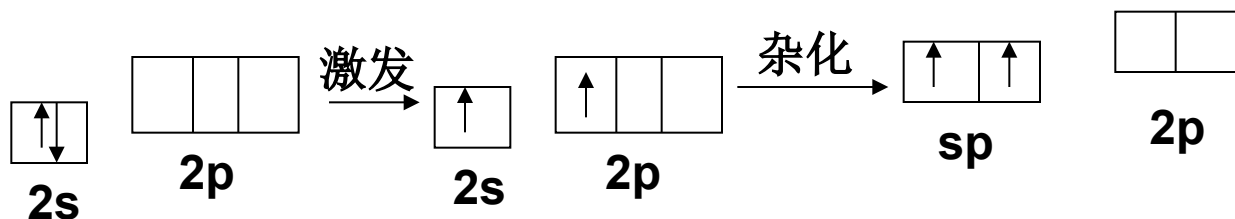
在F原子与硼原子之间形成了3个等价的 σ 键：



sp杂化轨道

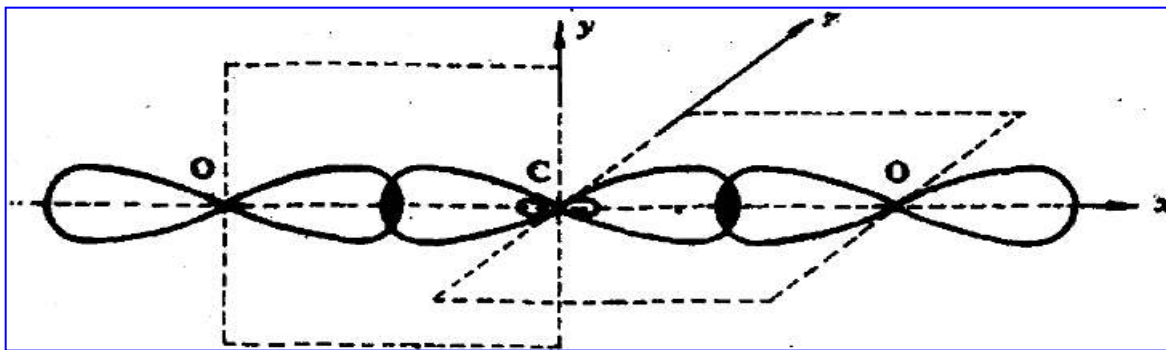
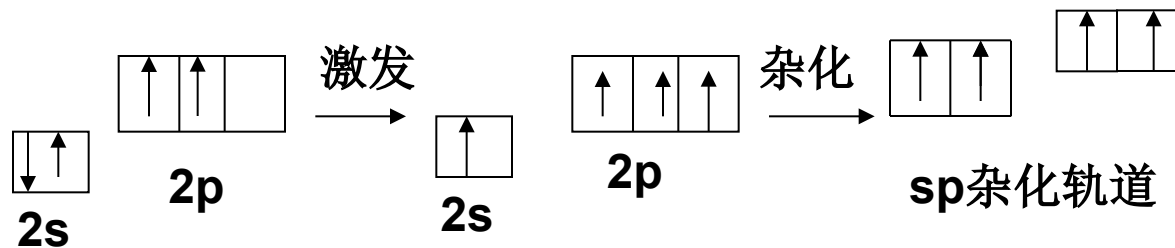
一种s轨道与一种p轨道杂化后，得两个sp杂化轨道，杂化轨道的空间取向为**直线型**，夹角为**180°**。

如BeCl₂、BeF₂：Be的电子构型：**1s²2s²**



sp 杂化轨道

如 CO_2 : C的电子构型: $1s^2 2s^2 2p^2$



CO_2

杂化轨道的类型

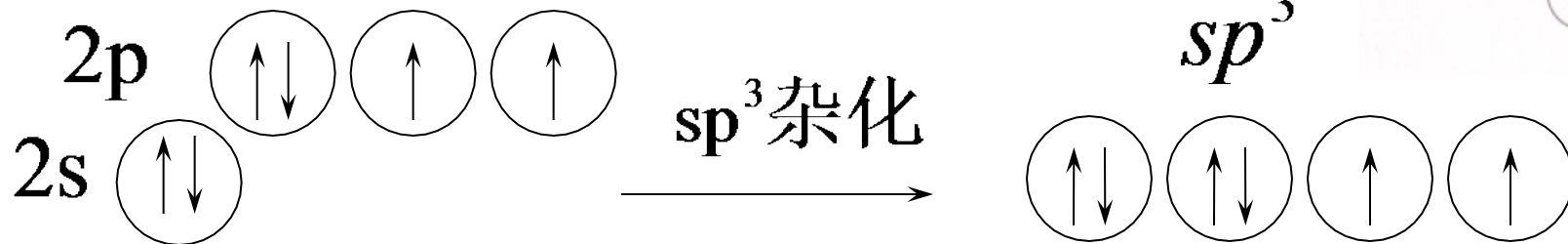
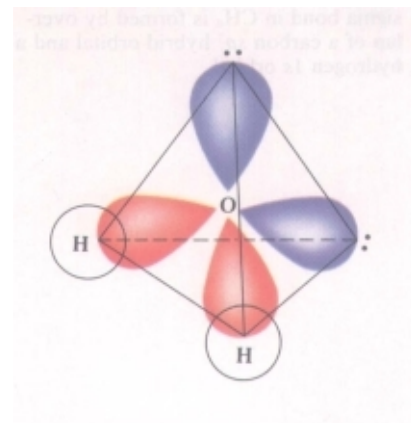
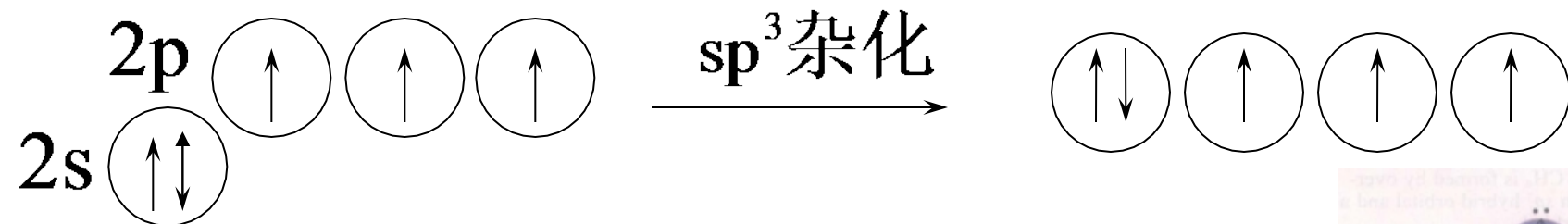
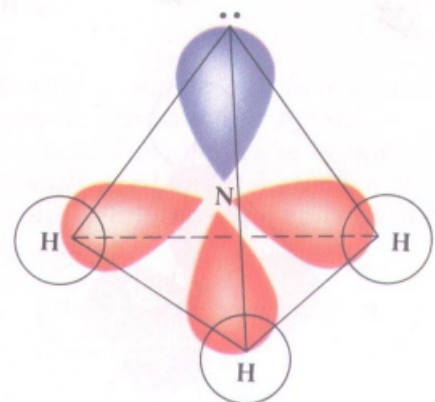
杂化类型	sp	sp ²	sp ³
• 参加杂化的原子轨道	1s + 1p	1s + 2p	1s + 3p
杂化轨道数	2个sp杂化轨道	3个sp ² 杂化轨道	4个sp ³ 杂化轨道
杂化轨道间夹角	180°	120°	109° 28'
空间构型	直线	正三角形	正四面体
实例	BeCl ₂ , C ₂ H ₂	BF ₃ , C ₂ H ₄	CH ₄ , CCl ₄

等性杂化和不等性 sp^3 杂化

与中心原子键合的是同一种原子，分子呈高度对称的正四面体构型，其中的4个 sp^3 杂化轨道自然没有差别，这种杂化类型叫做等性杂化。

中心原子的4个 sp^3 杂化轨道用于构建不同的 σ 轨道，如 H_2O 的中心原子的4个杂化轨道分别用于 σ 键和孤对电子对，这4个杂化轨道显然有差别，叫做不等性杂化。

不等性 sp^3 杂化



常见杂化轨道及其几何构型

① sp^3 杂化——正四面体 CH_4 、 CCl_4 、 NH_4^+ 、 SiF_4 、 $SiCl_4$ 等

不等性 sp^3 杂化 H_2O (V型)、 NH_3 (三角锥型)、 PCl_3

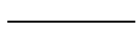
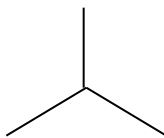
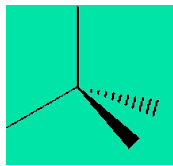


② sp^2 杂化——平面三角形

BF_3 、 BCl_3 、 SO_3 、乙烯、苯、石墨等， SO_2 (V型)

③ sp 杂化——直线型

$BeCl_2$ 、乙炔、 CO_2 、 CS_2 等

小结：杂化轨道的类型与分子的空间构型

杂化轨道类型	SP	SP ²	SP ³	不等性 SP ³	
参加杂化的轨道	s+p	s+(2)p	s+(3)p	s+(3)p	
杂化轨道数	2	3	4	4	
成键轨道夹角	180°	120°	109°28'	90° < θ < 109°28'	
分子空间构型					
	直线形	三角形	四面体	三角锥	V型
实例	BeCl ₂ HgCl ₂	BF ₃ BCl ₃	CH ₄ SiCl ₄	NH ₃ PH ₃	H ₂ O H ₂ S
中心原子	Be(II A) Hg(II B)	B(III A)	C, Si (IV A)	N, P (V A)	O, S (VI A)

等电子原理

- 原子数相同、价电子数（指全部电子总数或价电子总数）相同的分子或离子，互称为等电子体。等电子体的构造相同、物理性质相近。

互为“等电子体”应满足的条件

- 1、在微粒的构成上，微粒所含原子数目相同
- 2、在微粒的构成上，微粒所含的电子数相等（指全部电子总数或价电子总数）

几组常见的等电子体及特征

(1) 2原子10价电子

如： N_2 、 CO 、 C_2^{2-} 、 CN^- —— 直线型

(2) 2原子11价电子

如： NO 、 O_2^+ 、—— 直线型

(3) 3原子16价电子

如： CO_2 、 BeCl_2 、 N_2O 、 NO_2^+ 、 N_3^- —— 直线型

(4) 3原子18价电子

如： NO_2^- 、 SO_2 、 O_3 —— V型或角型

(5) 3原子24价电子

如： NO_3^- 、 BF_3 、 CO_3^{2-} 、 SO_3 —— 平面正三角形

(6) 5原子32价电子

如： SiF_4 、 CCl_4 、 SO_4^{2-} 、 PO_4^{3-} —— 正四面体

(7) $(\text{BN})_n$ 晶体和碳单质具有类似构造。

$\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_6$ 与 C_6H_6 是等电子分子。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/025304222012011334>