

高中化学选必2

课时2.2 分子的结构与性质

第二节 分子的空间结构

2.2.3 杂化轨道理论简介

年 级：高二
学 科：化学
(人教版)

学 科：化





课标要求

1. 知道杂化轨道理论的基本内容.
2. 能根据杂化轨道理论确定简单分子的空间结构.



素养目标

1. 通过认识分子结构以及杂化轨道理论, 分析杂化类型与分子空间结构的关系, 培养宏观辨识与微观探析的核心素养。
2. 结合实例了解共价分子具有特定的空间结构, 并可运用杂化轨道理论进行解释, 培养证据推理与模型认知的核心素养。

写出碳原子的核外电子排布图，思考为什么碳原子与氢原子结合形成 CH_4 ，而不是 CH_2 ？

按照我们已经学过的价键理论，甲烷的4个C—H单键都应该是 σ 键，然而，碳原子的4个价层原子轨道是3个相互垂直的2p轨道和1个球形的2s轨道，用它们跟4个氢原子的1s原子轨道重叠，不可能得到正四面体构型的甲烷分子

如何解决这一矛盾，鲍林提出了杂化轨道理论



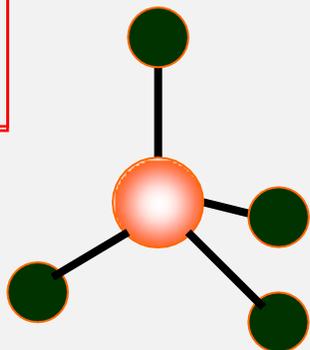
杂化轨道 理论简介

【主干知识梳理】一、杂化轨道理论简介 1、杂化轨道理论**论的提出****用杂化轨道理论解释甲烷分子的形成**

CH₄分子呈正四面体形，4个C—H的键长相同，H—C—H的键角为109° 28'。碳原子的价电子排布图为 $\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}\boxed{}$ ，根据共价键的饱和性，碳原子只有2个未成对电子，只能形成2个共价键，而实际上碳原子都是形成了4个共价键，只能是2s²上面的1个电子激发到2p²上面，形成了，此时有4个未成对电子，满足形成4个共价键，然而，碳原子的4个价层原子轨道是3个相互垂直的2p轨道和1个球形的2s轨道，用它们跟4个氢原子的1s原子轨道重叠，不可能得到正四面体形的甲烷分子。为解决这一问题，鲍林提出了**杂化轨道理论**：当碳原子与4个氢原子形成CH₄分子时，碳原子的**2s**轨道和3个**2p**轨道发生混杂，混杂时保持**轨道总数不变**，却得到**4个新的能量相同、方向不同的轨道**，各指向正四面体的4个顶角，夹角为109° 28'，称为**sp³杂化轨道**，表示这4个轨道**由1s轨道和3个p轨道杂化形成的**。当碳原子跟4个氢原子结合时，碳原子以4个**sp³杂化轨道**分别与4个H原子的1s轨道重叠形成4个C—H σ 键，所以4个C—H键是**等同的**。



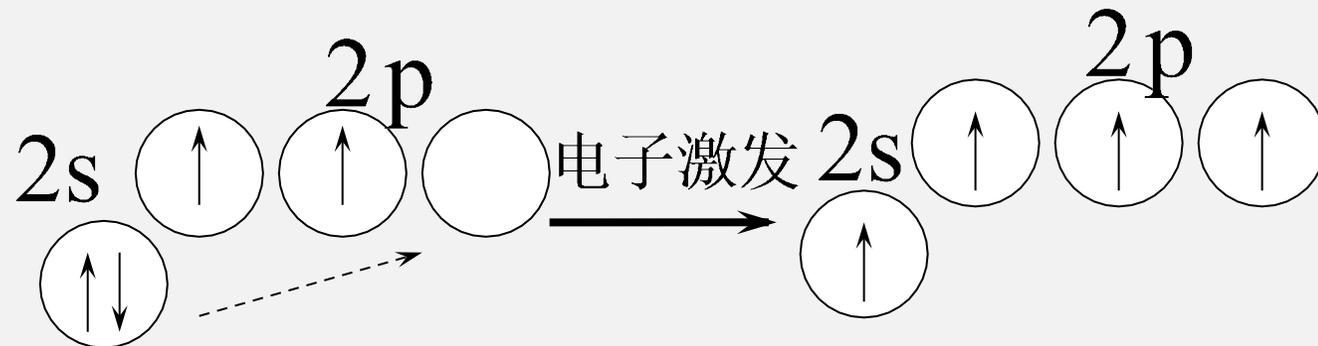
原子轨道重叠



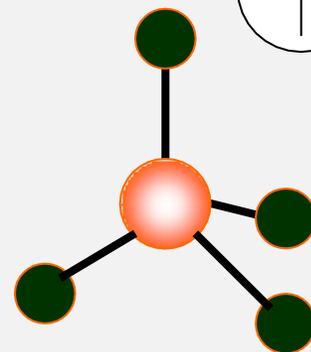
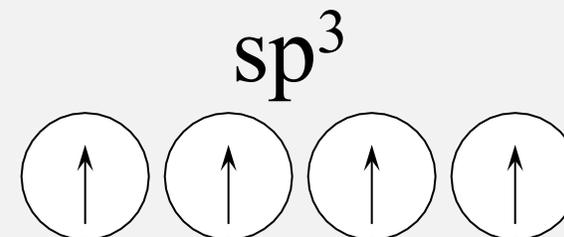
CH₄不可能得到正四面体形

No Image

用杂化轨道理论解释甲烷分子的形成

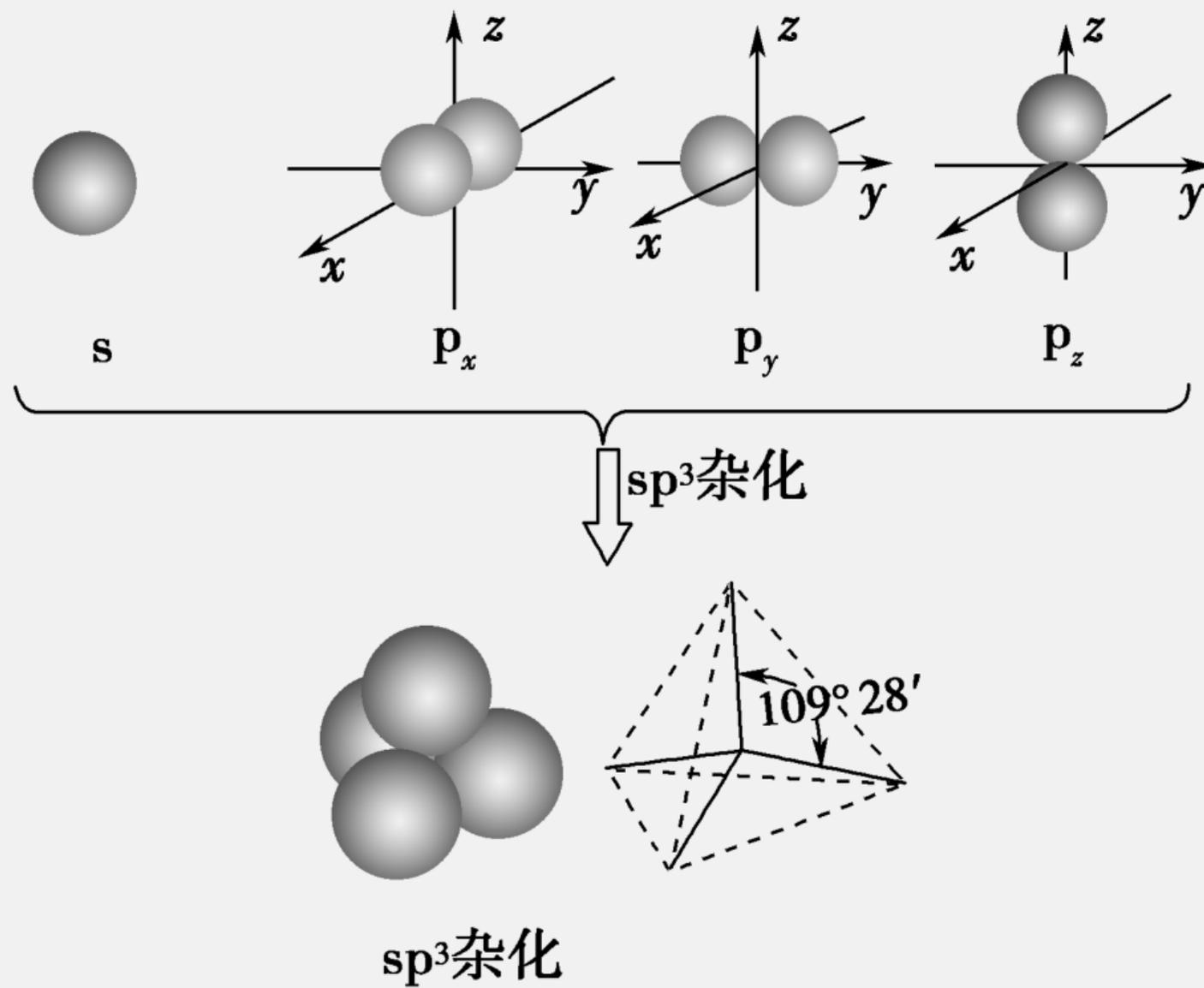


sp³杂化



杂化轨道理论

CH₄分子 (sp³杂化)



2、杂化轨道理论——杂化轨道理论是一种**价键理论**，是鲍林为了解释分子的**立体构型**提出的**(1)轨道的杂化**：在形成多原子分子时，中心原子价电子层上的某些**能量相近**的原子轨道发生混杂，**重新组合成一组新的轨道**的过程，叫做**轨道的杂化****(2)杂化轨道**：原子轨道杂化后形成的一组新的原子轨道，叫做**杂化原子轨道**，简称**杂化轨道****3、杂化轨道理论的要点****(1)能量相近**：原子在成键时，同一原子中能量相近的原子轨道可重新组合成杂化轨道

如：2s轨道与3p轨道不能形成 sp^3 杂化轨道，因为2s与3p不在同一能级，能量相差较大**(2)数目不变**：杂化前后**原子轨道数目不变**（参加杂化的轨道数目等于形成的杂化轨道数目），且**杂化轨道的能量相同**

(3) 成键能力增强：杂化改变了原子轨道的形状、方向。杂化使原子的成键能力增加。杂化轨道在角度分布上比单纯的s或p轨道在某一方向上更集中，例如s轨道与p轨道杂化后形成的杂化轨道一头大一头小，如图 ，成键时根据最大重叠原理，使它的大头与其他原子轨道重叠，重叠程度更大，形成的共价键更牢固

(4) 排斥力最小：杂化轨道为使相互间的排斥力最小，故在空间取**最大夹**角分布，同一组杂化轨道的伸展方向不同，但形状完全相同

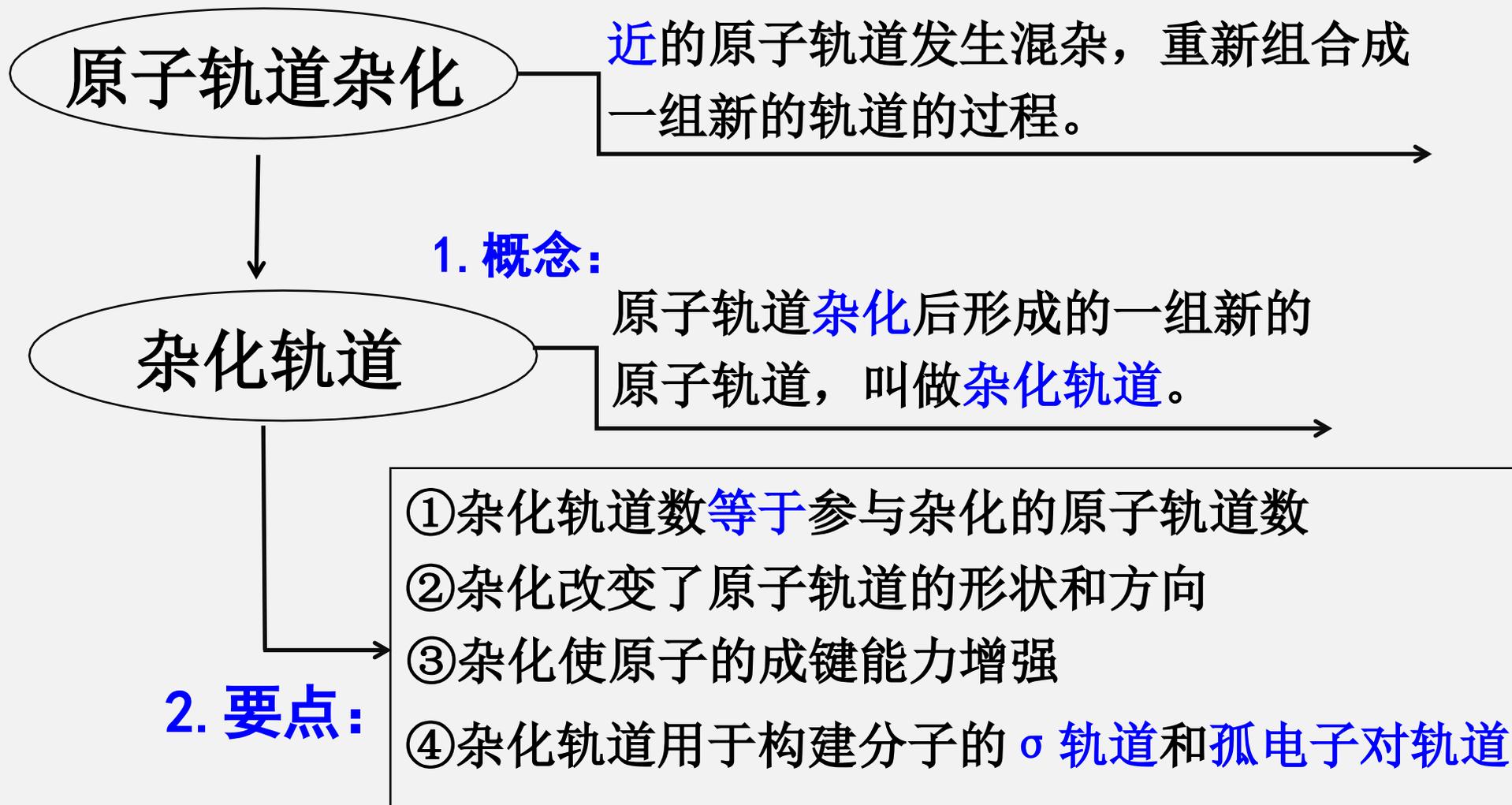
【微点拨】 ①双原子分子中，不存在杂化过程

②杂化轨道只用于形成 σ 键或用于容纳未参与成键的孤电子对③未参与杂化的p轨道可用于形成 π 键

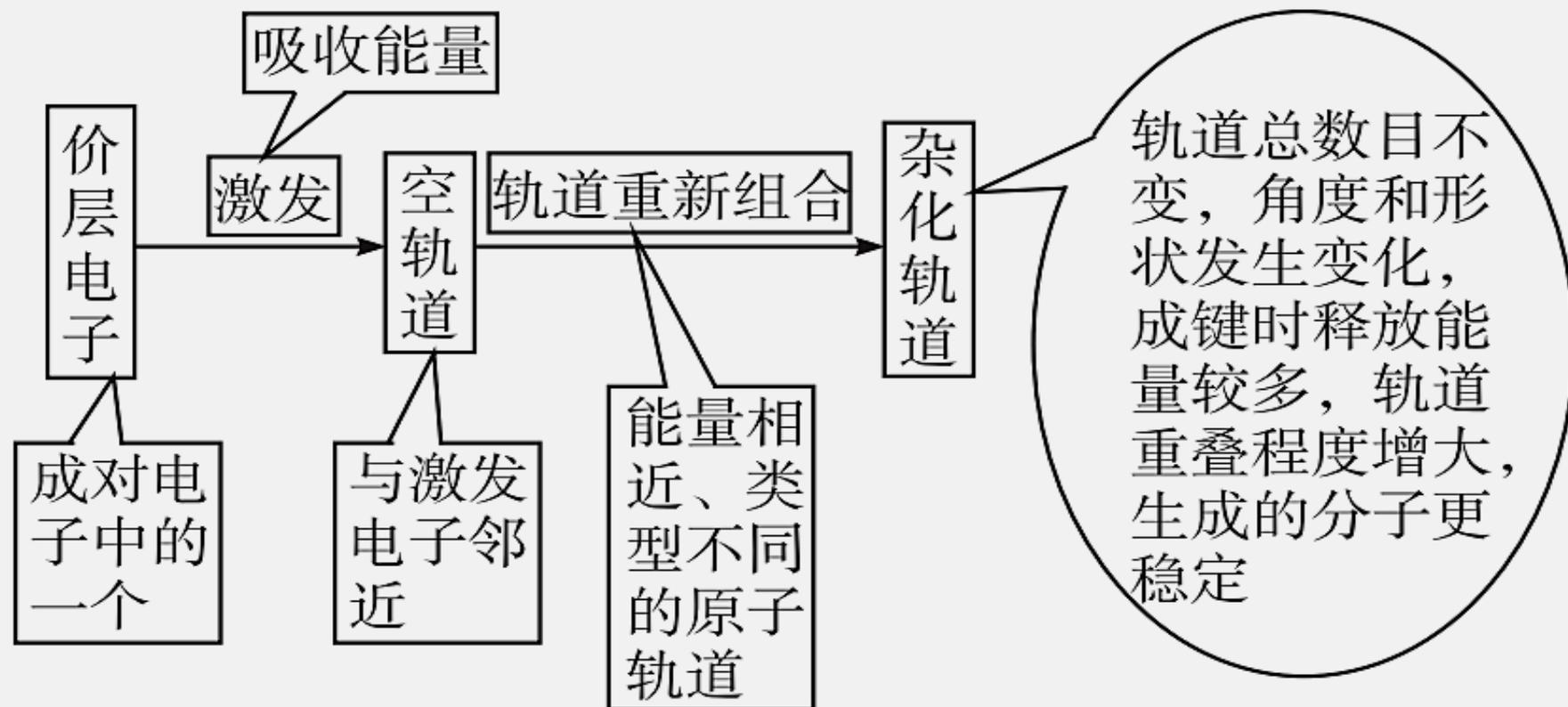
④杂化轨道呈“对称”分布，确保相互间斥力最小

【对点训练1

杂化理论轨道简介

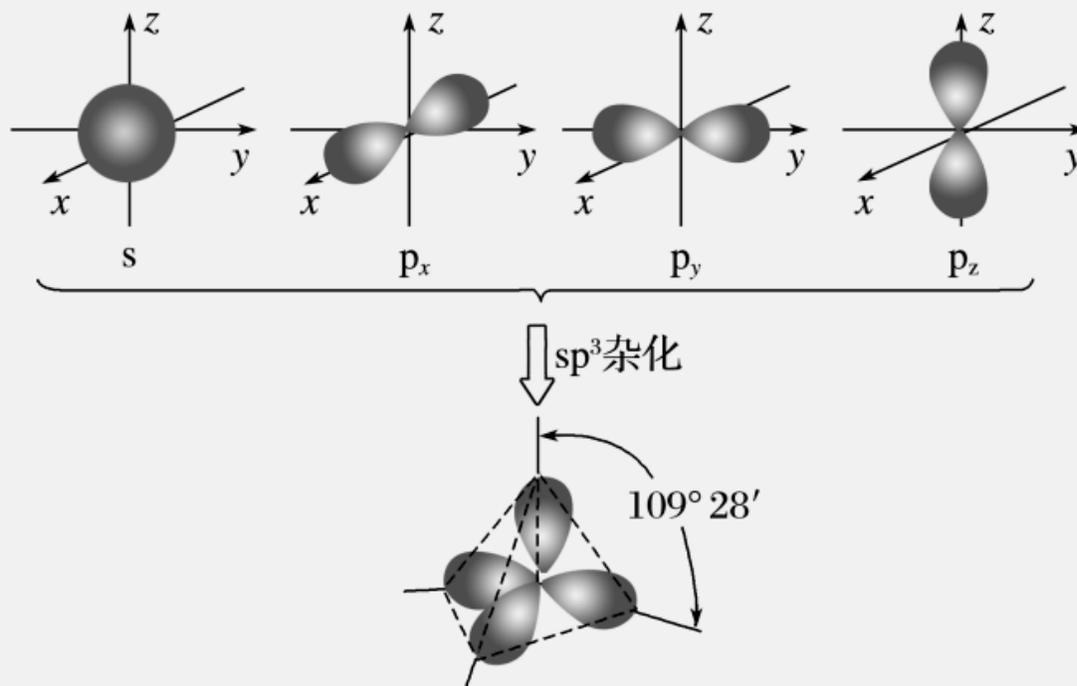


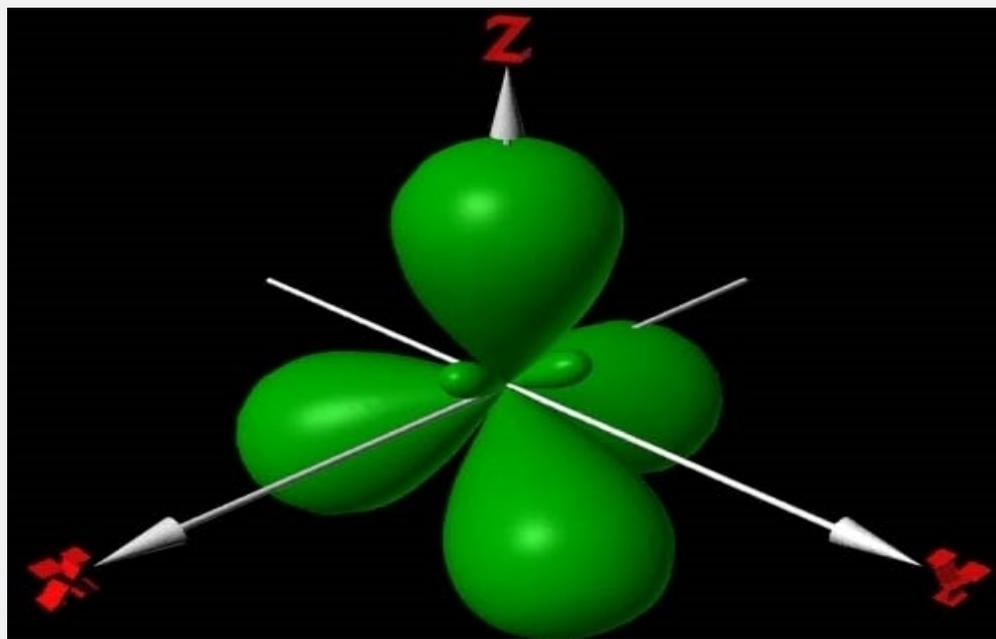
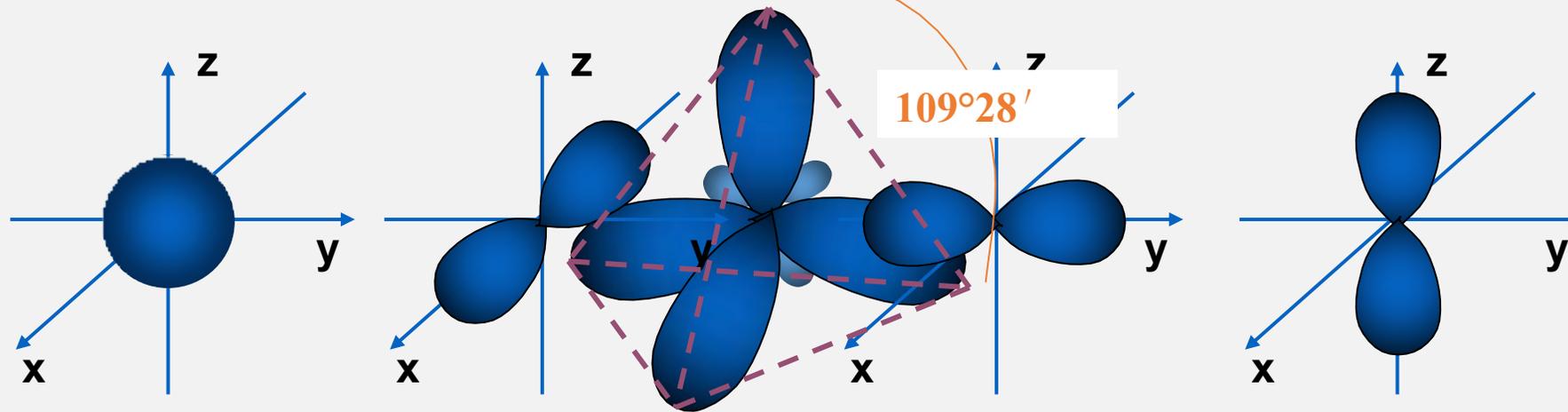
对杂化过程的理解



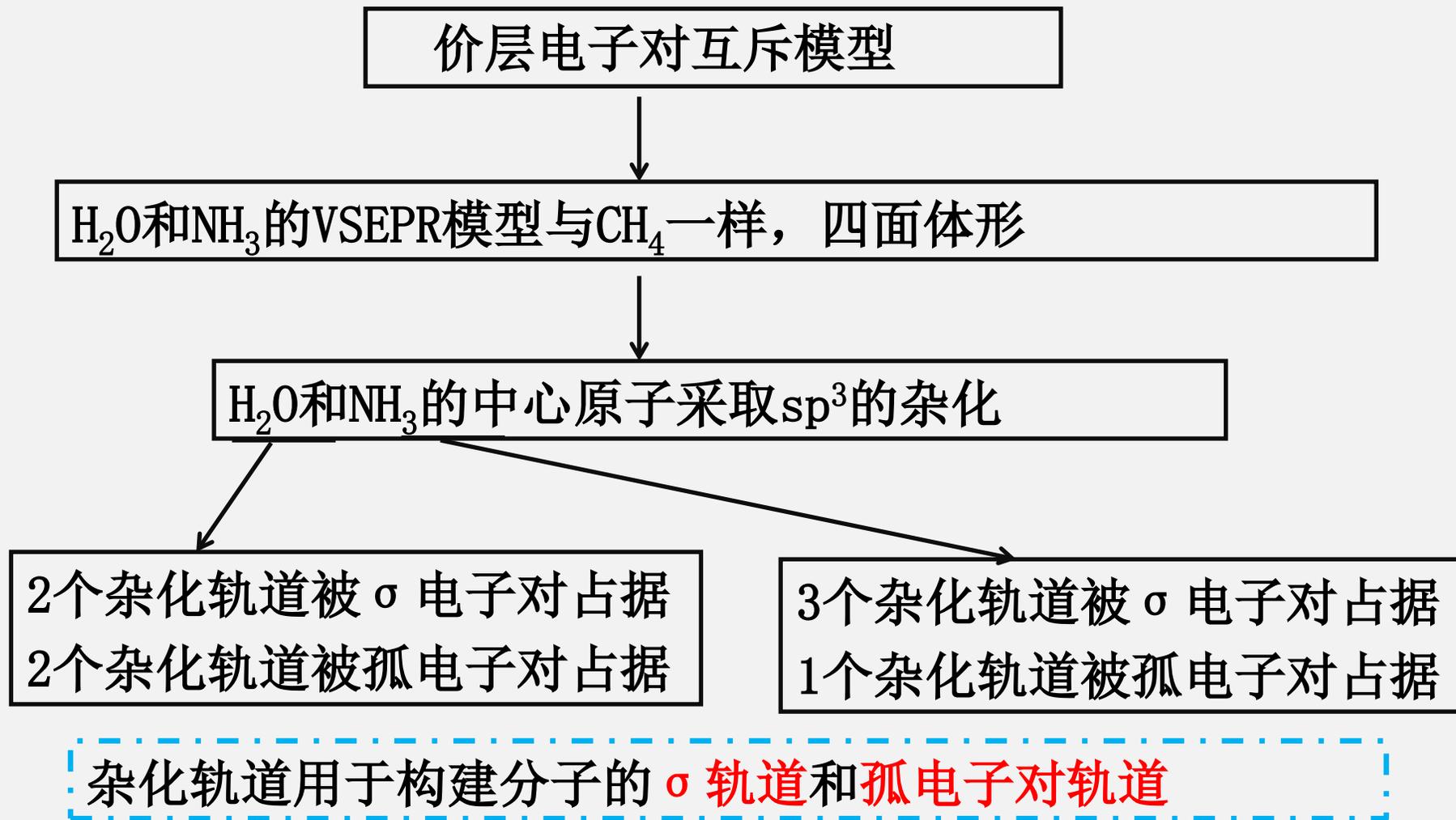
二、杂化轨道类型与分子空间结构的关系1、杂化轨道的类型(1) sp^3 杂化轨道

——四面体形① sp^3 杂化： sp^3 杂化轨道是由1个ns轨道和3个np轨道杂化而成，每个 sp^3 杂化轨道都含有、 $(1/4)$ s和 $(3/4)$ p的成分， sp^3 杂化轨道间的夹角为 $109^\circ 28'$ ，空间结构为四面体形(如 CH_4 、 CF_4 、 CCl_4)。如下图所示。



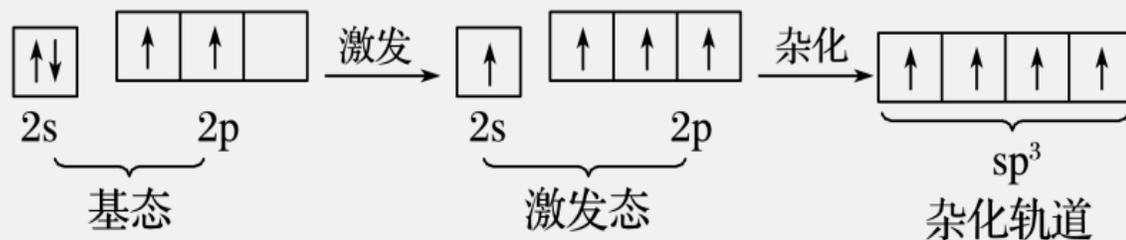
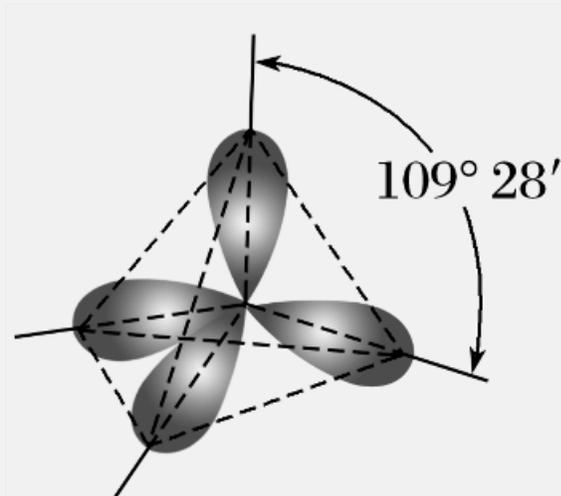
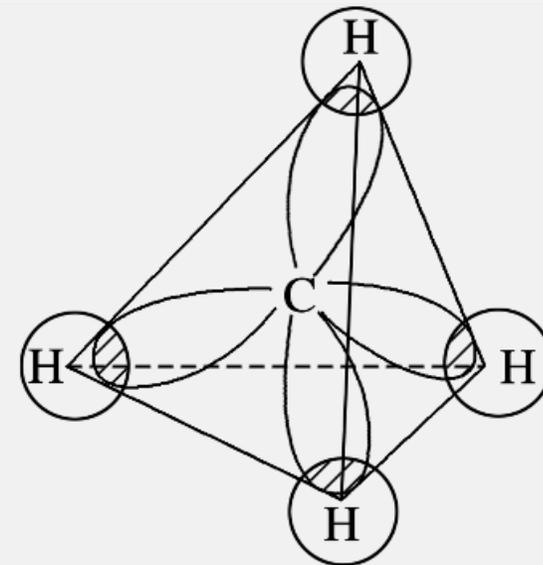


由1个s轨道和3个p轨道**混杂**并重新组合成4个能量与形状完全相同的轨道。我们把这种轨道称之为 **sp^3 杂化轨道**。

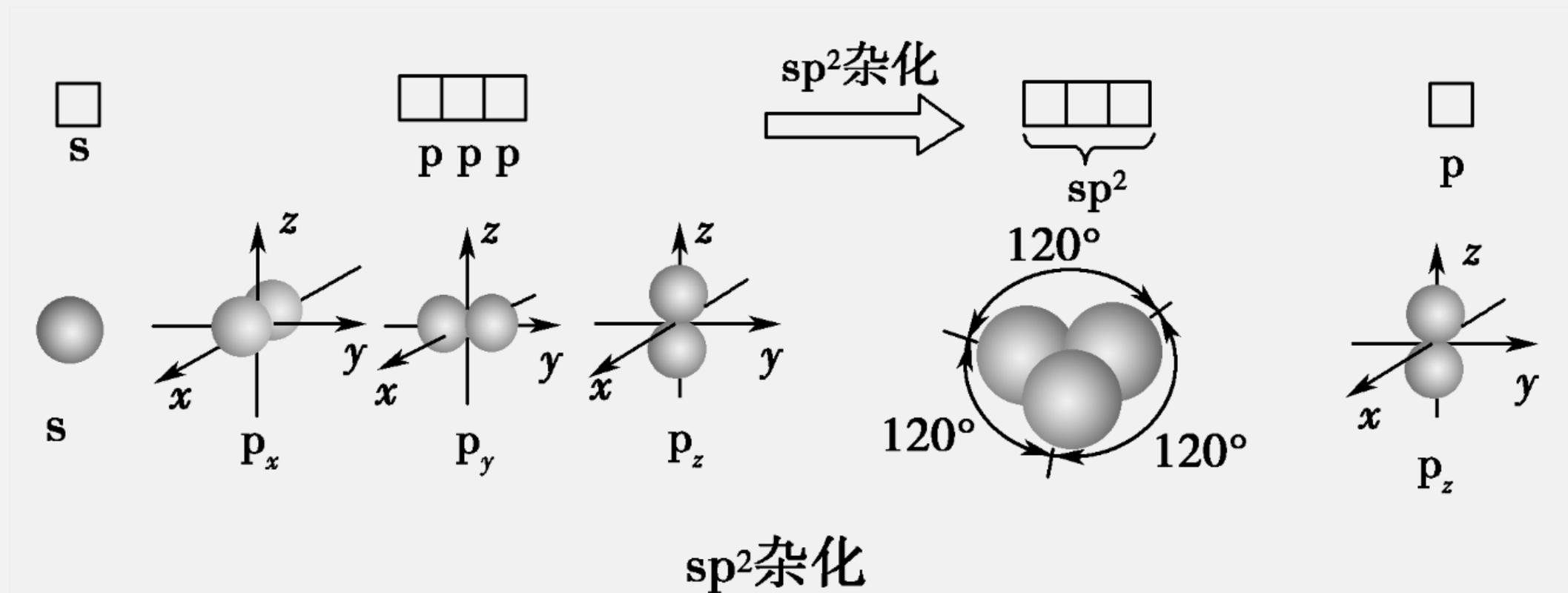


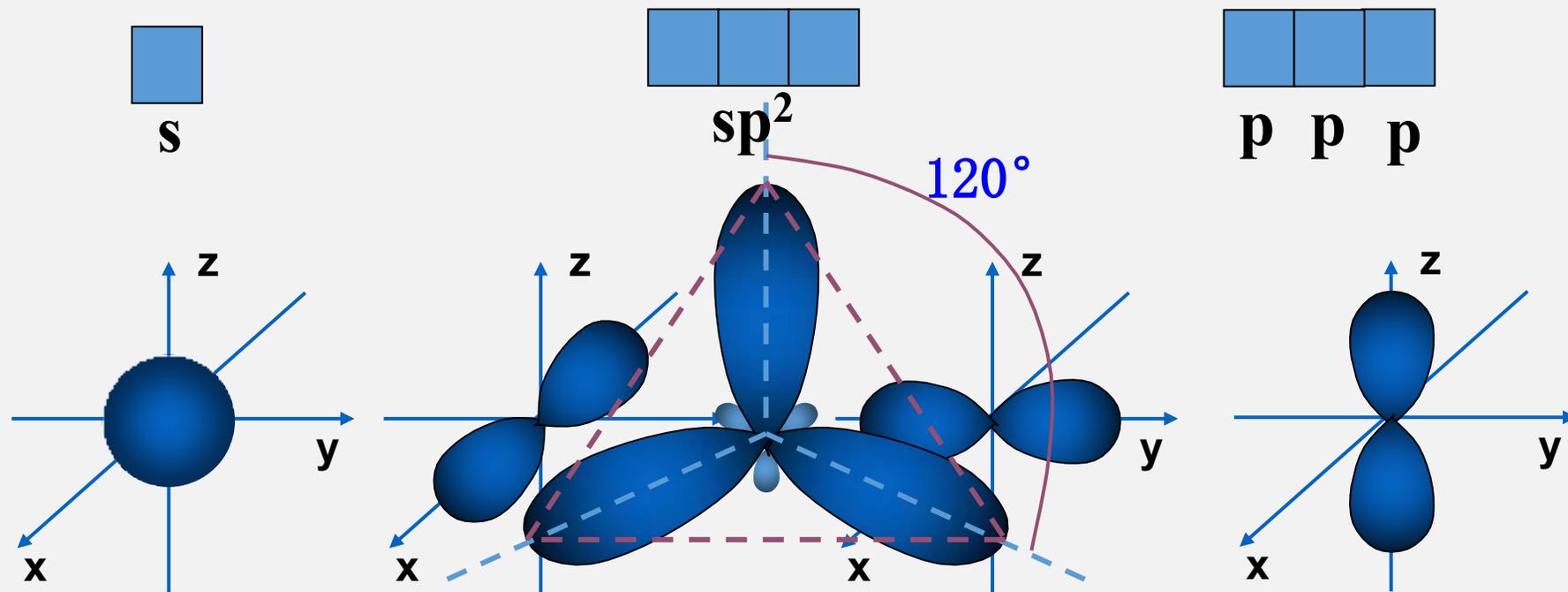
②CH₄分子的形成CH₄化学键的形成

C、H原子形成CH₄时，C原子**2s**上的**1个电子激发**到空的**2p轨道**上，2s轨道与3个2p轨道发生sp³杂化，形成了4个能量相等、相互夹角为**109° 28'**的4个相同的杂化轨道(每个轨道上一个单电子)，4个H原子的s轨道与这4个sp³杂化轨道发生轨道重叠形成**4个完全等同的σ键**，在空间对称分布。因而CH₄是**正四面体形**的分子

sp³杂化轨道示意图CH₄分子的立体构型

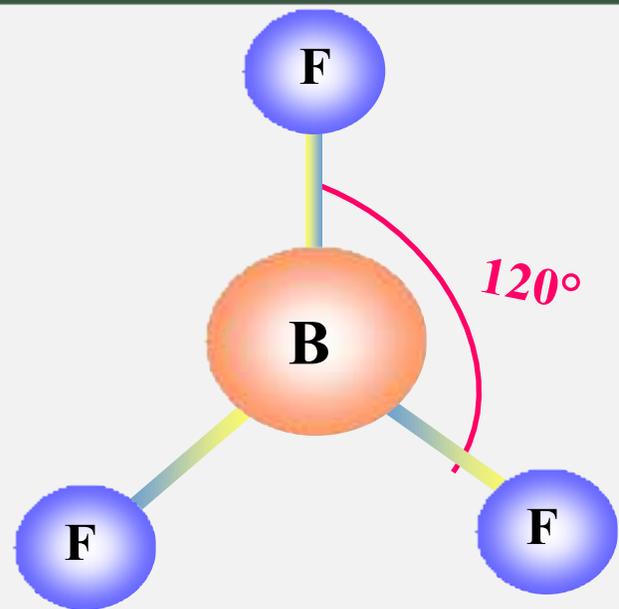
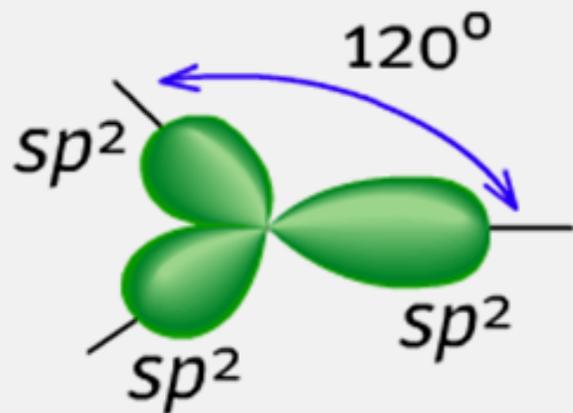
(2) sp^2 杂化轨道——平面三角形① sp^2 杂化： sp^2 杂化轨道是由1个ns轨道和2个np轨道杂化而成的，每个 sp^2 杂化轨道含有(1/3)s和(2/3)p成分， sp^2 杂化轨道间的夹角都是 120° ，呈平面三角形，如下图所示



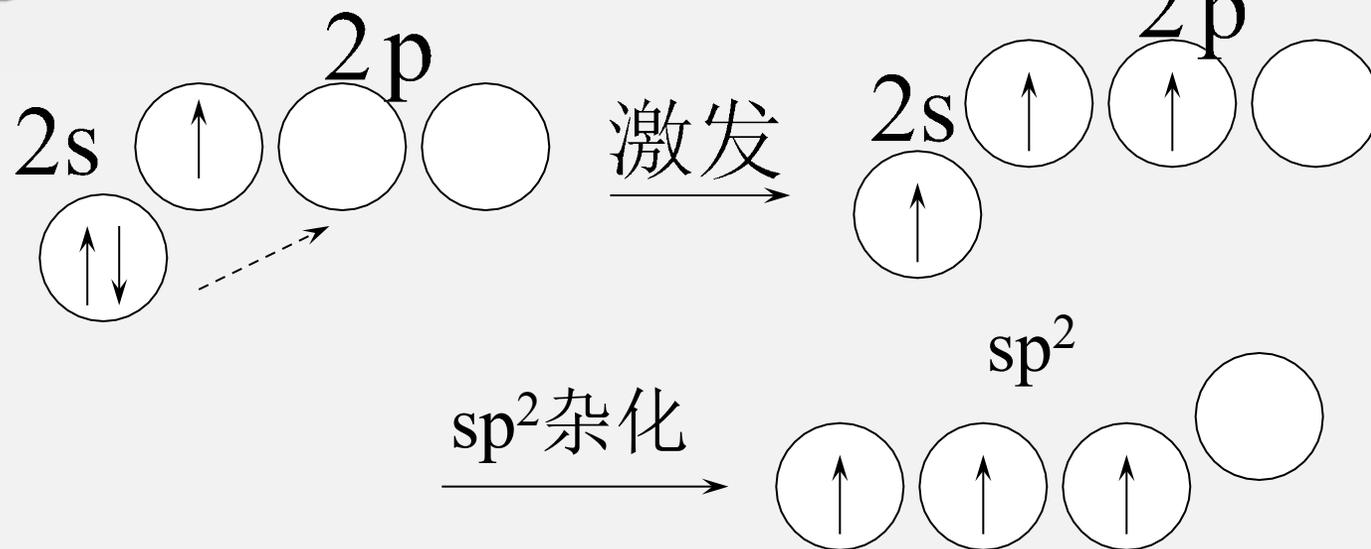


一个s轨道与两个p轨道杂化，得三个 sp^2 杂化轨道，三个杂化轨道在空间分布是在同一平面上，互成 120° ，呈平面三角形. SO_2 、 BF_3

例如： Sp^2 杂化— BF_3 分子的形成

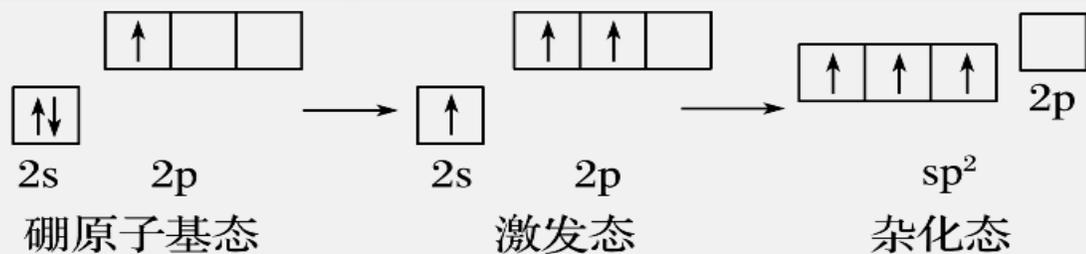
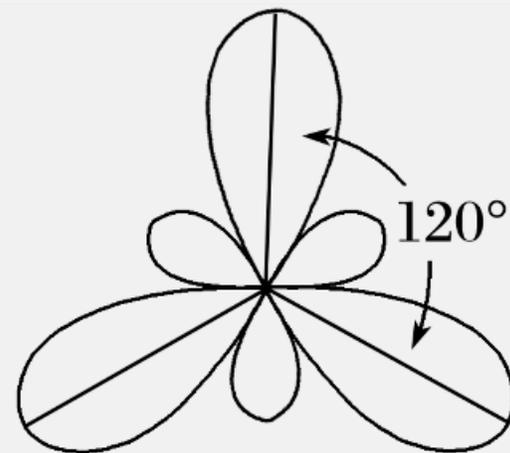
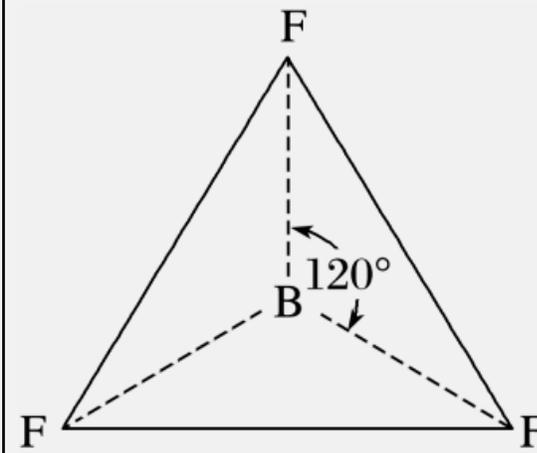


B: $1s^2 2s^2 2p^1$
没有3个单电子



②BF₃分子的形成BF₃化学键的形成

B、F原子间形成BF₃时，B原子的2s的1个电子激发到一个空的2p轨道上，2s和2个有单电子的2p轨道发生sp²杂化，形成三个能量相等、相互间夹角为120°的三个相同的杂化轨道(每个轨道上一个单电子)，3个F原子的2p轨道与这3个sp²杂化轨道发生轨道重叠形成3个完全等同的σ键，在空间对称分布，因而BF₃是平面三角形分子

sp²杂化轨道示意图BF₃分子的立体构型

③sp²杂化后，未参与杂化的一个p轨道可以用于形成π键，如：乙烯分子中的C=C键的形成

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/227142165044006060>