

第二章 第二节 分子的空间结构

# 第2课时 杂化轨道理论

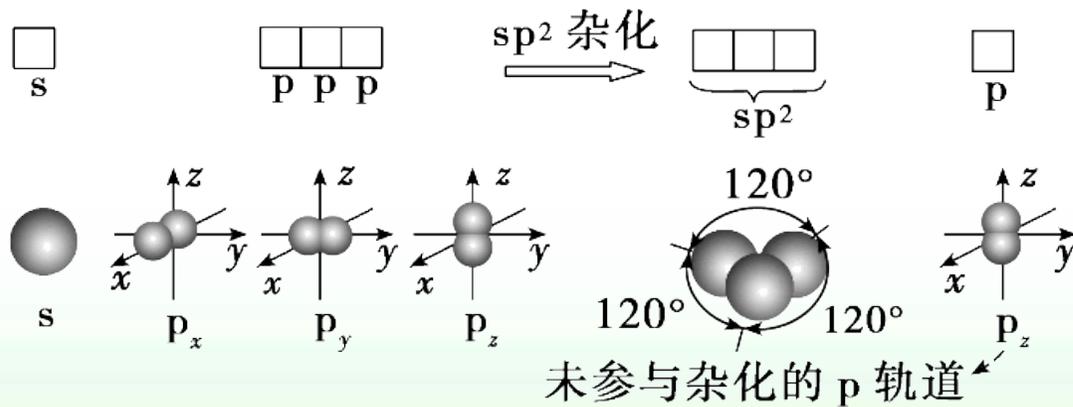
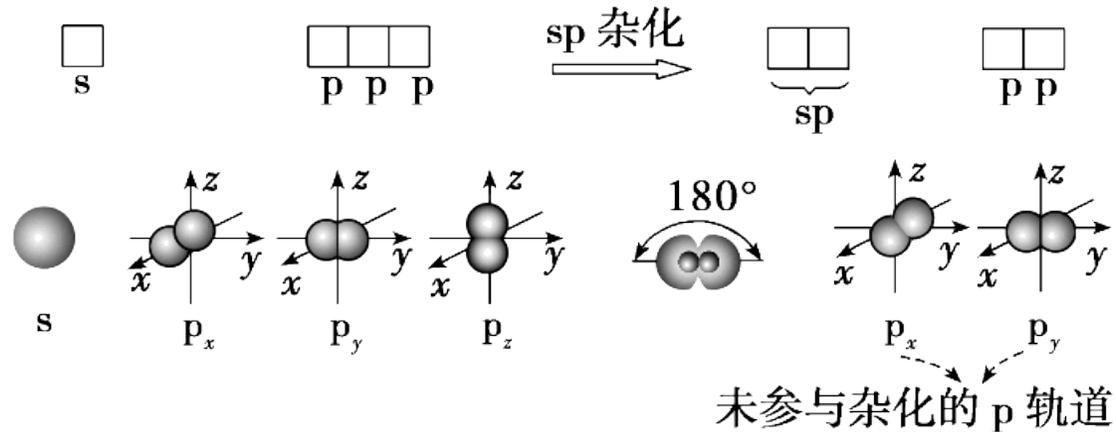
## 课程标准

1. 了解杂化轨道理论的基本内容。
2. 能根据有关理论判断简单分子或离子的空间结构。

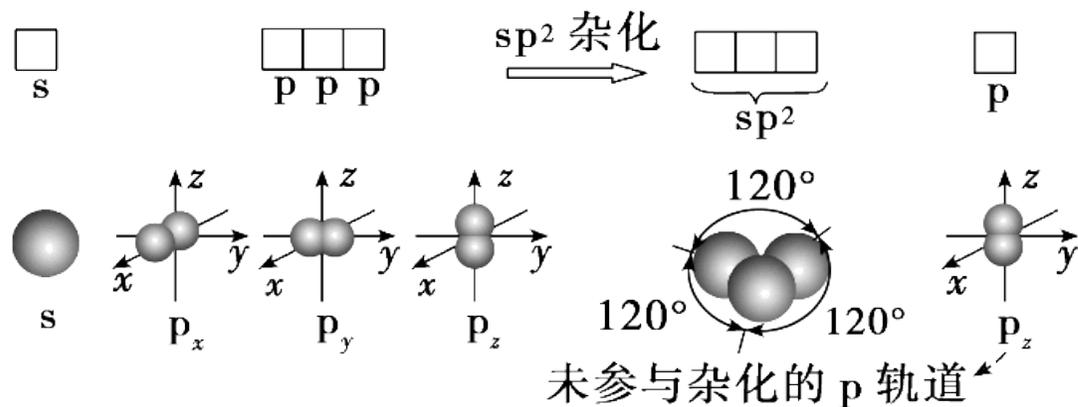
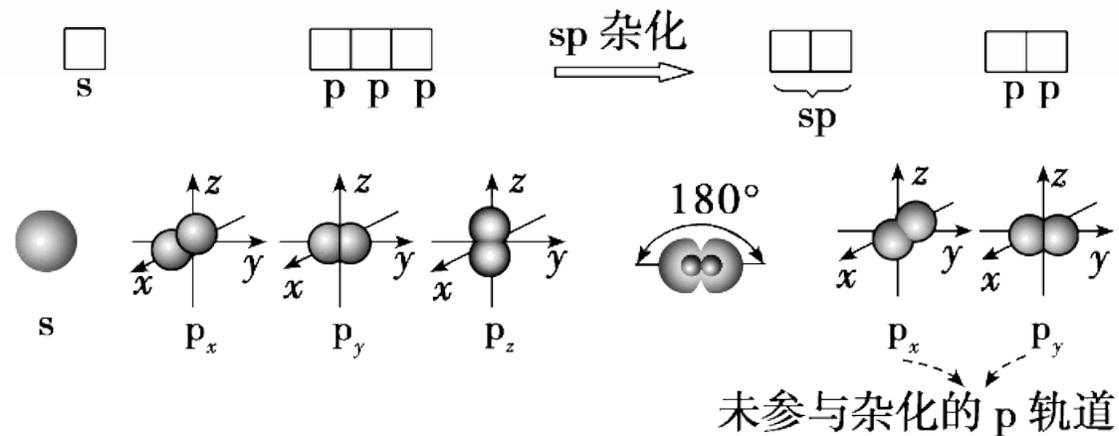
# 任务一 杂化轨道理论

## 情境探究

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(双原子分子中，不存在杂化过程)。例如 $sp$ 杂化、 $sp^2$ 杂化的过程如下：

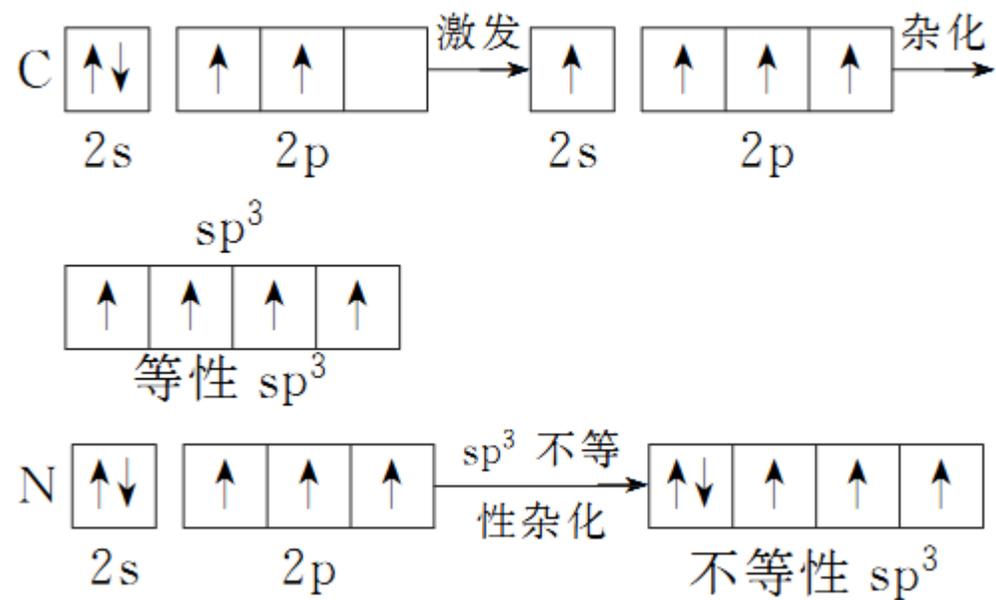


问题1: 写出甲烷中碳原子的价层电子排布式, 这些价层电子的能量是否相同?



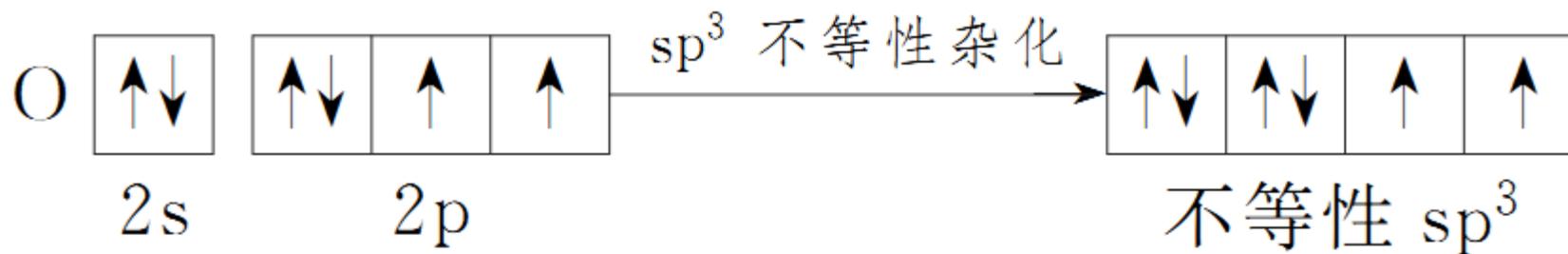
**提示:**  $2s^2 2p^2$ , 这些价层电子的能量不完全相同,  $2s$ 电子与 $2p$ 电子的能量不同。

问题2：已知 $\text{CH}_4$ 和 $\text{NH}_3$ 的中心原子杂化方式均为 $\text{sp}^3$ ，但杂化方式不尽相同，其杂化方式分别如下所示：



试分析 $\text{H}_2\text{O}$ 的中心原子O原子的杂化方式，并用杂化轨道理论解释 $\text{CH}_4$ 、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ 的空间结构。

**提示：**  $\text{H}_2\text{O}$ 的中心原子O原子的杂化方式：



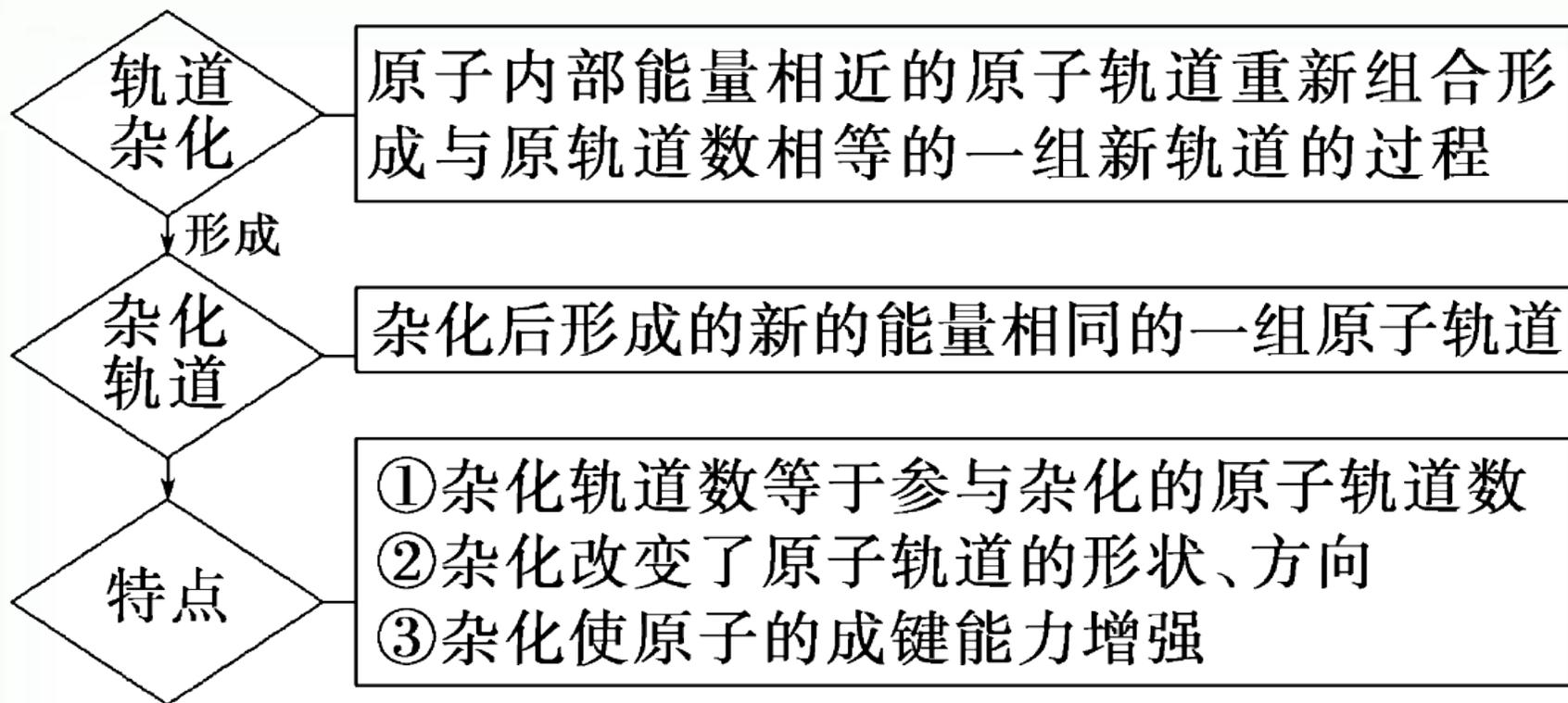
因为 $\text{CH}_4$ 、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ 分子中中心原子都有4个杂化轨道，故杂化轨道的空间结构都为四面体形。不同的是 $\text{CH}_4$ 分子中4个 $\text{sp}^3$ 杂化轨道与4个H原子的1s轨道形成完全相同的共价键，故为正四面体形；在 $\text{NH}_3$ 分子中，由于N原子上有1个 $\text{sp}^3$ 杂化轨道中是成对电子，N原子只有3个 $\text{sp}^3$ 杂化轨道与3个H原子的1s轨道形成完全相同的共价键，故为三角锥形； $\text{H}_2\text{O}$ 分子中O原子的 $\text{sp}^3$ 杂化轨道中2个杂化轨道中是成对电子，另2个杂化轨道中各有1个未成对电子，分别与H原子的1s轨道形成共价键，故为V形的空间结构。

杂化轨道理论是一种价键理论，是化学家鲍林为了解释分子的空间结构提出的。

### 1. 用杂化轨道理论解释甲烷分子的形成

在形成 $\text{CH}_4$ 分子时，碳原子的一个2s轨道和三个2p轨道发生混杂，形成四个能量相等的 $\text{sp}^3$ 杂化轨道。四个 $\text{sp}^3$ 杂化轨道分别与四个H原子的1s轨道重叠成键形成 $\text{CH}_4$ 分子，所以四个C—H键是等同的。

## 2. 轨道杂化与杂化轨道





1. 正误判断，错误的说明原因。

(1)同一原子中能量相近的原子轨道参与杂化。

**答案：**正确。

(2)杂化轨道能量集中，有利于牢固成键。

**答案：**正确。

(3)杂化轨道中不一定有电子。

**答案：**正确。

(4)杂化轨道只用于形成 $\sigma$ 键或用于容纳未参与成键的孤电子对。

**答案：**正确。

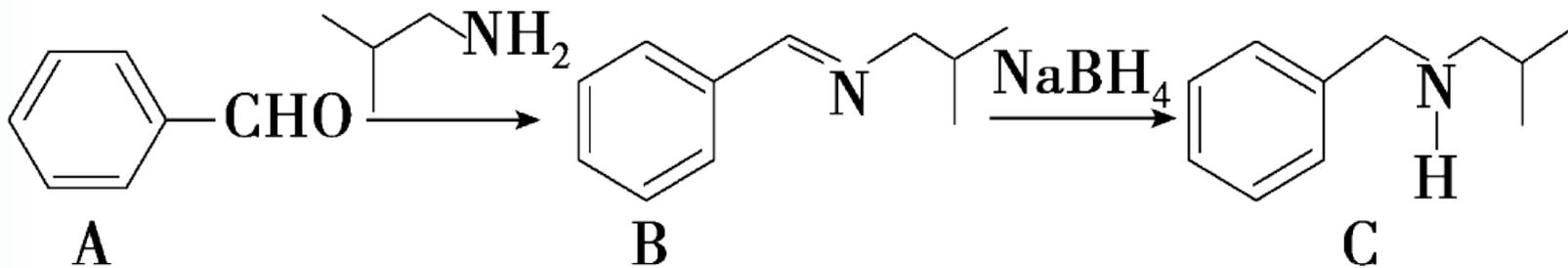
## 2. 填写下表:

代表物	杂化轨道数	杂化轨道类型
$\text{CO}_2$	$0+2=2$	$sp$
$\text{CH}_2\text{O}$	$0+3=3$	$sp^2$
$\text{CH}_4$	$0+4=4$	$sp^3$
$\text{SO}_2$	$1+2=3$	$sp^2$
$\text{NH}_3$	$1+3=4$	$sp^3$
$\text{H}_2\text{O}$	$2+2=4$	$sp^3$

## **任务二 杂化轨道类型及其空间结构**

## 情境探究

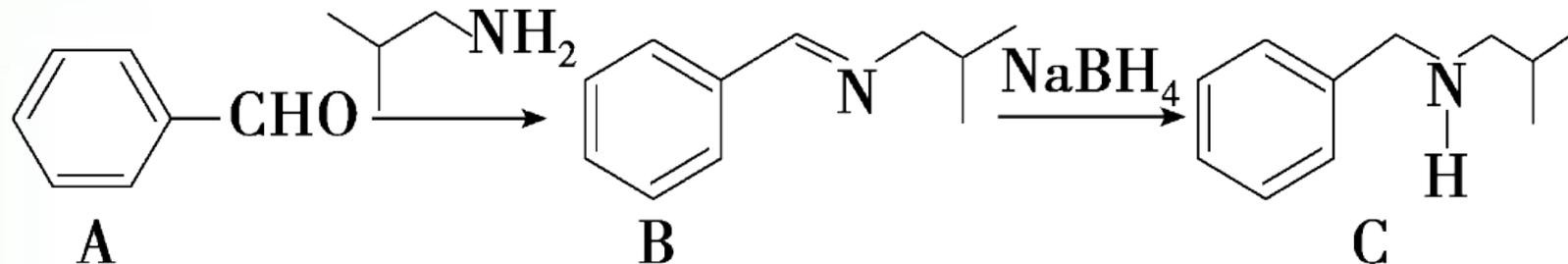
“达芦那韦”是抗击病毒潜在用药，合成“达芦那韦”的部分路线如图所示：



**问题1：**判断A分子中碳原子的杂化轨道类型，并分析分子中所有原子能否共平面。

**提示：** A分子中碳原子采取 $\text{sp}^2$ 杂化；苯环和 $\text{—CHO}$ 都是平面形结构，单键可以旋转，故所有原子可能共平面。

问题2：判断B、C分子中碳、氮原子的杂化轨道类型。



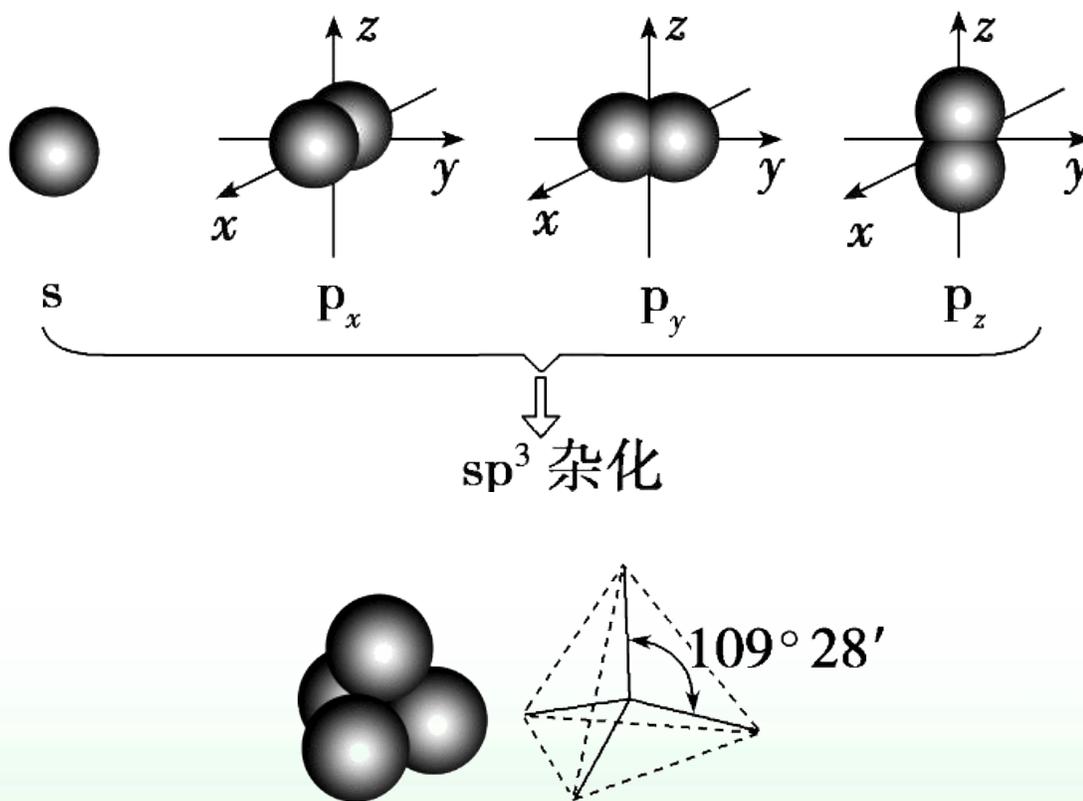
**提示：** B分子中碳原子采取 $sp^2$ 、 $sp^3$ 杂化，氮原子采取 $sp^2$ 杂化；C分子中碳原子采取 $sp^2$ 、 $sp^3$ 杂化，氮原子采取 $sp^3$ 杂化。

问题3：判断NaBH<sub>4</sub>中阴离子BH<sub>4</sub><sup>-</sup>的空间结构及B原子的杂化轨道类型。

**提示：** 正四面体形； $sp^3$ 杂化。

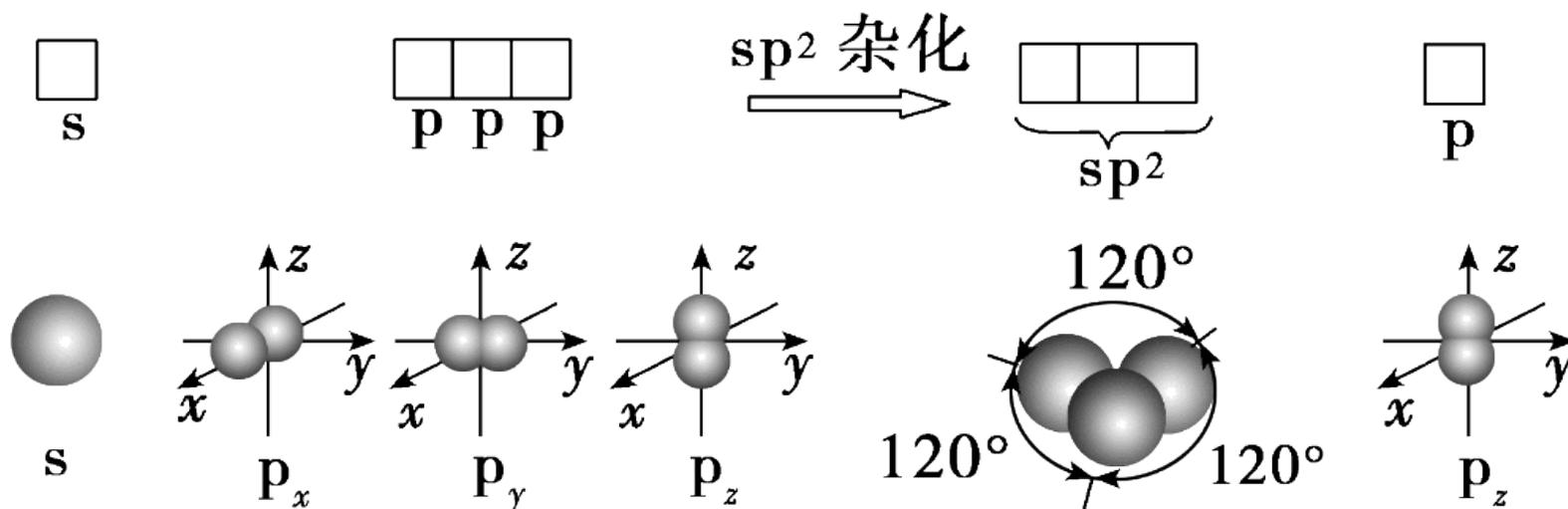
## 1. $sp^3$ 杂化轨道

$sp^3$ 杂化轨道是由 1 个  $ns$  轨道和 3 个  $np$  轨道杂化形成的。 $sp^3$ 杂化轨道间的夹角是  $109^\circ 28'$ ，立体结构为 正四面体 形。其杂化过程如下图所示：



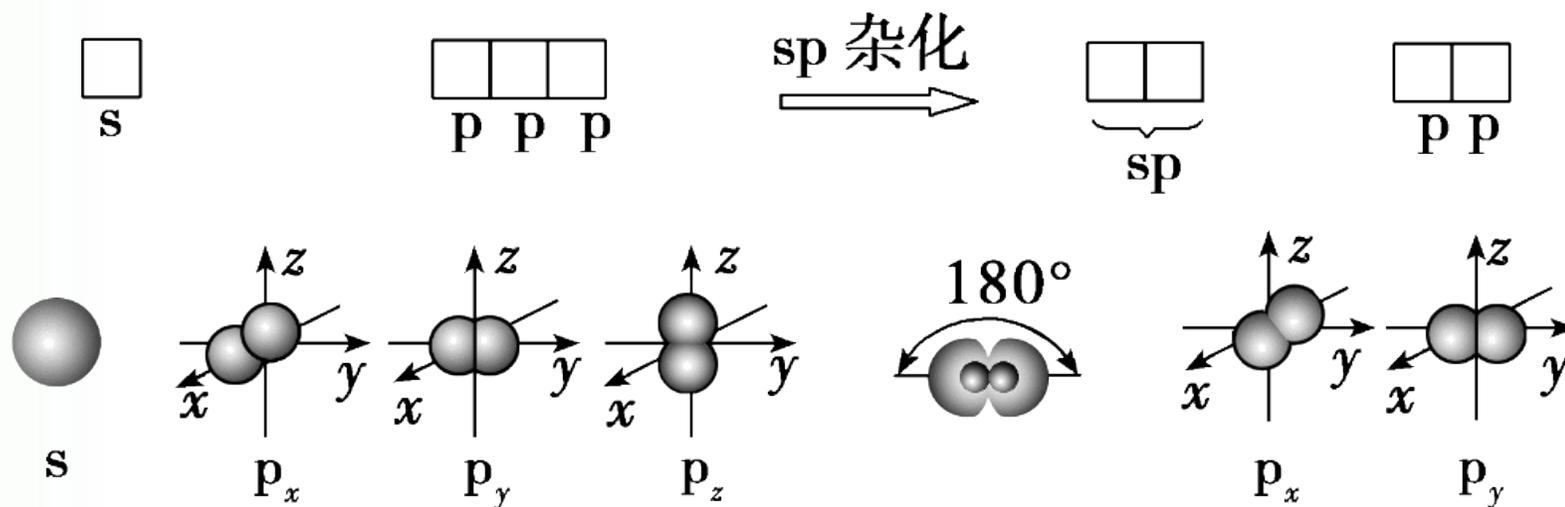
## 2. $sp^2$ 杂化轨道

$sp^2$ 杂化轨道是由 1 个  $ns$  轨道和 2 个  $np$  轨道杂化而成的。 $sp^2$ 杂化轨道间的夹角是  $120^\circ$ ，呈 平面三角形，其杂化过程如下图所示：

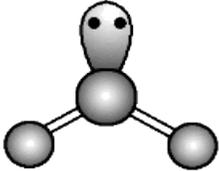
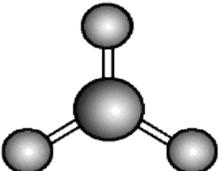
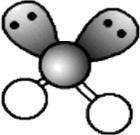
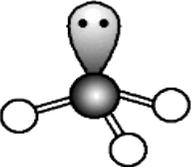
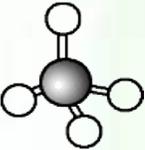


### 3. sp杂化轨道

sp杂化轨道是由 1 个ns轨道和 1 个np轨道杂化而成的，sp杂化轨道间的夹角是 180°，呈 直线 形，其杂化过程如下图所示：



## 4. VSEPR模型与中心原子的杂化轨道类型

VSEPR 模型						
VSEPR 模型名称	直线形	平面三角形	平面三角形	四面体	四面体	正四面体
中心原子的 杂化轨道类型	<u>sp</u>	<u>sp<sup>2</sup></u>	<u>sp<sup>2</sup></u>	<u>sp<sup>3</sup></u>	<u>sp<sup>3</sup></u>	<u>sp<sup>3</sup></u>
典例	<u>CO<sub>2</sub></u>	SO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	NH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>

1. 正误判断，错误的说明原因。

(1)  $\text{PCl}_3$  分子是三角锥形，这是因为P原子是以  $\text{sp}^2$  杂化的结果。

**答案：** 错误， $\text{PCl}_3$  分子是三角锥形，这是因为P原子是以  $\text{sp}^3$  杂化的结果。

(2)  $\text{sp}^3$  杂化轨道是由任意的1个s轨道和3个p轨道混合形成的四个  $\text{sp}^3$  杂化轨道。

**答案：** 错误， $\text{sp}^3$  杂化轨道是由中心原子的1个s轨道和3个p轨道混合形成的四个  $\text{sp}^3$  杂化轨道。

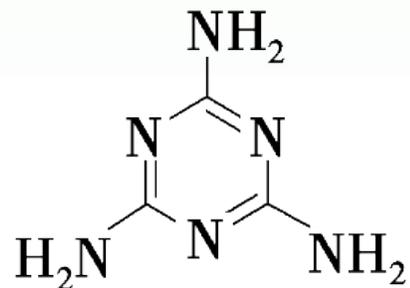
(3) 凡中心原子采取  $\text{sp}^3$  杂化的分子，其VSEPR模型都是(正)四面体。

**答案：** 正确。

(4) 分子中中心原子通过  $\text{sp}^3$  杂化轨道成键时，该分子不一定为正四面体结构。

**答案：** 正确。

2. 三聚氰胺是氰胺( $\text{H}_2\text{N}-\text{C}\equiv\text{N}$ )的三聚体, 已知三聚氰胺的结构简式如图所示。请回答下列问题:

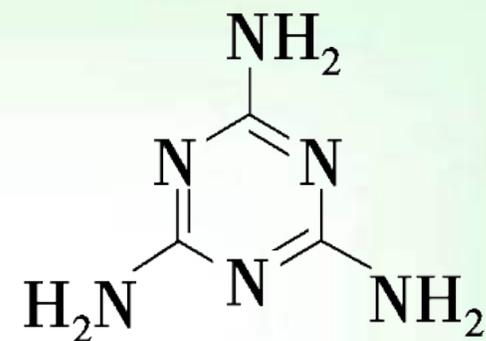


(1) 写出基态碳原子的电子排布式为  $1s^22s^22p^2$ 。

**解析**

基态碳原子的电子排布式为 $1s^22s^22p^2$ 。

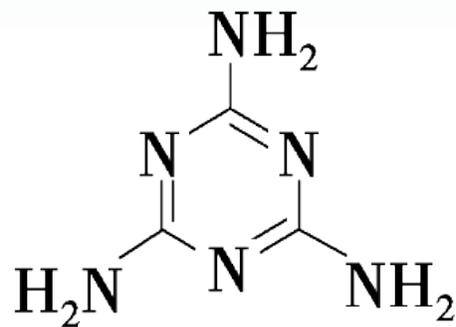
(2) 氰胺中—C≡N中的氮原子、三聚氰胺环状结构中的氮原子和氨基中的氮原子，这三种氮原子的杂化轨道类型分别是  $sp$   $sp^2$   $sp^3$ 。



### 解析

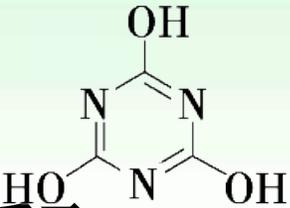
—C≡N中的氮原子、三聚氰胺环状结构中的氮原子、—NH<sub>2</sub>中的氮原子分别形成1、2、3个σ键且均有1个孤电子对，所以分别采取 $sp$ 、 $sp^2$ 、 $sp^3$ 杂化。

(3) 一个三聚氰胺分子中有 15 个  $\sigma$  键。



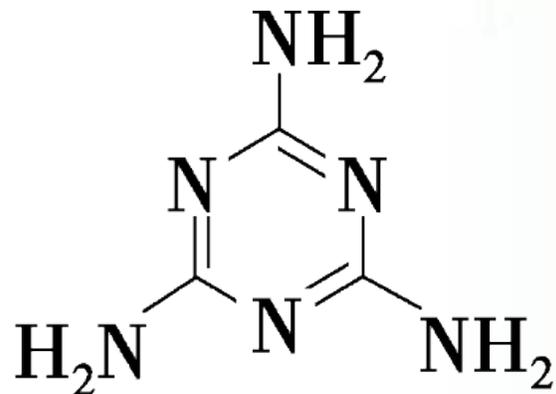
**解析**

双键中有1个 $\sigma$ 键、1个 $\pi$ 键，共15个 $\sigma$ 键。

(4)三聚氰胺与三聚氰酸()分子相互结合,在肾脏内易形成结石。

三聚氰酸分子中碳原子采取  $sp^2$  杂化。该分子的结构简式中,形成双键的两个原子之间的共价键是 C (填字母)。

- A. 两个 $\sigma$ 键
- B. 两个 $\pi$ 键
- C. 一个 $\sigma$ 键, 一个 $\pi$ 键



### 解析

由于该分子中碳原子形成双键,则应采取 $sp^2$ 杂化;形成双键的两个原子之间有1个 $\sigma$ 键、1个 $\pi$ 键。

# 随堂演练

1. 下列有关苯分子中的化学键描述正确的是
- A. 每个碳原子的 $sp^2$ 杂化轨道中的其中一个形成大 $\pi$ 键
  - B. 每个碳原子的未参加杂化的 $2p$ 轨道形成大 $\pi$ 键
  - C. 碳原子的三个 $sp^2$ 杂化轨道与其他原子形成三个 $\pi$ 键
  - D. 碳原子的未参加杂化的 $2p$ 轨道与其他原子形成 $\sigma$ 键

### 解析

苯分子中每个碳原子的三个 $sp^2$ 杂化轨道分别与两个碳原子和一个氢原子形成 $\sigma$ 键。同时每个碳原子还有一个未参加杂化的 $2p$ 轨道，它们均有一个未成对电子，这些 $2p$ 轨道相互平行，以“肩并肩”方式相互重叠，形成一个多电子的大 $\pi$ 键。

2. 甲烷分子( $\text{CH}_4$ )失去一个 $\text{H}^+$ ，形成甲基阴离子( $\text{CH}_3^-$ )，在这个过程中，下列描述不合理的是

- A. 碳原子的杂化类型发生了改变
- B. 微粒的形状发生了改变
- C. 微粒的稳定性发生了改变
- D. 微粒中的键角发生了改变

**解析**

$\text{CH}_4$ 为正四面体结构，而 $\text{CH}_3^-$ 为三角锥形结构，形状、键角、稳定性均发生改变，但杂化类型不变，仍是 $\text{sp}^3$ 杂化。

3. 下列有关分子或离子的空间结构的说法正确的是

- A.  $\text{PO}_4^{3-}$  的VSEPR模型与离子的空间结构一致
- B.  $\text{PCl}_3$ 、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{PCl}_5$  都是三角锥形的分子
- C. 凡是中心原子采取 $\text{sp}^3$ 杂化的分子，其空间结构都是正四面体形
- D.  $\text{CH}_4$ 、 $\text{CCl}_4$  和  $\text{NH}_4^+$  的键角均为 $60^\circ$

## 解析

$\text{PO}_4^{3-}$  中心原子 P 原子孤电子对数  $= \frac{5+3-2 \times 4}{2} = 0$ ，价层电子对数  $= 4 + 0 = 4$ ， $\text{PO}_4^{3-}$  的 VSEPR 模型与离子的空间结构一致，故 A 正确； $\text{PCl}_3$ 、 $\text{NH}_3$  的空间结构是三角锥形，但  $\text{PCl}_5$  是三角双锥形的分子，故 B 错误；中心原子采取  $\text{sp}^3$  杂化的分子，其空间结构可能是正四面体形，也可能是三角锥形或者 V 形，故 C 错误； $\text{CH}_4$ 、 $\text{CCl}_4$  和  $\text{NH}_4^+$  都是正四面体结构，键角均是  $109^\circ 28'$ ，故 D 错误。

4. 随着石油资源的日趋紧张，天然气资源的开发利用受到越来越多的关注。以天然气(主要成分是 $\text{CH}_4$ )为原料经合成气(主要成分为 $\text{CO}$ 、 $\text{H}_2$ )制化学品，是目前天然气转化利用的主要技术路线。而采用渣油、煤、焦炭为原料制合成气，常因含羰基铁 $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$ 等而导致以合成气为原料合成甲醇和合成氨等生产过程中的催化剂产生中毒。请回答下列问题：

(1)  $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$ 中铁的化合价为0，写出铁原子的基态电子排布式：

$[\text{Ar}]3\text{d}^64\text{s}^2$ 。

**解析**

Fe的原子序数为26，则基态电子排布式为 $[\text{Ar}]3\text{d}^64\text{s}^2$ ；

(2)已知：等电子体中原子数和价电子数都相同。与CO互为等电子体的分子和离子分别为  $\text{N}_2$  和  $\text{CN}^-$  (各举一种即可，填化学式)，CO分子的电子式为  $:\text{C}::\text{O}:$ ，CO分子的结构式可表示成  $\text{C}\equiv\text{O}$ 。

### 解析

等电子体中原子数和价电子数都相同，CO价电子总数为10，其等电子体的分子为 $\text{N}_2$ ，离子为 $\text{CN}^-$ ，据 $\text{N}_2$ 的电子式： $\text{N}::\text{N}:$ 可知，CO电子式为： $:\text{C}::\text{O}:$ ，则CO的结构式为 $\text{C}\equiv\text{O}$ ；

(3)在  $\text{CH}_4$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{CH}_3\text{OH}$ 中，碳原子采取  $\text{sp}^3$ 杂化的分子有  $\text{CH}_4$ 、 $\text{CH}_3\text{OH}$ 。

**解析**

在 $\text{CH}_4$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{CH}_3\text{OH}$ 三种物质中甲烷、甲醇中C原子杂化轨道数目为4，碳原子采取 $\text{sp}^3$ 杂化， $\text{CO}_2$ 中碳原子采取 $\text{sp}$ 杂化；

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/795102022322012002>