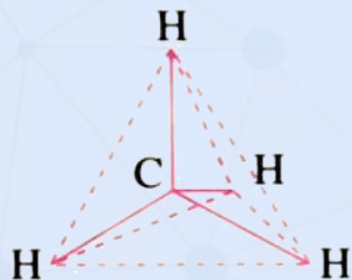
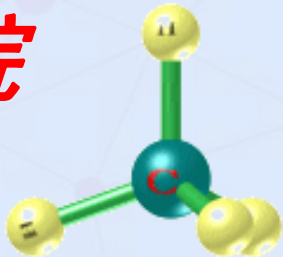




大学化学 I

杂化轨道理论

甲烷



实验测定甲烷为 CH_4 ，具有正四面体结构，键角为 $109^\circ 28'$ 。

根据价键理论，C原子是 $1s^2 2s^2 2p^2$ 可与H生成 CH_2 ；

Pauling 再次求助“杂化概念”建立了新的化学键理论-----杂化轨道理论。


新理论决如下问题

● 原子轨道为什么可以杂化？

● 原子轨道为什么需要杂化？

● 如何求得杂化轨道的对称轴间的夹角？

(1) 基本要点

- 成键时能级相近的价电子轨道相混杂，形成新的价电子轨道——杂化轨道
- 杂化前后轨道数目不变
- 杂化后轨道伸展方向，形状和能量发生改变 

总之，杂化后的轨道

变了

● 轨道成分变了

● 轨道的能量变了

● 轨道的形状变了

结果，更有利于成键！

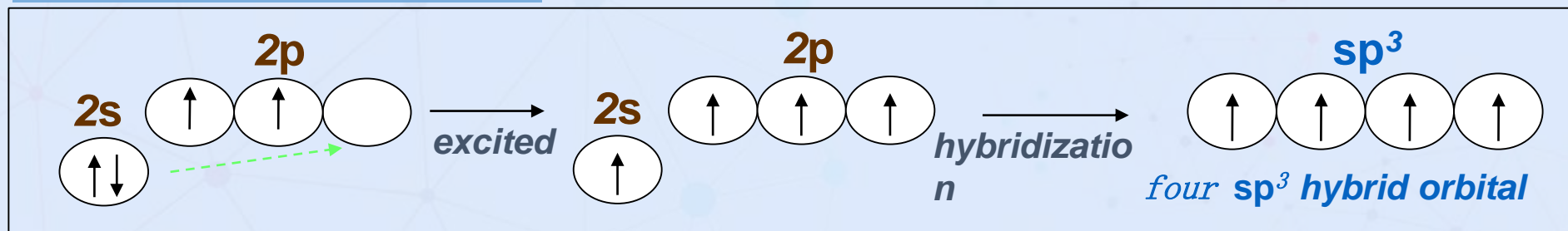
杂化轨道类型：

s—p 杂化： sp 、 sp^2 和 sp^3 杂化； sp^3 不等性杂化；

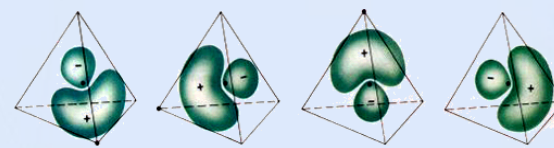
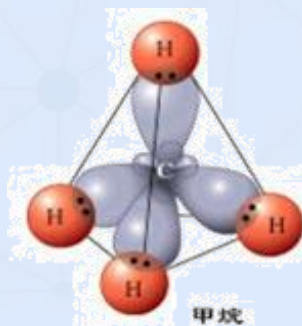
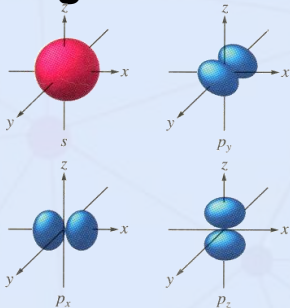
s—p—d 杂化： dsp^2 、 d^2sp^3 、 sp^3d^2 等杂化

(2) 杂化形式--s-p 杂化

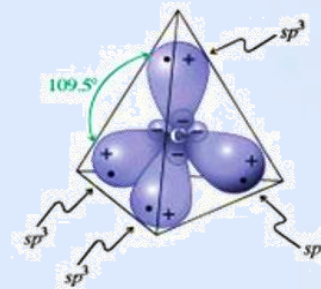
● sp^3 杂化--- CH_4



Configuration of C
in ground state



Hybrid
orbital



sp³杂化的特点

1条ns轨道和3条np轨道杂化形成4条sp³杂化轨道；

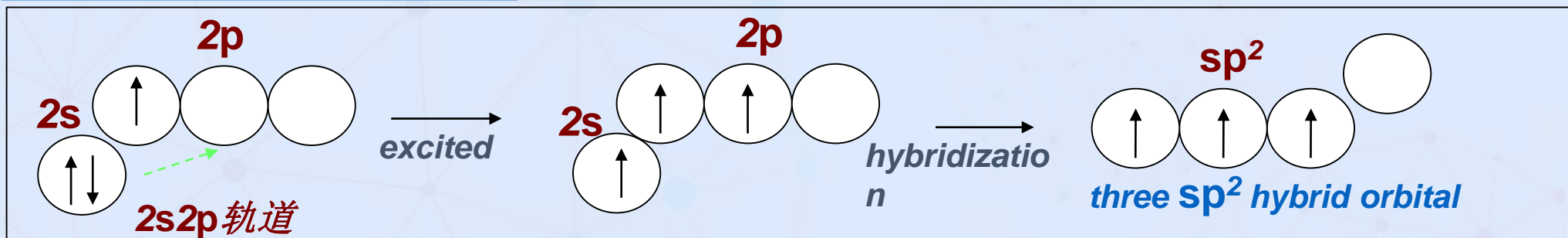
每条杂化轨道含有1/4s和3/4p成分；

4条杂化轨道在空间呈正四面体分布

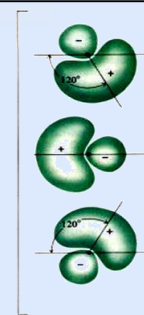
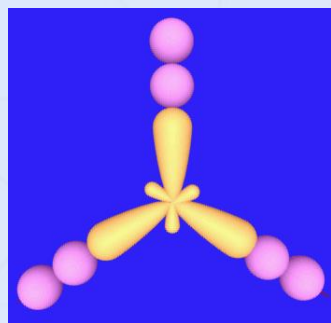
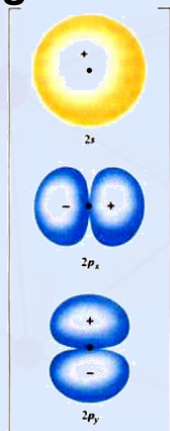
除CH₄外，还有金刚石、C₂H₆、SiH₄、CX₄、NH₄⁺等，其中心原子均采取SP³杂化成键。

(2) 杂化形式-----s-p 杂化

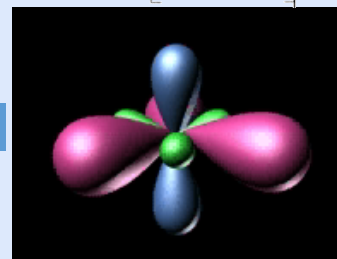
● sp^2 杂化---- BF_3



Configuration of B
in ground state



Hybrid
orbital



sp²杂化的特点

1条ns轨道和2条np轨道杂化形成3条sp²杂化轨道；

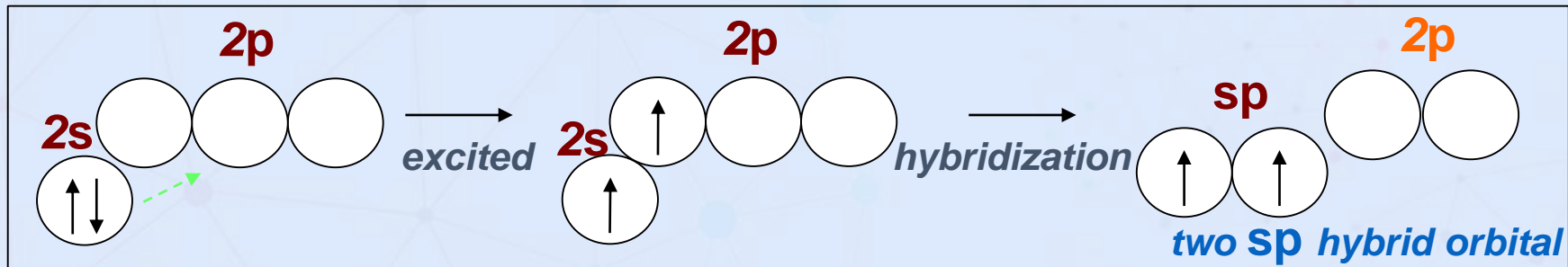
每条杂化轨道含有1/3s和2/3p成分；

3条杂化轨道在空间呈平面三角形分布。

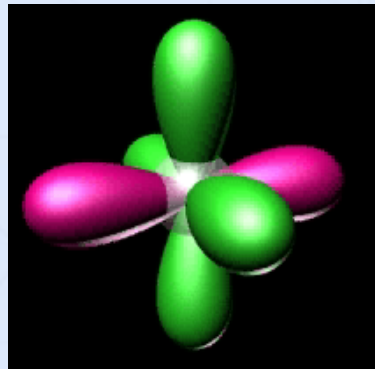
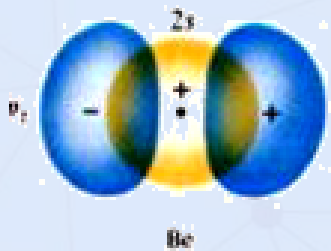
除BF₃外，还有石墨、C₂H₄、SO₂、BX₃、
HCHO等，其中心原子均采取SP²杂化成键。

(2) 杂化形式-----s-p 杂化

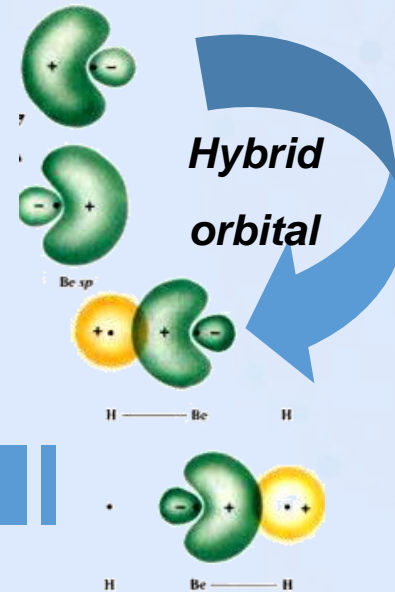
● sp杂化---BeH₂



Configuration of Be
in ground state



H-Be-H



sp杂化的特点

1条ns轨道和1条np轨道杂化形成2条sp杂化轨道；

每条杂化轨道含有 $1/2s$ 和 $1/2p$ 成分；

2条杂化轨道在空间呈直线分布。

除 BeCl_2 外，还有 HgCl_2 、 C_2H_2 、 CO_2 等，其中心原子均采取SP杂化成键。

最硬



金刚石外观结构



金刚石内部碳原子排列情况

较软

