



6.4.4 杂化轨道理论

天津大学

邱海霞

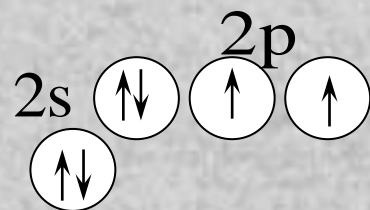
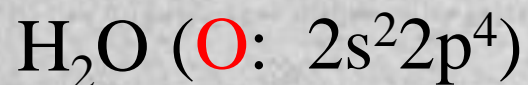


价键理论的局限性

价键理论

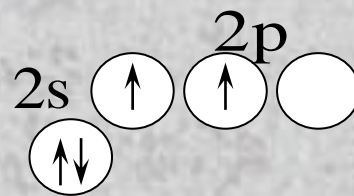
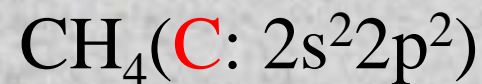
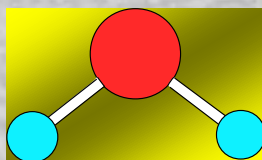
成功地阐明了共价键的本质和特征

但无法解释一些分子的空间构型



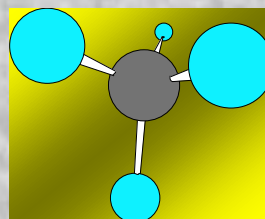
理论键角 90°

实验键角 104.5°



90°

109.47°





杂化轨道理论



鲍林 (1901-1994)

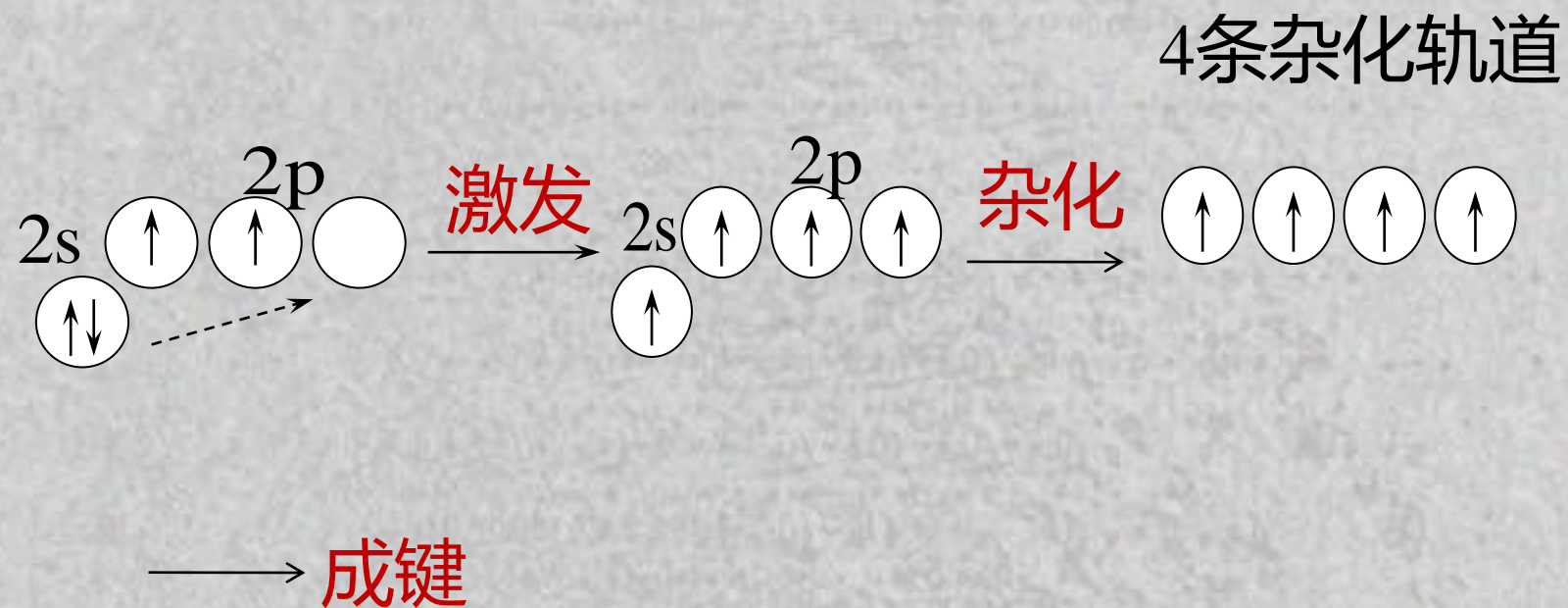
1931年，鲍林提出杂化轨道理论

在共价键形成时，同一原子中能量相近的几个不同类型的原子轨道可以重新组合成一组新的原子轨道，称为杂化轨道



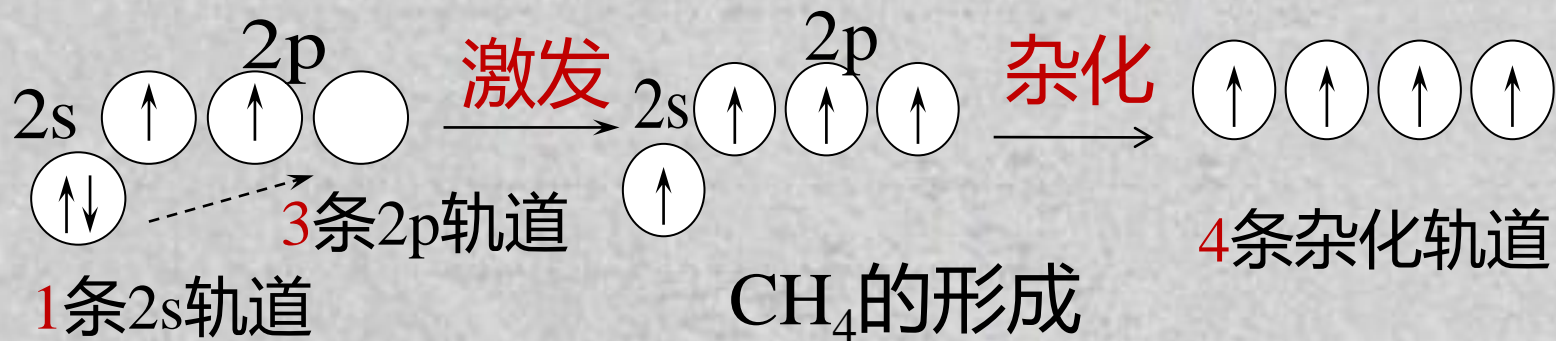
杂化的过程

CH₄的形成

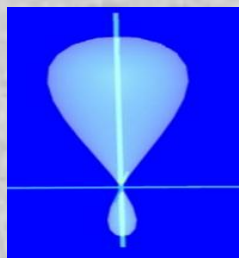
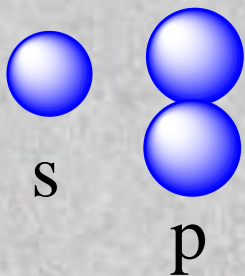




杂化的特点



◆ 轨道的数目没有改变



杂化轨道

◆ 轨道的形状、伸展方向发生了改变

◆ 轨道的成分和能量发生了变化



杂化轨道的成键能力



杂化轨道

大头处电子云分布更加集中，
成键时，从大头一侧与其它
原子轨道重叠

- ◆ 杂化轨道的成键能力大于未杂化的轨道
- ◆ 杂化轨道形成的都是 σ 键