

《分子(或离子)空间结构与 杂化轨道理论》



判断分子或离子的空间构型时，要能够正确计算价层电子对数：一是运用计算式推导出价层电子对数。二是看配位原子数；如下表：

价层电子对数	杂化类型	配位原子数	孤电子对数	价电子对空间构型	分子空间构型	实例
2	sp	2	0	直线形	直线形	BeCl ₂
3	sp ²	3	0	三角形	三角形	BF ₃
		2	1		V形	SnBr ₂
4	sp ³	4	0	四面体形	四面体形	CH ₄
		3	1		三角锥形	NH ₃
		2	2		V形	H ₂ O

● 跟踪训练

1. 下列对于 NH_3 和 CO_2 的说法中正确的是

A. 都是直线形结构

B. 中心原子都采取 sp 杂化

✓ C. NH_3 为三角锥形结构， CO_2 为直线形结构

D. N原子和C原子上都没有孤对电子

解析 NH_3 和 CO_2 分子的中心原子分别采取 sp^3 杂化、 sp 杂化，但 NH_3 分子的N原子上有1对孤电子对未参与成键，根据杂化轨道理论， NH_3 的空间构型为三角锥形， CO_2 的空间构型为直线形。

2. 下列各组分子的空间结构相同的是

A. SnCl_2 、 BeCl_2 B. BF_3 、 NH_3

C. CCl_4 、 SiF_4

D. CS_2 、 OF_2

解析 通过分子的价层电子对数、孤电子对数确定分子的空间结构，其中A、D项中分子的具体情况如下表：

	σ 键电子对数	中心原子上的孤电子对数	价层电子对数	空间结构
SnCl_2	2	$\frac{1}{2} \times (4 - 2 \times 1) = 1$	3	V形
BeCl_2	2	$\frac{1}{2} \times (2 - 2 \times 1) = 0$	2	直线形
CS_2	2	$\frac{1}{2} \times (4 - 2 \times 2) = 0$	2	直线形
OF_2	2	$\frac{1}{2} \times (6 - 2 \times 1) = 2$	4	V形

B项中 BF_3 、 NH_3 的空间结构分别为平面三角形、三角锥形；
C项中， CCl_4 与 SiF_4 的空间结构均为正四面体形。

3.下列分子或离子中，价层电子对互斥模型为正四面体形且分子或离子的空间结构为V形的是



解析 价层电子对互斥模型为正四面体形，且分子或离子的空间结构为V形的只有3个原子构成的分子或离子， OF_2 符合。

A选项 NH_4^+ 是三角锥形的 NH_3 结合了一个 H^+ ，呈正四面体形，

B项中 PH_3 为三角锥形，

C中 H_3O^+ 是V形的 H_2O 结合了一个 H^+ ，呈三角锥形。

4.(2020·杭州调研)下列分子或离子的中心原子采用 sp^3 杂化的是

① NF_3 ② C_2H_4 ③ C_6H_6 ④ C_2H_2 ⑤ NH_4^+

A.①②④

B.①⑤ ✓

C.②③

D.③⑤

解析 ① NF_3 分子中N原子采取 sp^3 杂化；

② C_2H_4 分子中C原子采取 sp^2 杂化；

③ C_6H_6 分子中C原子采取 sp^2 杂化；

④ C_2H_2 分子中C原子采取 sp 杂化；

⑤ NH_4^+ 中N原子采取 sp^3 杂化。

5. 下列分子或离子中，VSEPR模型与粒子的空间结构一致的是

A. SO_2

B. HCHO

C. NCl_3

D. H_3O^+

解析 当中心原子没有孤电子对时，VSEPR模型与分子的空间结构就是一致的， SO_2 、 NCl_3 、 H_3O^+ 的中心原子均有孤电子对，A、C、D项错误。

6. 下列说法正确的是

A. CH_2Cl_2 分子的空间结构为正四面体形

B. H_2O 分子中氧原子的杂化轨道类型为 sp^2 ，分子的空间结构为 V 形

C. CO_2 分子中碳原子的杂化轨道类型为 sp ，分子的空间结构为直线形

D. SO_3^{2-} 的空间结构为平面三角形

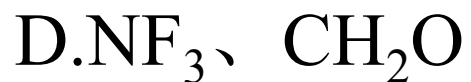
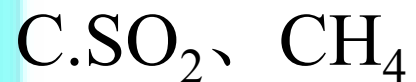
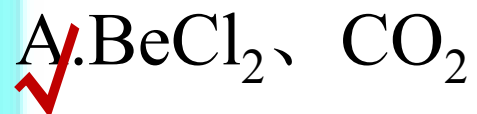
解析 CH_4 中4个共价键完全相同，为正四面体形， CH_2Cl_2 分子的4个共价键不完全相同，所以分子的空间结构不是正四面体形，A错误；

H_2O 分子中O原子的价层电子对数 $= 2 + \frac{1}{2} \times (6 - 1 \times 2) = 4$ ，为 sp^3 杂化，含有2对孤电子对，分子的空间结构为V形，B错误；

CO_2 中C原子的价层电子对数 $= 2 + \frac{1}{2} \times (4 - 2 \times 2) = 2$ ，为 sp 杂化，分子的空间结构为直线形，C正确；

SO_3^{2-} 中S原子的价层电子对数 $= 3 + \frac{1}{2} \times (6 + 2 - 3 \times 2) = 4$ ，为 sp^3 杂化，含1对孤电子对，分子的空间结构为三角锥形，D错误。

7.(2020·青岛检测)下列分子中，中心原子杂化类型相同，分子的空间结构也相同的是



解析 根据价层电子对互斥模型可知， H_2O 中 O 原子的孤电子对数 = $\frac{6-2 \times 1}{2} = 2$ ， σ 键电子对数为 2，采取 sp^3 杂化，故 H_2O 为 V 形结构， SO_2

中 S 原子的孤电子对数 = $\frac{6-2 \times 2}{2} = 1$ ， σ 键电子对数为 2，采取 sp^2 杂化，故 SO_2 为 V 形结构，B 项不符合题意；

同样分析可知， BeCl_2 中 Be 原子采取 sp 杂化， BeCl_2 是直线形结构， CO_2 中 C 原子采取 sp 杂化， CO_2 是直线形结构，A 项符合题意；

SO_2 中 S 原子采取 sp^2 杂化， SO_2 是 V 形结构， CH_4 中 C 原子采取 sp^3 杂化， CH_4 是正四面体形结构，C 项不符合题意；

NF_3 中N原子采取 sp^3 杂化， NF_3 是三角锥形结构， CH_2O 中C原子采取 sp^2 杂化， CH_2O 是平面三角形结构，D项不符合题意。

8.(2020·西安调研)下列说法正确的是

①CS₂为V形分子 ②ClO₃的空间结构为平面三角形 ③SF₆中有6对完全相同的成键电子对 ④SiF₄和SO₃²⁻的中心原子均采取sp³杂化

A.①②

B.②③

C.③④

D.①④

解析 ①CS₂和CO₂分子的空间结构相同，为直线形分子，错误；

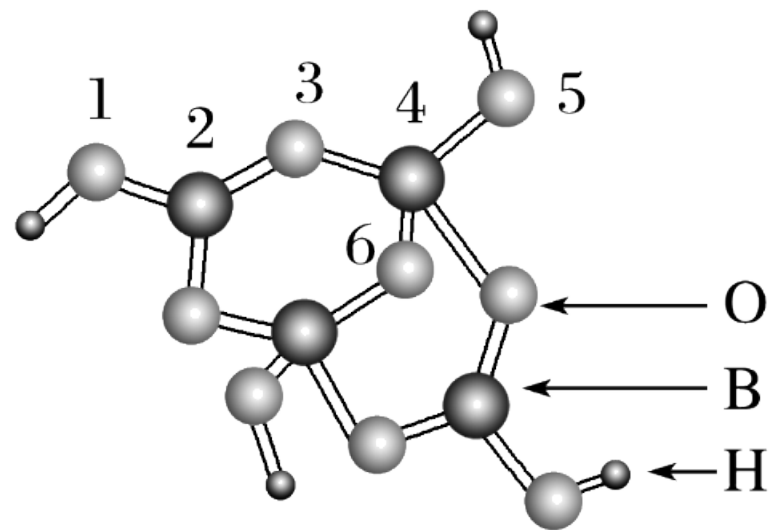
②ClO₃⁻中 Cl 的价层电子对数 = $3 + \frac{1}{2} \times (7 + 1 - 2 \times 3) = 4$ ，含有 1 对孤电子对，则 ClO₃⁻的空间结构为三角锥形，错误；

③SF₆中含有 6 个 S—F，每个 S—F 含有 1 对成键电子对，则 SF₆ 分子中有 6 对完全相同的成键电子对，正确；

④SiF₄ 中 Si 的价层电子对数 = $4 + \frac{1}{2} \times (4 - 1 \times 4) = 4$ ，SO₃²⁻ 中 S 的价层电子对数 = $3 + \frac{1}{2} \times (6 + 2 - 2 \times 3) = 4$ ，则 SiF₄ 和 SO₃²⁻ 的中心原子均采取 sp³ 杂化，正确。

9.硼砂是含结晶水的四硼酸钠。以硼砂为原料，可以得到 BF_3 、 BN 和硼酸等重要化合物，请根据下列信息回答有关问题：

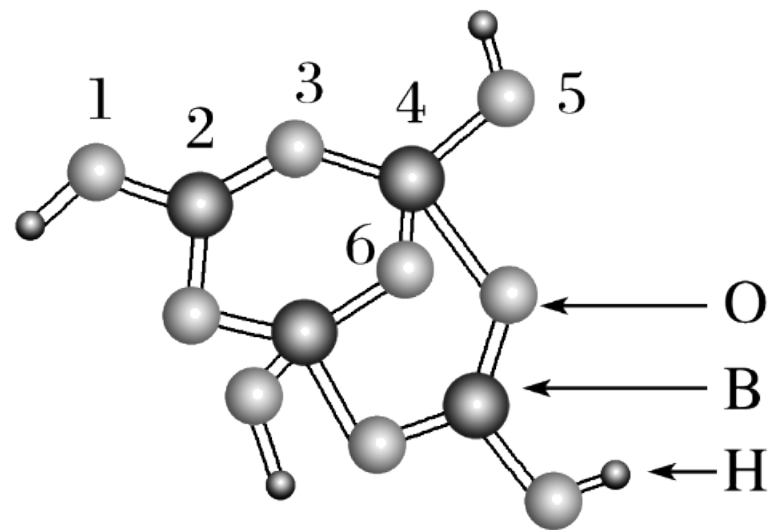
(1)硼砂中阴离子 X^{m-} (含B、O、H三种元素)的球棍模型如图所示，则在 X^{m-} 中，2号硼原子的杂化类型为 sp^2 ； $m =$ 2 (填数字)。



解析 根据图示可知，2号B原子的价层电子对数为3，且无孤电子对，故采取 sp^2 杂化；根据图示可知，该阴离子的化学式为 $[\text{H}_4\text{B}_4\text{O}_9]^{m-}$ ，其中H显+1价，B显+3价、O显-2价，所以 $m = 2$ 。

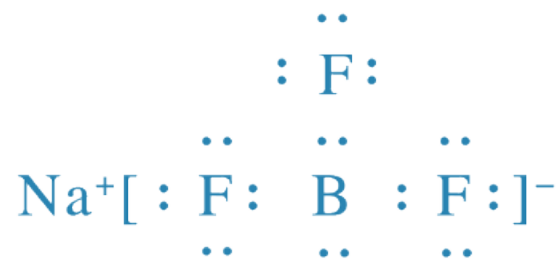
(2)BN中B的化合价为 +3，请解释原因：

N的电负性大于B的电负性。

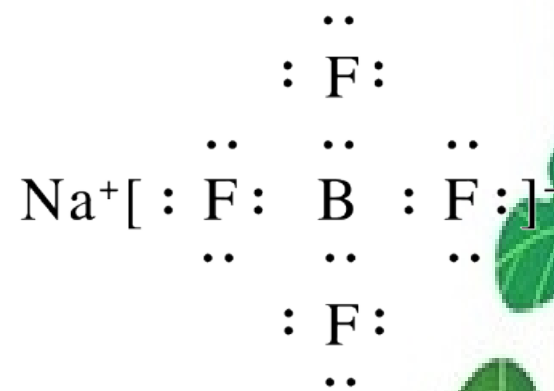
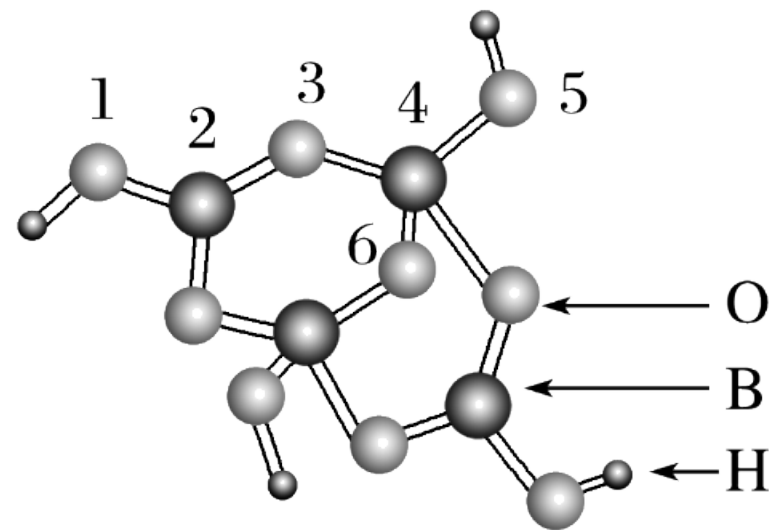


解析 由于电负性： $N > B$ ，所以BN中B显+3价。

(3) BF_3 和过量 NaF 作用可生成 NaBF_4 , BF_4^- 的空间结构为 正四面体形; NaBF_4 的电子式为



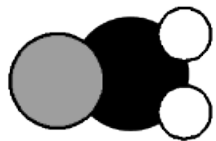
为 _____。



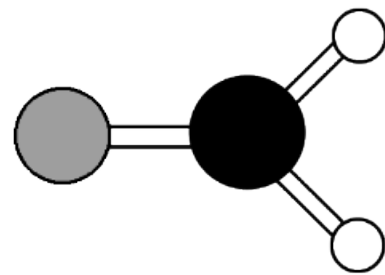
的空间结构为正四面体形; NaBF_4 的电子式为

。

10.如图是甲醛分子的模型，根据该图和所学化学知识回答下列问题：



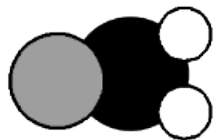
甲醛分子的比例模型



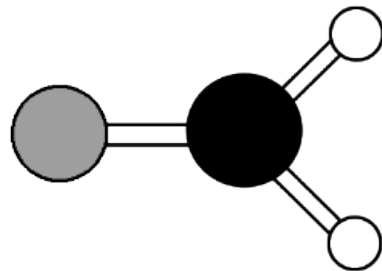
甲醛分子的球棍模型

(1)甲醛分子中碳原子的杂化方式是 sp^2 杂化，作出该判断的主要理由是 甲醛分子的空间结构为平面三角形。

解析 原子的杂化轨道类型不同，分子的空间结构也不同。由图可知，甲醛分子为平面三角形，所以甲醛分子中的碳原子采取 sp^2 杂化。



甲醛分子的比例模型

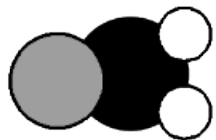


甲醛分子的球棍模型

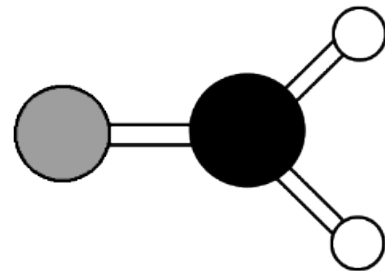
(2)下列是对甲醛分子中碳氧键的判断，其中正确的是②⑤(填序号)。

- ①单键 ②双键 ③ σ 键 ④ π 键 ⑤ σ 键和 π 键

解析 醛类分子中都含有 $\text{C}=\text{O}$ ，所以甲醛分子中的碳氧键是双键。一般来说，双键是 σ 键和 π 键的组合。



甲醛分子的比例模型



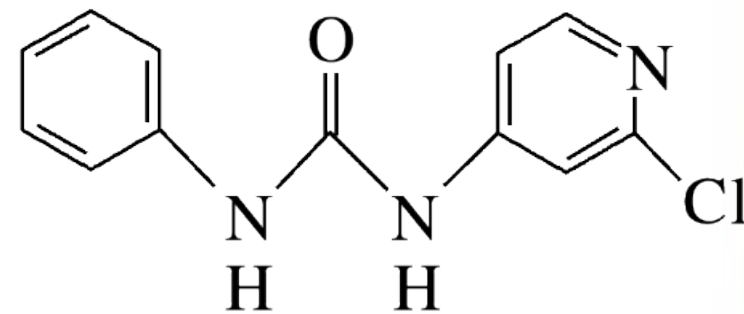
甲醛分子的球棍模型

(3) 甲醛分子中C—H与C—H间的夹角 < (填“=” “>” 或“<”) 120°

，出现该现象的原因是碳氧双键中存在 π 键，它对C—H的排斥作用较强。

解析 由于碳氧双键中存在 π 键，它对C—H的排斥作用较强，所以甲醛分子中C—H与C—H间的夹角小于 120° 。

氯吡苯脲



，它是经国家批准使用的植物生长调节剂。

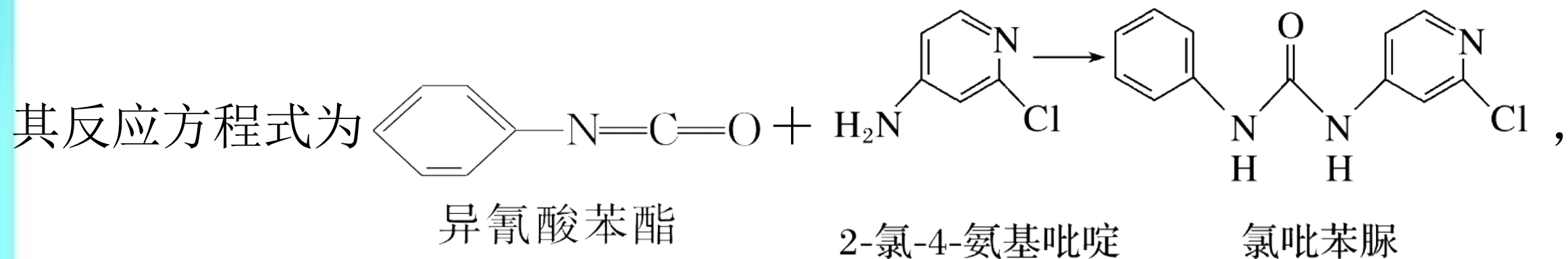
(1)氯元素基态原子核外电子的未成对电子数为 1。

(2)氯吡苯脲晶体中，氮原子的杂化轨道类型为 sp^2 、 sp^3 ，羰基($\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C} \\ | \end{array}$)碳原子的杂化轨道类型为 sp^2 。

解析 根据构造原理可知，氯元素基态原子核外电子排布式是 $1s^22s^22p^63s^23p^5$ ，所以未成对电子数为1。

根据氯吡苯脲的结构简式可知，有2个氮原子均形成3个单键，孤电子对数为1，属于 sp^3 杂化；剩余1个氮原子形成1个双键和1个单键，孤电子对数为1，是 sp^2 杂化；羰基碳原子形成2个单键和1个双键，为 sp^2 杂化。

(3)查文献可知，可用2-氯-4-氨基吡啶与异氰酸苯酯反应，生成氯吡苯脲，



反应过程中，每生成1 mol氯吡苯脲，断裂 N_A 个 σ 键，断裂 N_A 个 π 键。

解析 由于 σ 键比 π 键更稳定，根据反应方程式可以看出，断裂的化学键为异氰酸苯酯分子中的N=C中的 π 键和2-氯-4-氨基吡啶分子中的N—H。

(4)膨大剂能在动物体内代谢，其产物较为复杂，其中有 H_2O 、 NH_3 、 CO_2 等。

①请用共价键知识解释 H_2O 分子比 NH_3 分子稳定的原因：H—O的键能大于H—N的键能。

解析 O、N属于同周期元素，O的原子半径小于N，H—O的键能大于H—N的键能，所以 H_2O 分子比 NH_3 分子稳定。

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/578065134066007016>