



盧濔化學

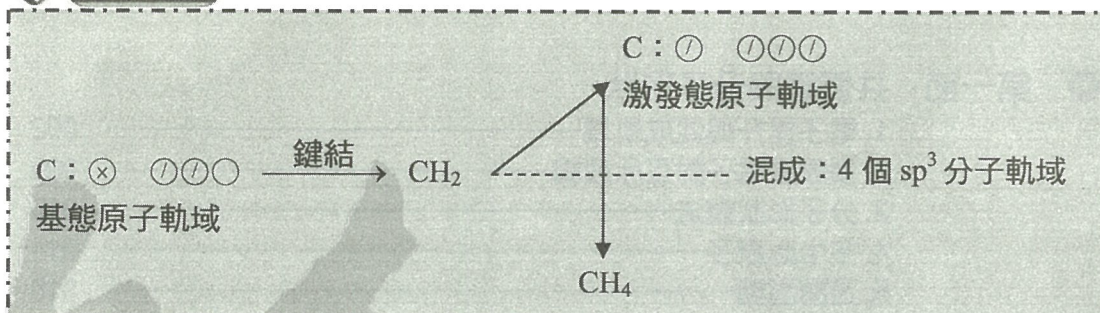
分子與晶體



主題一：共價鍵與分子形狀

① 電子提升與混成軌域

化學思路



- 電子提升：中心原子為了增加_____，讓價電子_____能量，由全滿跳渡至能量接近的空價軌域。
 - 價電子跳渡通常發生於同一_____。
 例：

例：	{	第二週期 :2s → _____
		第三週期 :3s → _____ 或 _____
 - 電子提升為吸熱反應，但每提升一個價電子，可多接_____個共價鍵，故提升後多放出之鍵能必_____提升所吸收之能量，才符合能量安定原則。
- 混成的意義：中心原子欲與其他原子發生鍵結時，中心原子可由二種以上不同的原子軌域互相混合，先形成幾個相等的新軌域分布於空間上的某一定方位上；這些新軌域再與其他原子發生鍵結，而這些新軌域即稱為混成軌域。

→ 當化合物之原子數超過_____個以上，才討論混成軌域。



盧濔小語

混成軌域僅討論_____，並不討論周圍原子或單一原子。

- 混成探討：混成為原子軌域之性質(形狀、能量.....)之混合，以形成分子軌域用於結鍵。
 - 混成前後軌域之_____不變，即混成前原子軌域之總數 = 混成後分子軌域之總數。
 - 形成_____之 p 軌域不參與混成。
 - 混成後原子軌域已無原來軌域之形狀而形成新的分子軌域形狀。
 - 同一 n 值言，能量順序：_____。

(e). s 軌域特性之多寡順序 $sp > sp^2 > sp^3$ 。

(f). p 軌域特性之多寡順序 $sp^3 > sp^2 > sp$ 。



盧濤小語

四大重點

①	不變	②	不混成
③	改變	④	平均

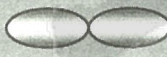
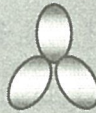
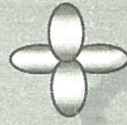
4. 說明實例：

(a). 1 個 s 軌域與 1 個 p 軌域可形成 ____ 個 ____ 軌域，其夾角為 ____。

(b). 1 個 s 軌域與 2 個 p 軌域可形成 ____ 個 ____ 軌域，其夾角為 ____。

(c). 1 個 s 軌域與 3 個 p 軌域可形成 ____ 個 ____ 軌域，其夾角為 ____。

觀念整合

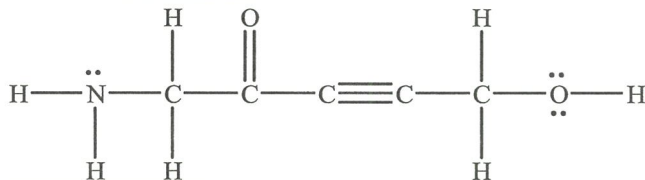
【混成軌域與分子形狀】					
混成軌域形式	組成軌域	鍵角	混成軌域	幾何結構	代表性分子
sp	1 個 s + 1 個 p 軌域	180°		直線	$BeCl_2$ 、 BeH_2
sp^2	1 個 s + 2 個 p 軌域	120°		平面三角形	BF_3 、 BCl_3
sp^3	1 個 s + 3 個 p 軌域	109.5°		正四面體	CH_4 、 CCl_4

觀念追蹤

(1) B、C、N、O、F、Si、P、S、Cl 哪些原子無法電子提升？

觀念追蹤

(2) 判斷下列中心原子之混成軌域



盧濤小語

圖看混成

找

要算，

不算。

觀念追蹤

【104 指考】

- (3) 化學鍵結對於分子的物理或化學性質有決定性的影響，而混成軌域是解釋化學鍵最常用的理論之一。下列關於混成軌域的敘述，哪些正確？
- (A) 乙炔的參鍵包含 2 個 σ 鍵與 1 個 π 鍵
 - (B) 乙烯中的 π 鍵是由 2 個碳原子的混成軌域重疊而形成 sp^2
 - (C) 乙炔中的碳原子有 2 個 sp 混成軌域，其分子形狀為直線
 - (D) 水分子的形狀為彎曲形，其氧原子的 4 個混成軌域中，有 2 個具有孤電子對 sp^3
 - (E) 三氯化硼中，硼原子有 3 個能量相同的混成軌域，分別與 3 個氯的 3p 軌域鍵結，形成 3 個 σ 鍵 sp^2

2 價殼層電子對互斥理論 (Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory)

1. 分子形狀討論 (僅適用於單中心)

(a). 中心對 = 中心最多可結 _____ = $bp + lp$

→ 算法: $\frac{\text{中心原子價電子} + \text{外圍提供電子}}{2}$

(b). 外圍提供電子數 $\begin{cases} H、X: \\ O、S: \\ N: \end{cases}$

※ $\begin{cases} bp(\text{bonding pair}) \Rightarrow \text{已結鍵電子對數目} \\ lp(\text{lone pair}) \Rightarrow \text{未結鍵電子對數目} \end{cases}$

	中心對	混成	bp	lp	形狀
BeF ₂					
BF ₃					
SnCl ₂					
CH ₄					
NH ₃					
H ₂ O					

觀念追蹤

(1) 指出下列各組分子形狀？

(A) AsCl_{3(g)} (B) CaF_{2(g)} (C) BF_{3(g)} (D) SiF_{4(g)} (E) H₂S。

觀念追蹤

(2) 指出下列各組分子形狀？



觀念追蹤

(3) 指出下列各組分子形狀？



金屬與非金屬元素形成之化合物，常態下為固相之離子晶體。

但高溫氧化(物質相變化)後可成為單獨分子(氣體均以_____存在)故可討論分子形狀。