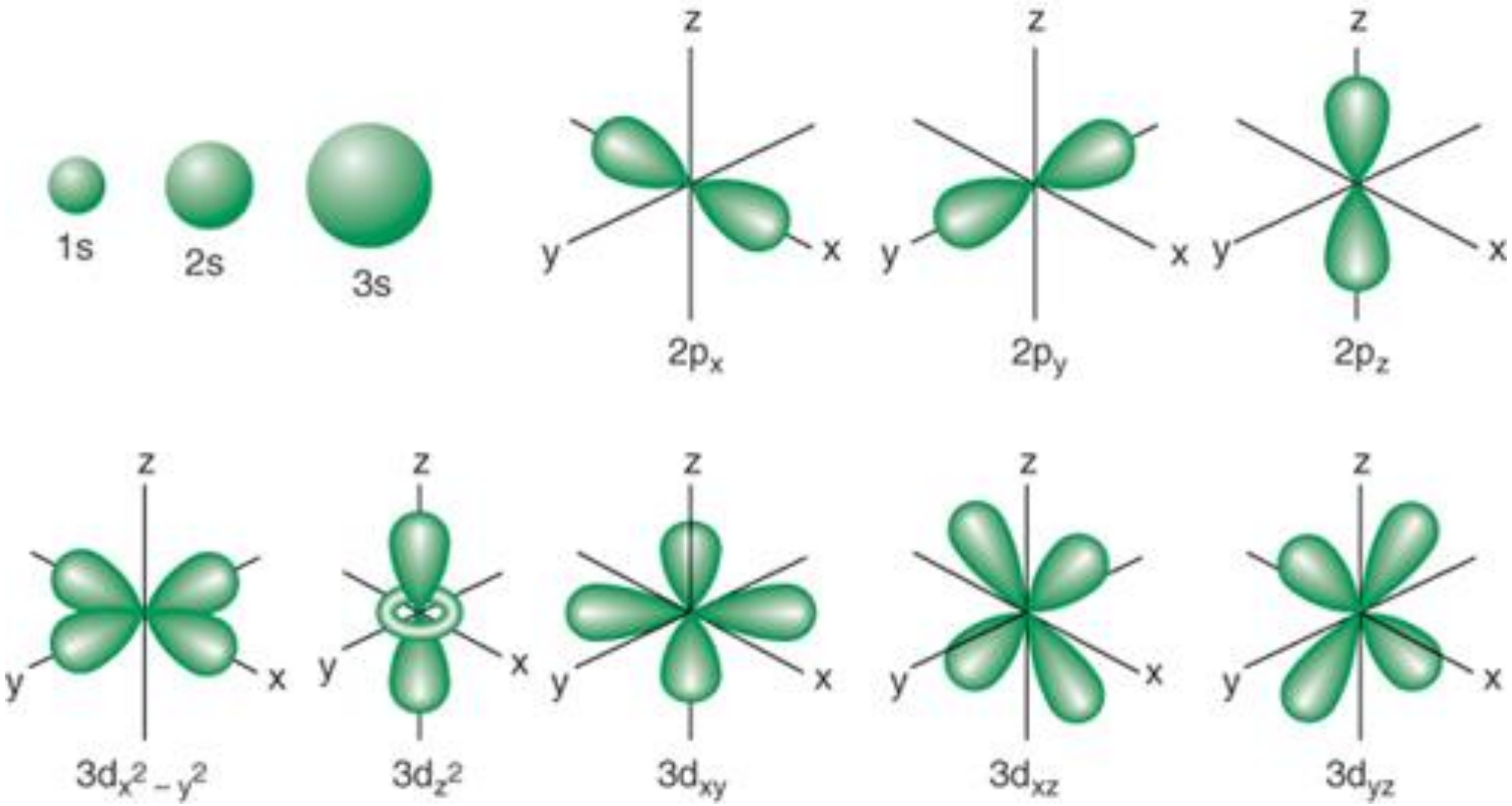
Valence Bond Theory (VBT)

การทำนายรูปร่างโมเลกุล

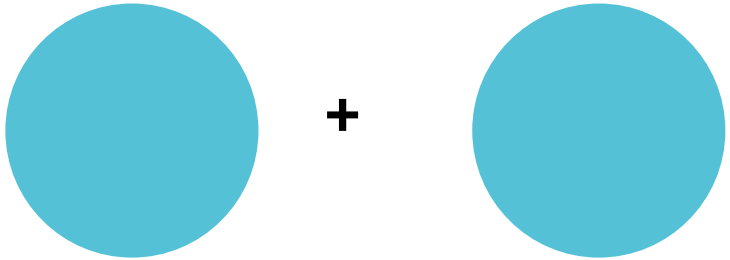
CHANOKKARN NEADRATSAMEE

Type of orbitals

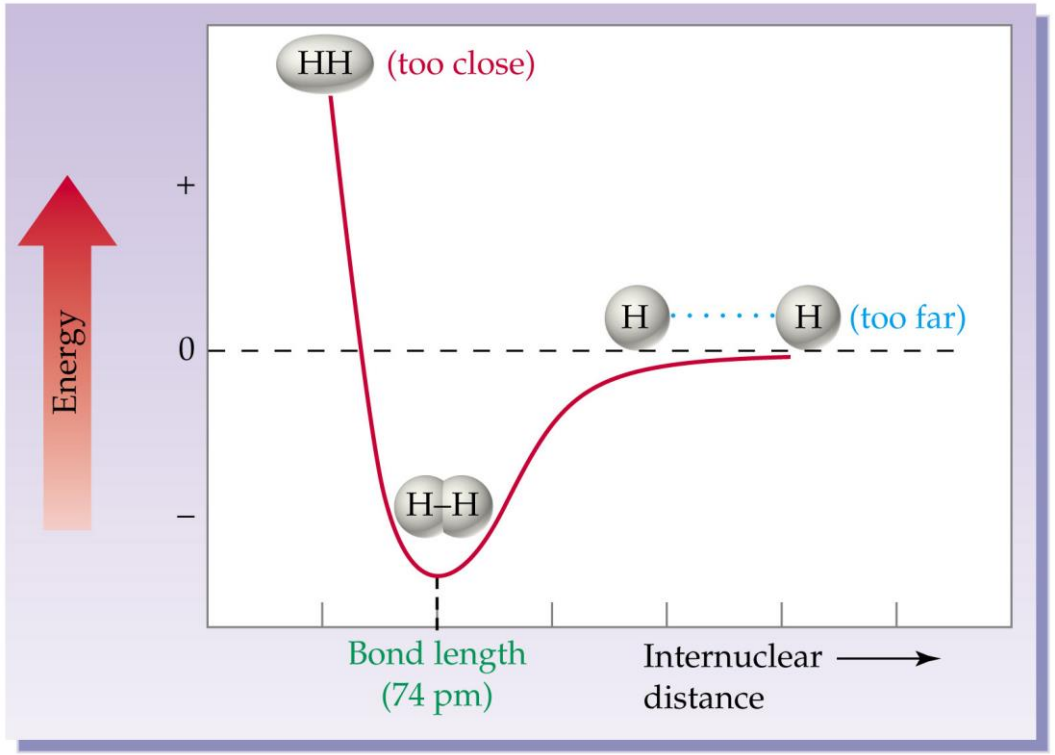


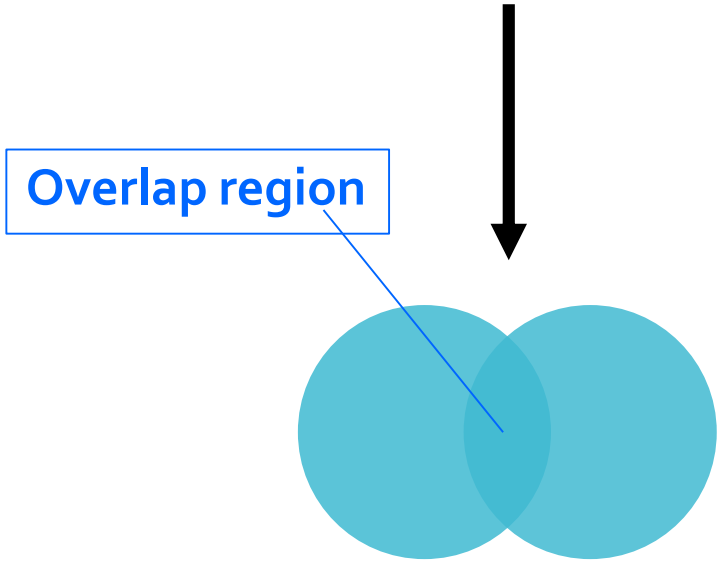
Valence Bond Theory (VBT)

พิจารณาการเกิดพันธะโคเวเลนต์จากเกณฑ์ทางกลศาสตร์ควอนตัมโดยถือว่าพันธะเกิดจากการซ้อนทับกัน (overlapping) ของ valence orbitals ของอะตอมที่มีการสร้างพันธะร่วมกัน



Hydrogen 1s orbitals

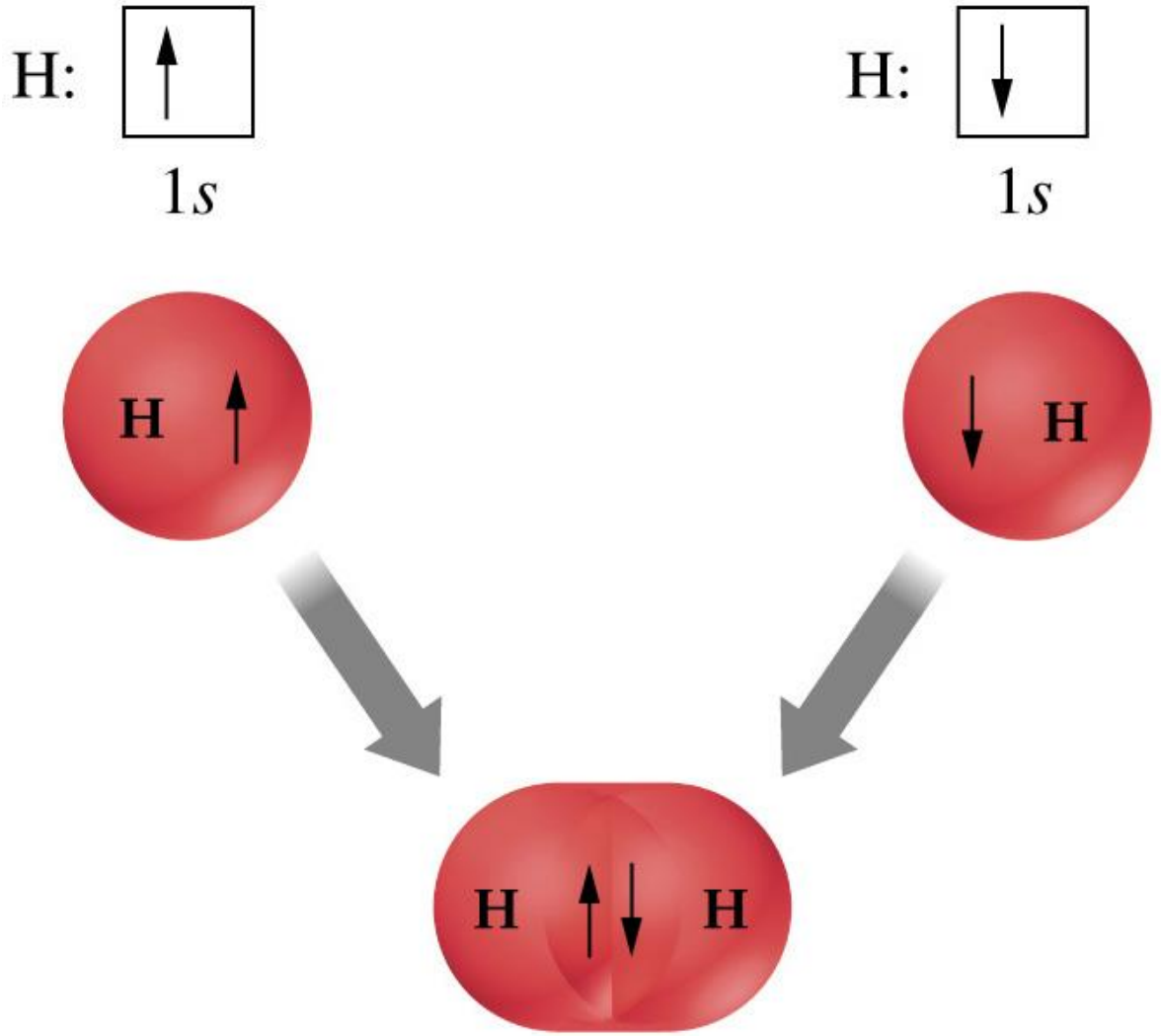




Covalent bond in H_2

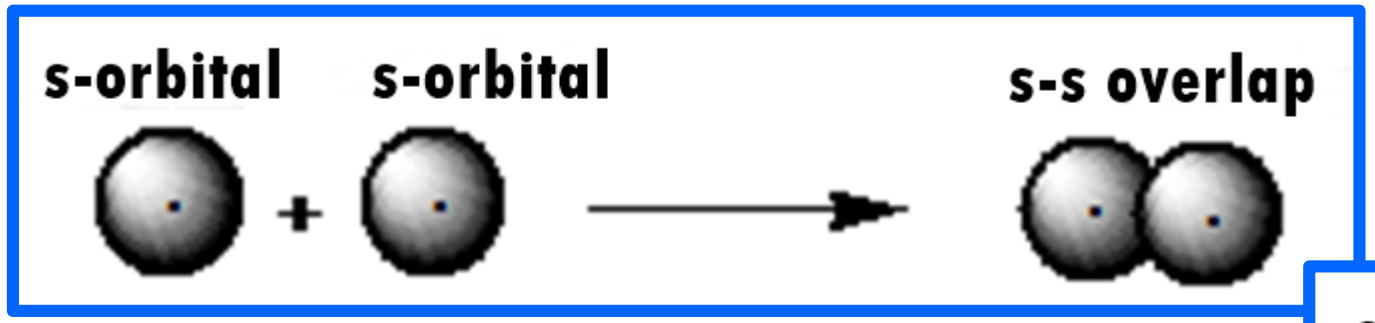
Valence Bond Theory (VBT)

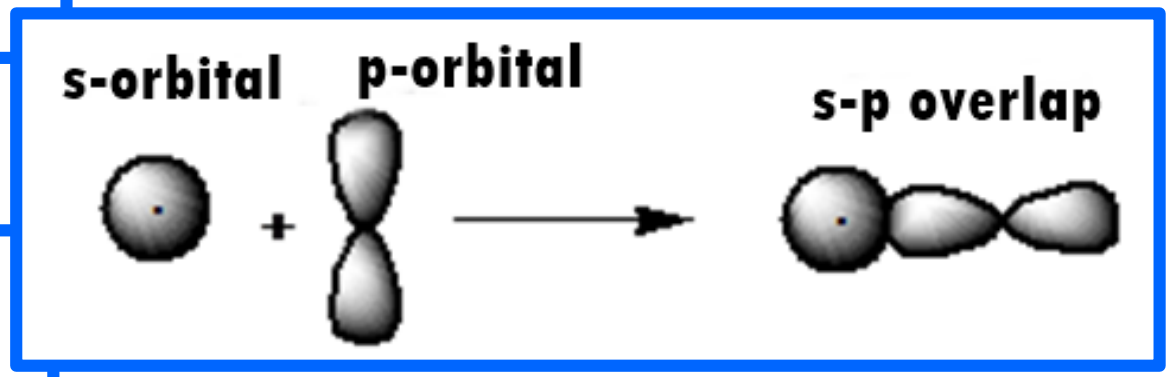
โดยที่จำนวนอิเล็กตรอนในออร์บิทัลที่ซ้อนเกยกันนั้น จะมีได้ไม่เกินสองอิเล็กตรอน และมีการสปินตรงกันข้าม เช่นการเกิดพันธะในโมเลกุลของ H_2

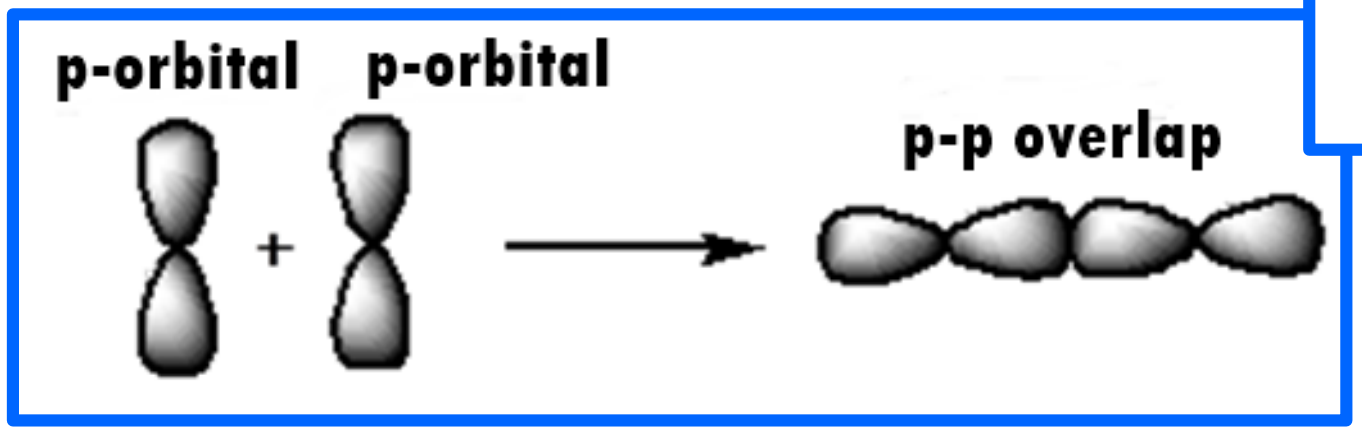


การซ้อนทับของออร์บิทัล (Orbital overlapping)

σ Bond : end to end หรือ head to head overlapping

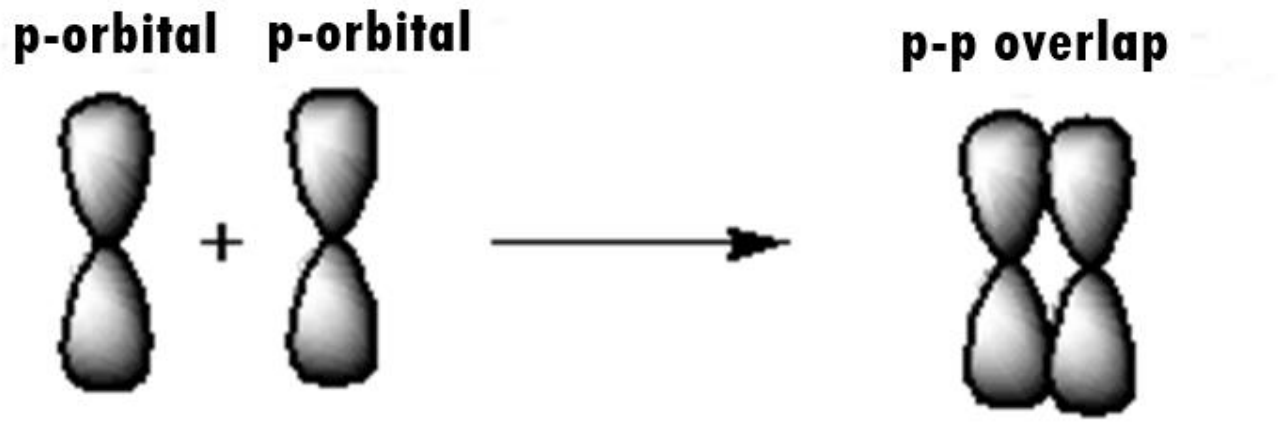






Valence Bond Theory (VBT)

π Bond : side to side overlapping

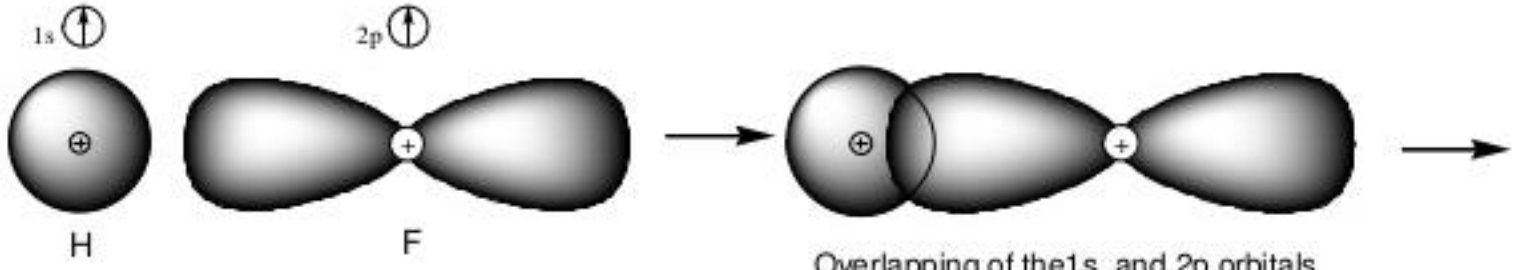


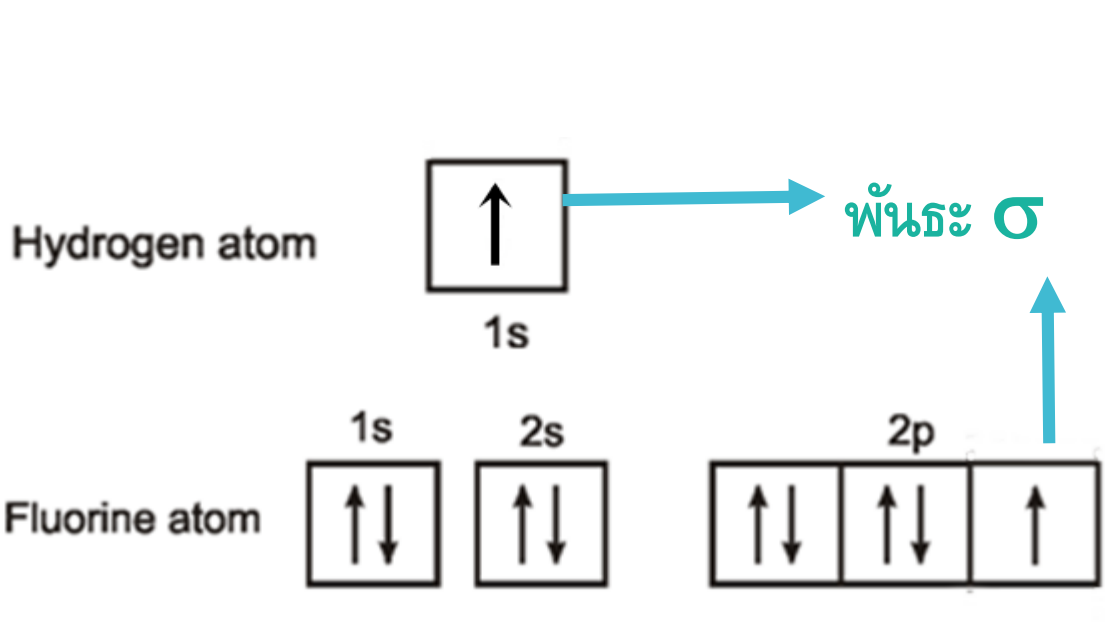
Valence Bond Theory (VBT)

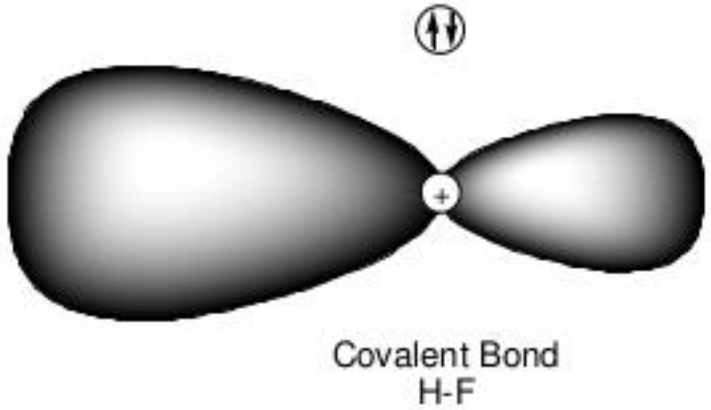
ตัวอย่างการเกิดพันธะใน HF

H $1s^1$

F $1s^2$ $2s^2$ $2p^5$



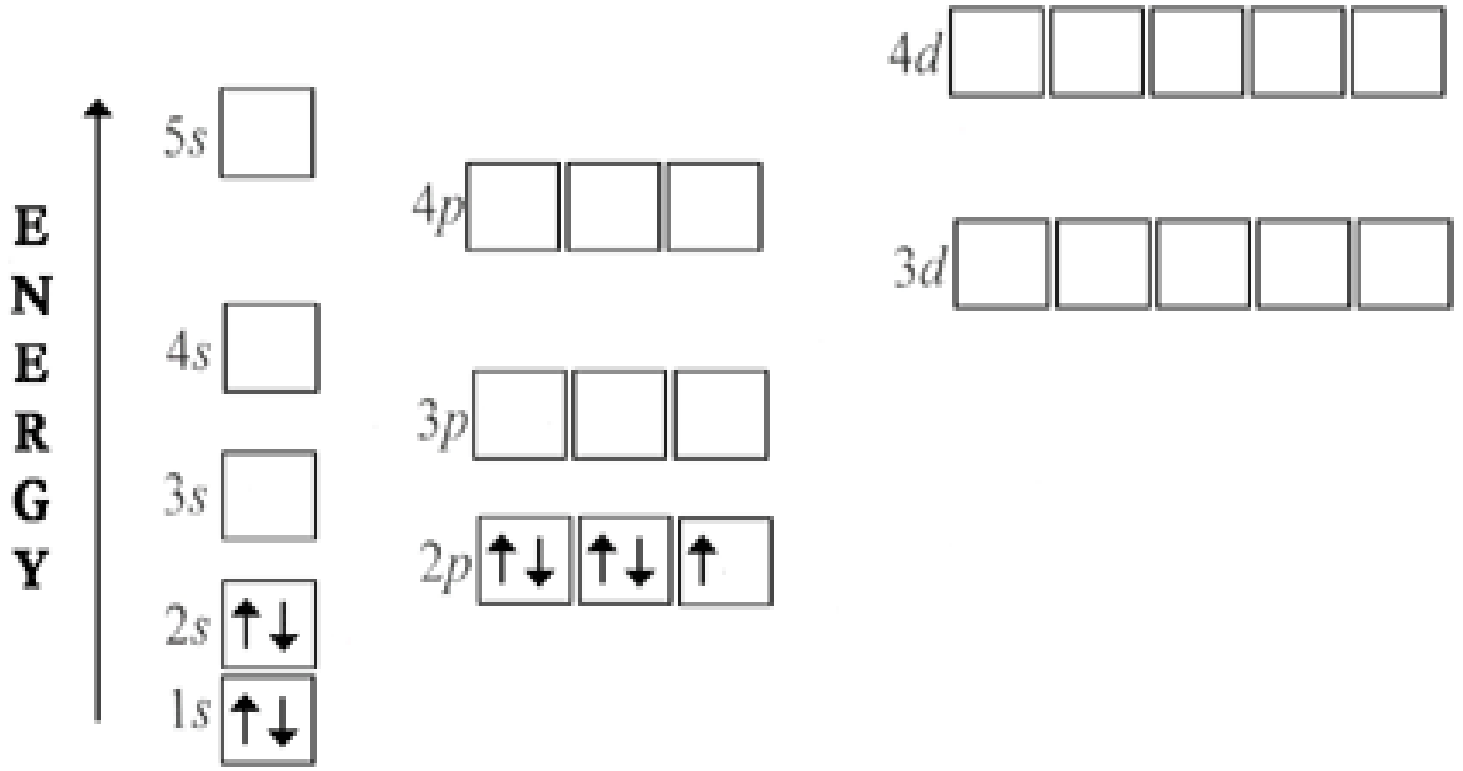




Valence Bond Theory (VBT)

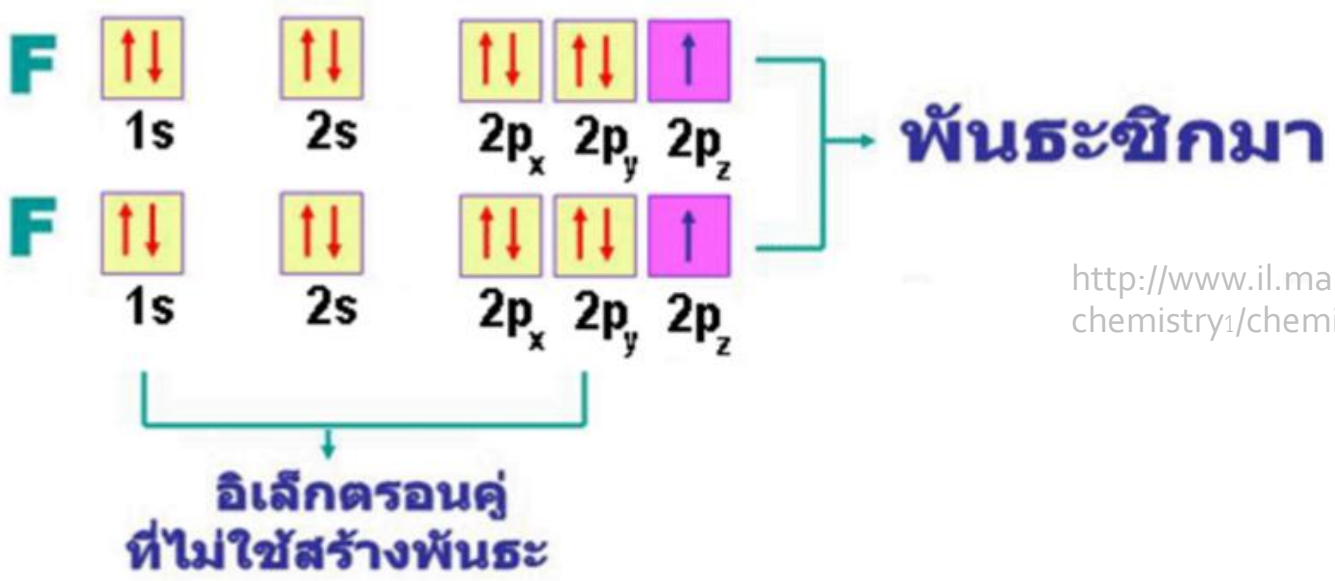
ตัวอย่างการเกิดพันธะใน F_2

F	$1s^2$	$2s^2$	$2p^5$
F	$1s^2$	$2s^2$	$2p^5$

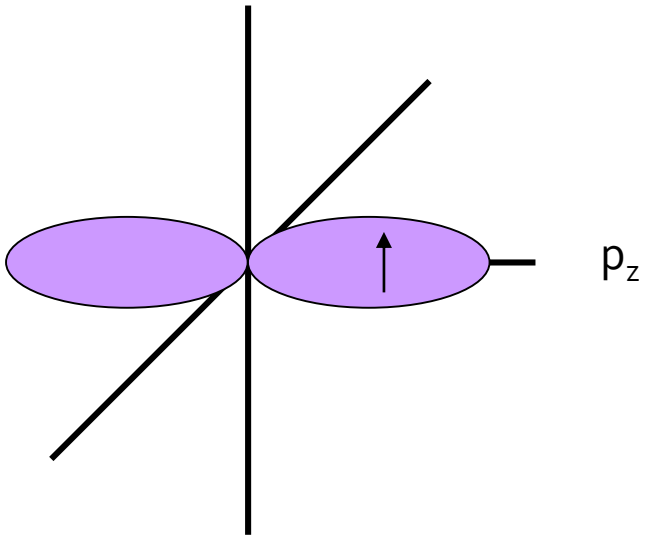


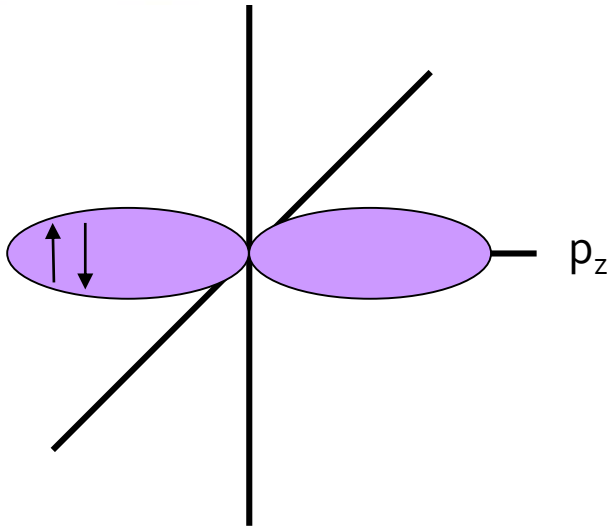
Valence Bond Theory (VBT)

F_2



http://www.il.mahidol.ac.th/e-media/ap-chemistry1/chemical_bonding/covalent3.htm

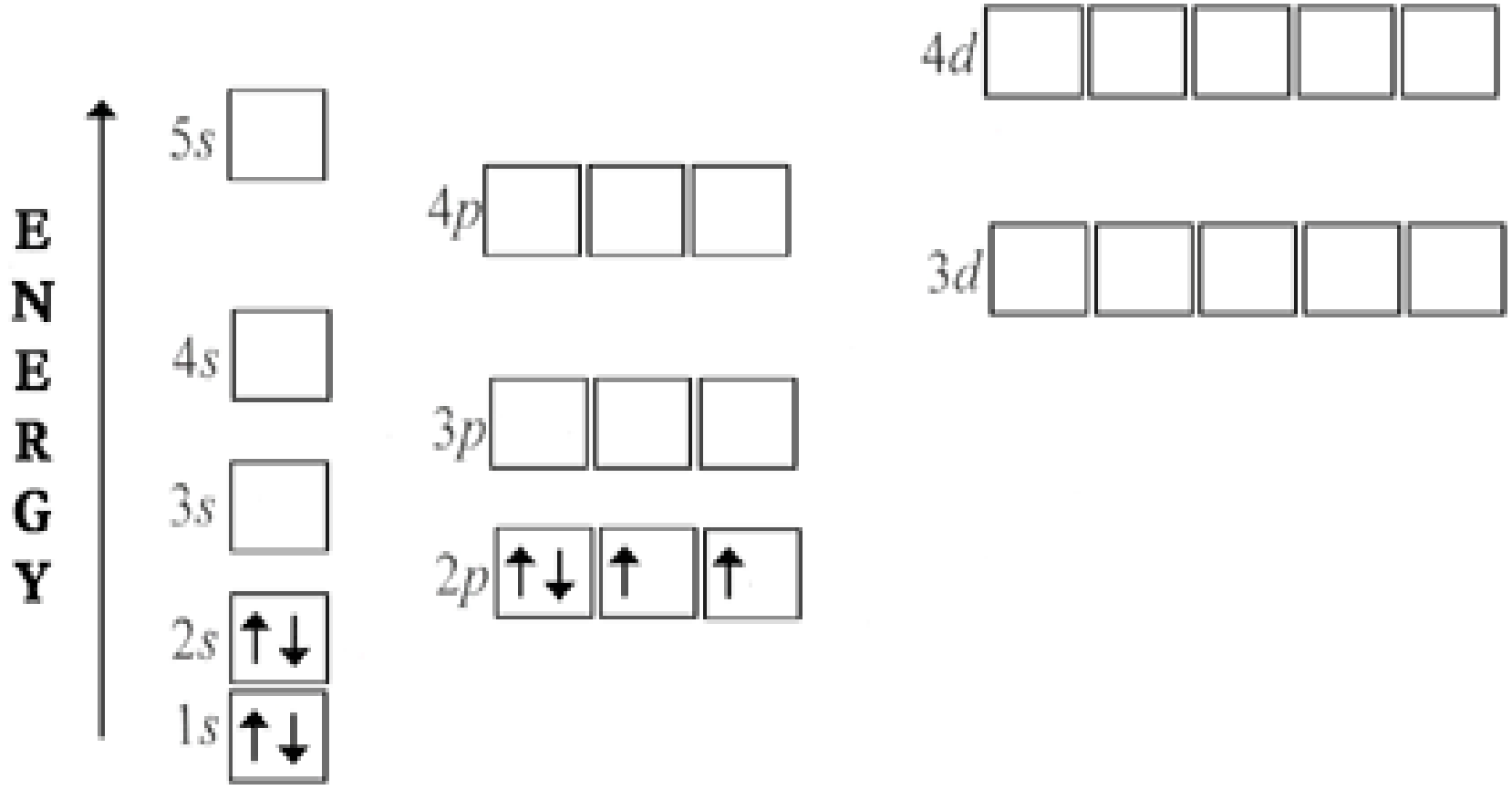




Valence Bond Theory (VBT)

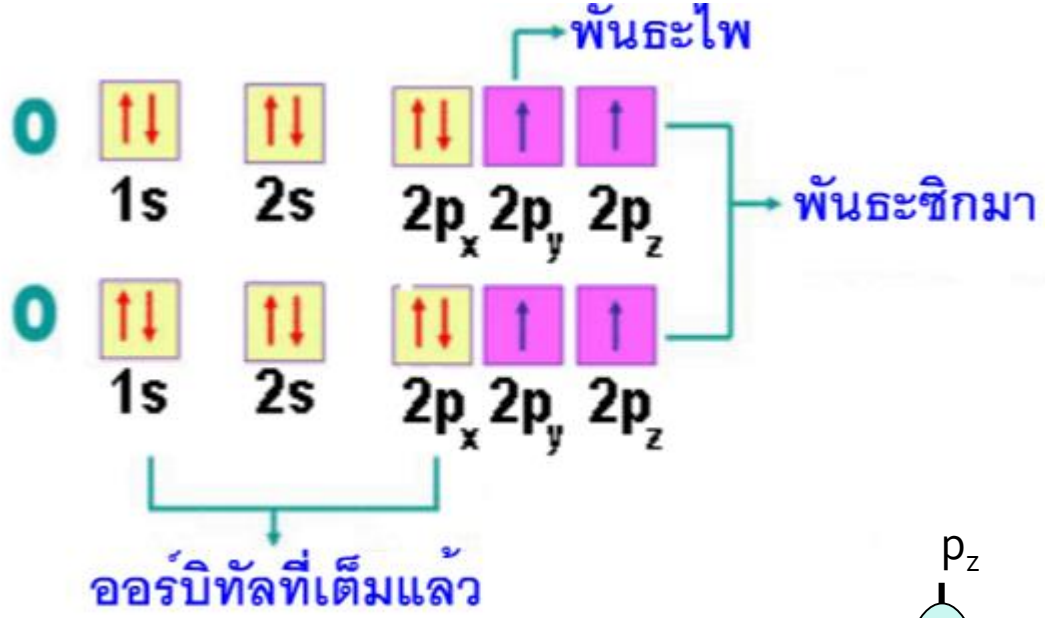
ตัวอย่างการเกิดพันธะใน O_2

O	$1s^2$	$2s^2$	$2p^4$
O	$1s^2$	$2s^2$	$2p^4$

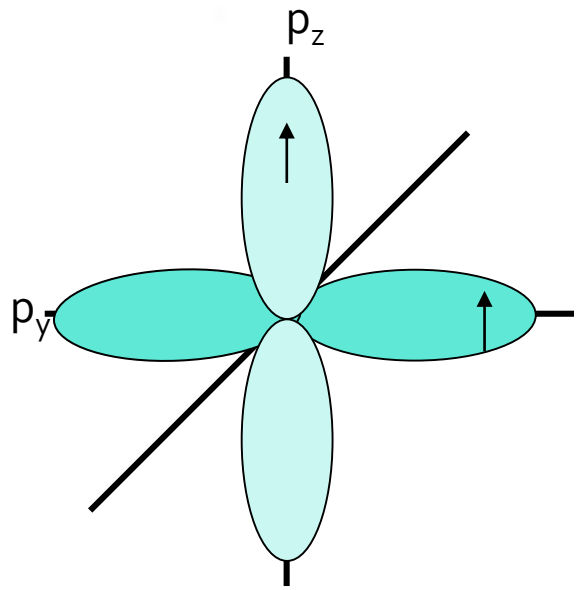


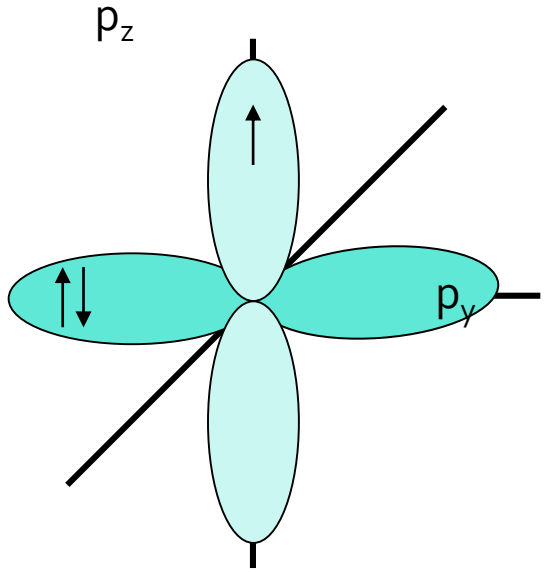
Valence Bond Theory (VBT)

O_2



http://www.il.mahidol.ac.th/e-media/ap-chemistry1/chemical_bonding/covalent3.htm

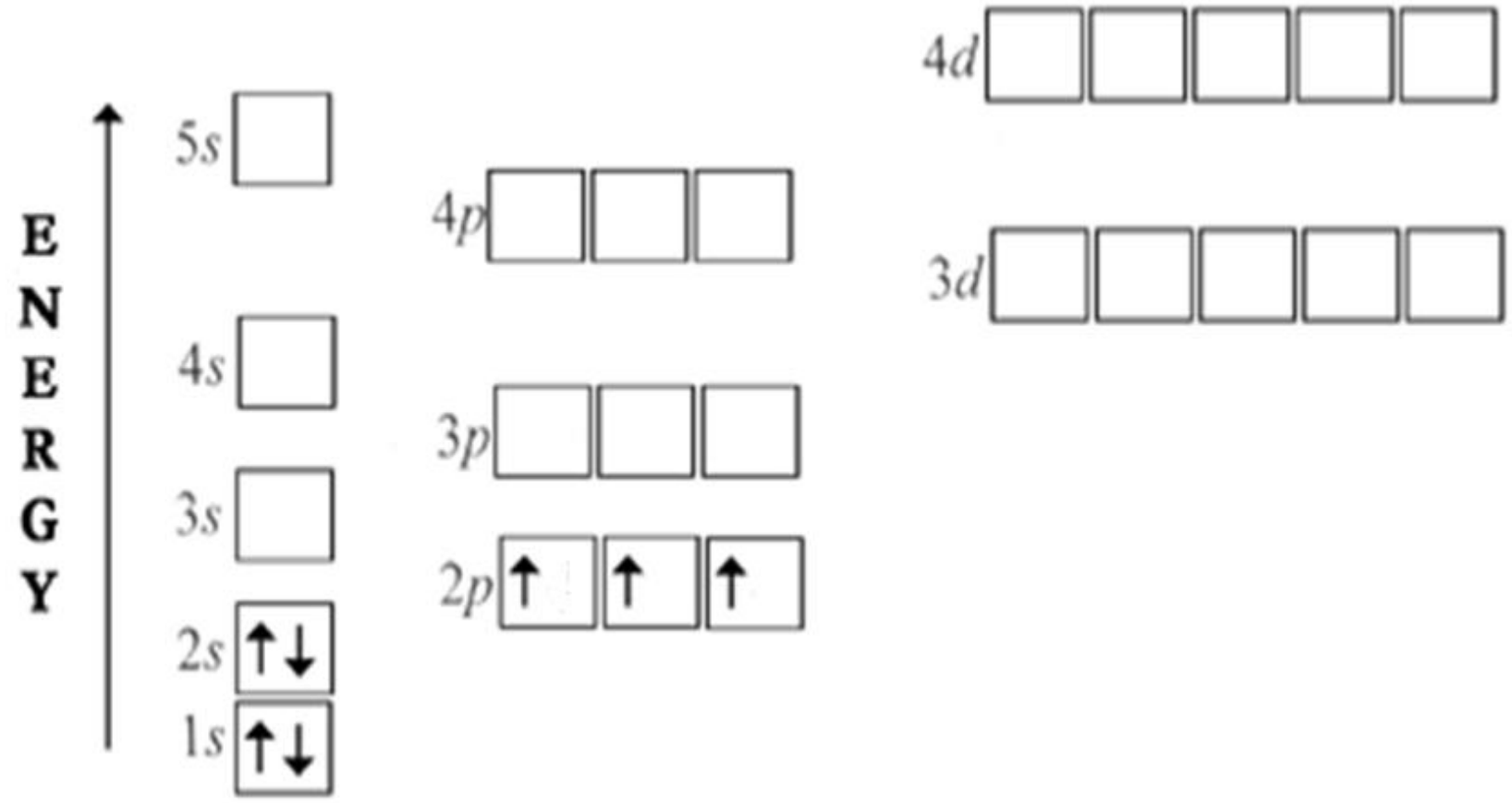




Valence Bond Theory (VBT)

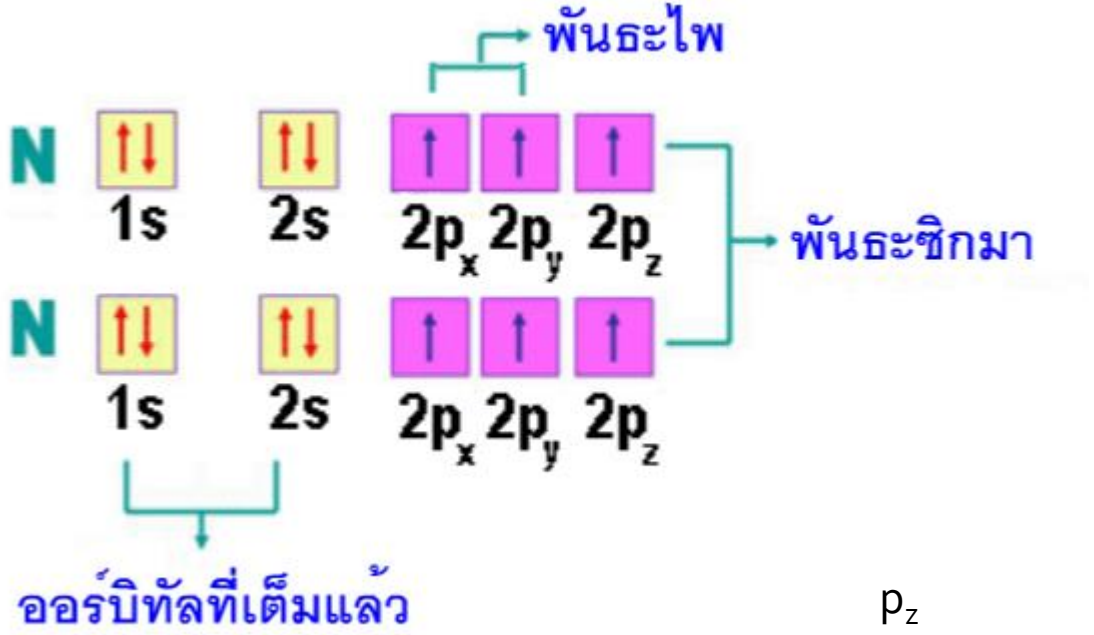
ตัวอย่างการเกิดพันธะใน N_2

N	$1s^2$	$2s^2$	$2p^3$
N	$1s^2$	$2s^2$	$2p^3$

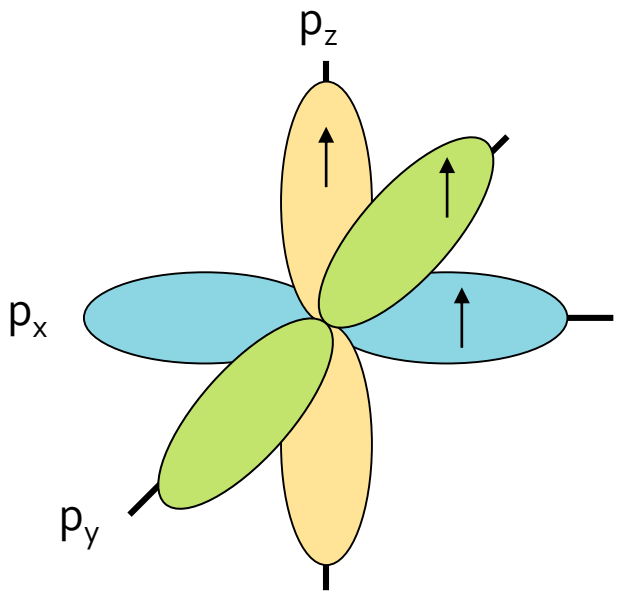


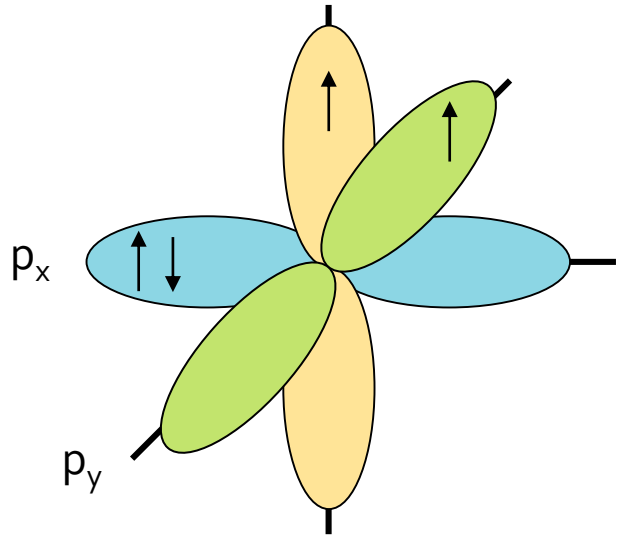
Valence Bond Theory (VBT)

N_2



http://www.il.mahidol.ac.th/e-media/ap-chemistry1/chemical_bonding/covalent3.htm





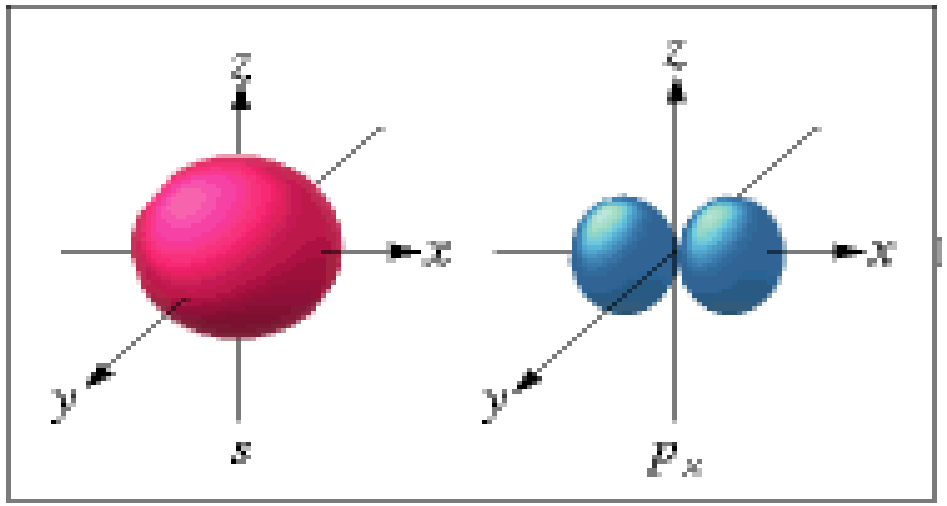
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

ไฮบริไดเซชัน (hybridization)

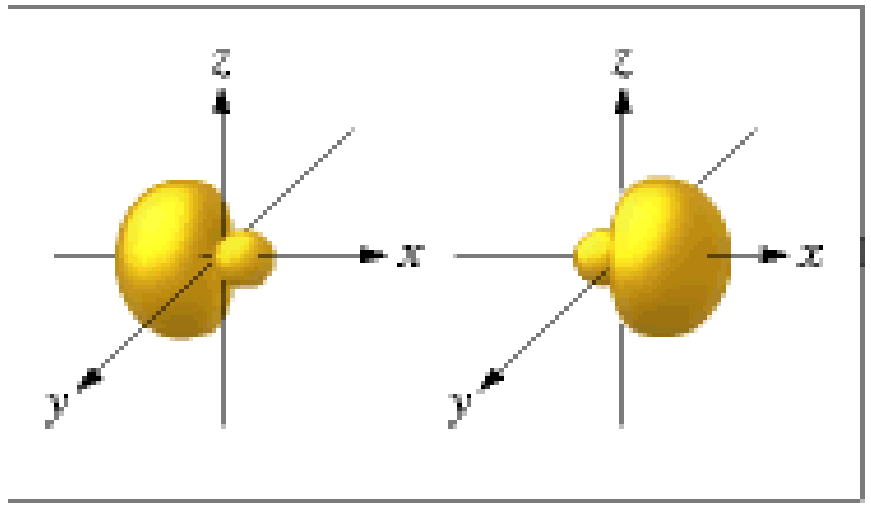
คือ ปรากฏการณ์ที่ออร์บิทัลในอะตอมเดียวกัน ที่มีระดับพลังงานใกล้เคียงกันเกิดการรวมกันเกิดเป็นไฮบริดออร์บิทัล (hybrid orbital) ซึ่งแต่ละไฮบริดออร์บิทัลจะครอบครองพื้นที่เท่ากัน และอยู่ห่างกันมากที่สุดเพื่อทำให้พลังงานรวมของออร์บิทัลมีพลังงานน้อยที่สุด

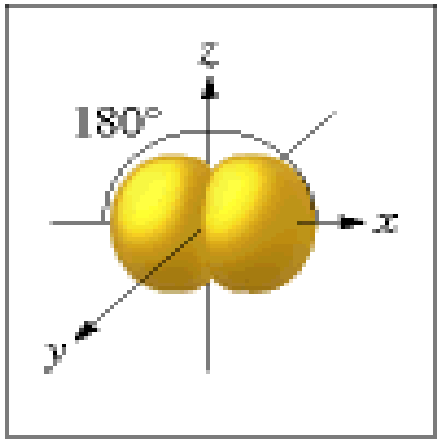
ไฮบริดออร์บิทัลมีรูปร่างต่าง ๆ กันไป ทำให้โมเลกุลมีรูปร่างต่างกันนั่นเอง และพลังงานรวมของไฮบริดออร์บิทัลจะน้อยกว่าผลรวมพลังงานทั้งหมดของออร์บิทัลอะตอมก่อนการเกิดไฮบริไดเซชัน

Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)



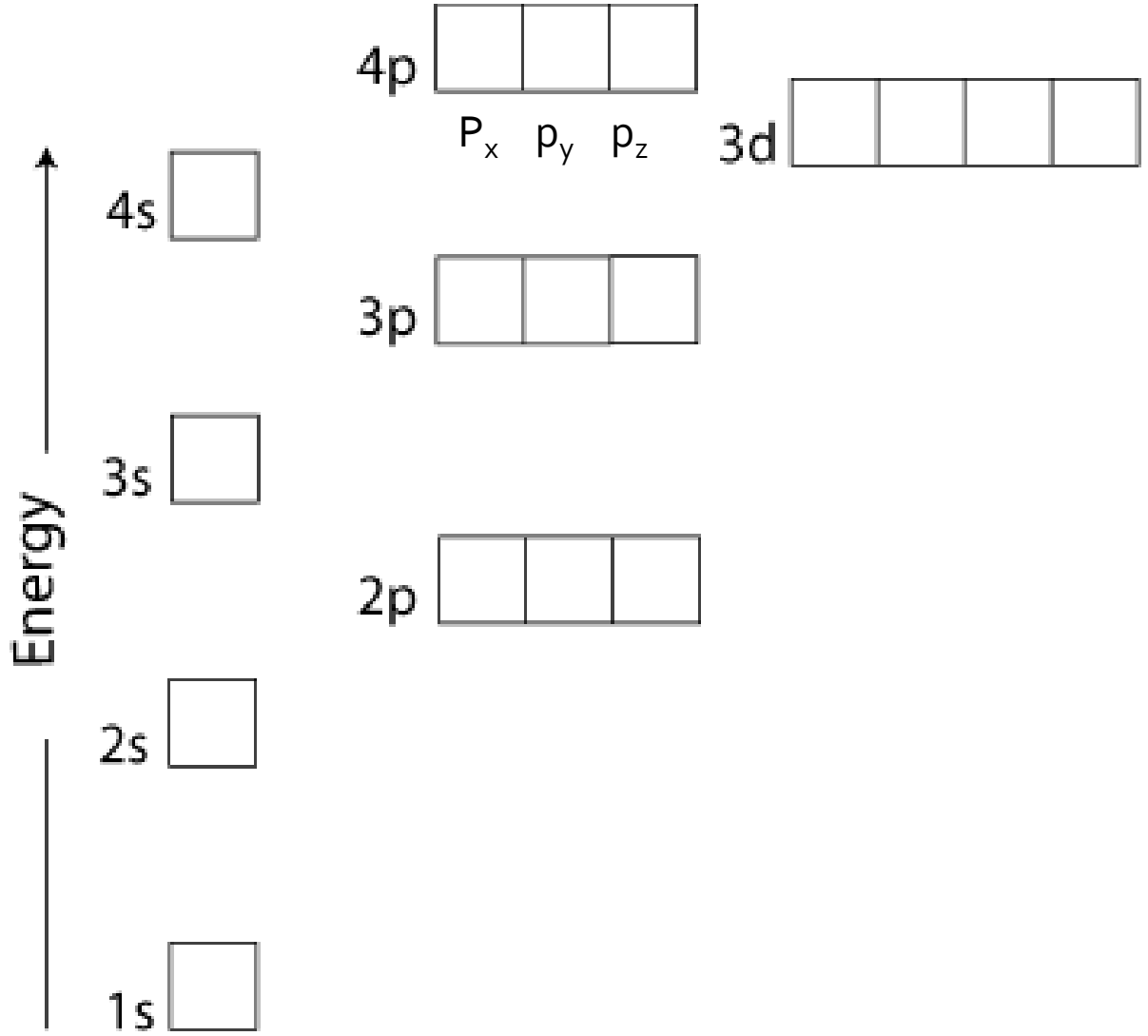
hybridization





Gives a linear arrangement

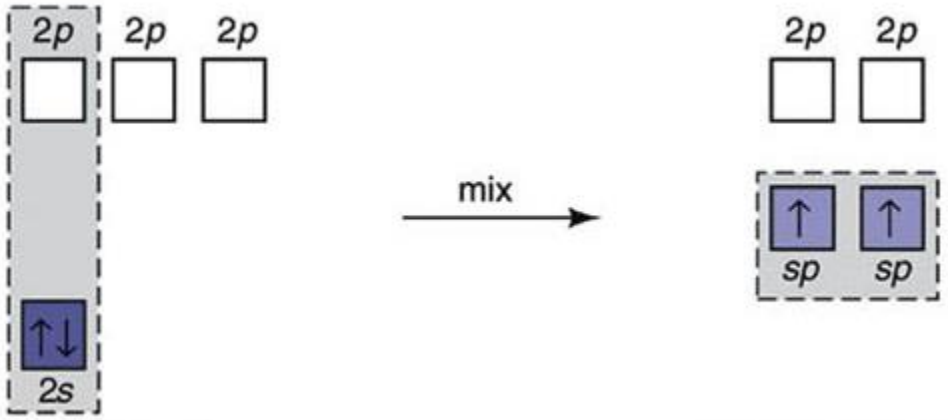
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)



ประเภท Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

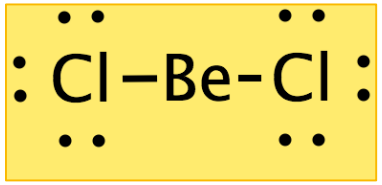
sp hybridization

เกิดจากการรวมกันระหว่าง s และ p ออร์บิทัลอย่างละหนึ่งออร์บิทัลได้ไฮบริดออร์บิทัลเป็นเส้นตรง (Linear)



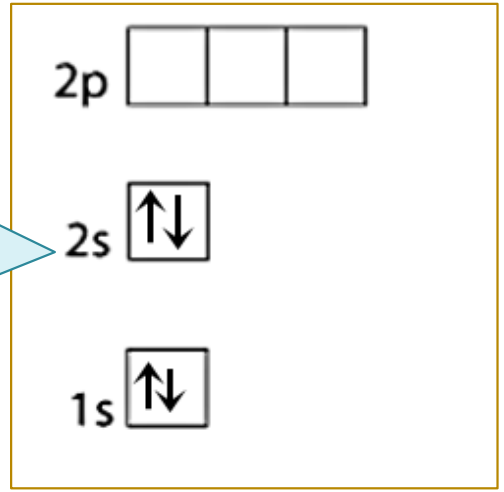
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

$BeCl_2$

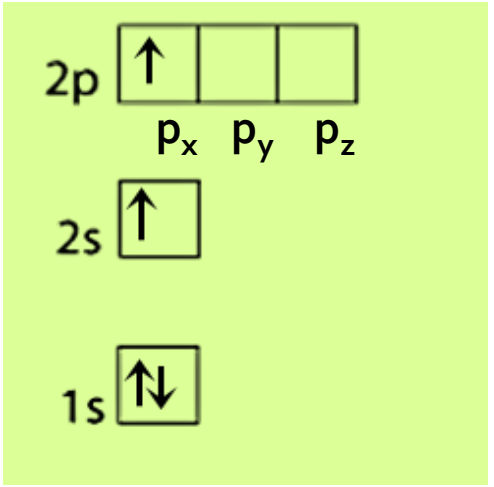


พิจารณาอะตอมกลาง : Be $1s^2$ $2s^2$

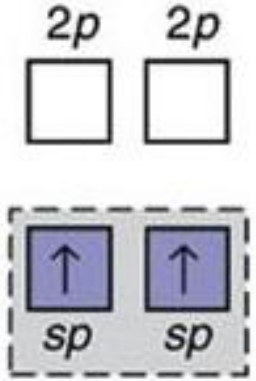
ไม่มีอิเล็กตรอนเดี่ยวที่สามารถนำไปใช้ในการสร้างพันธะร่วมกับอะตอมของ Cl ได้



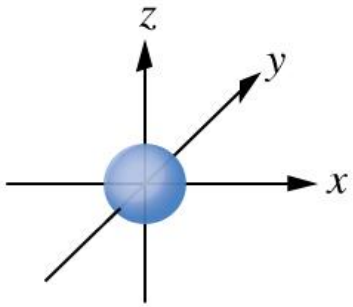
hybridization



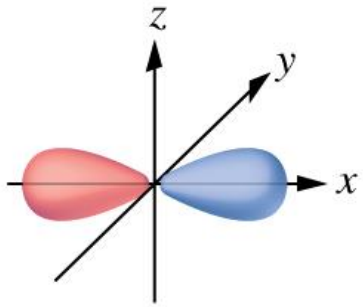
sp orbital



linear

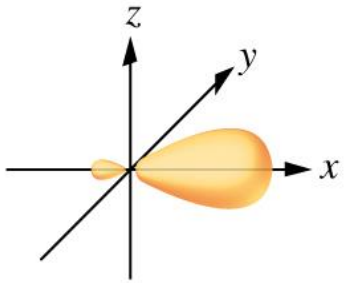


S orbital

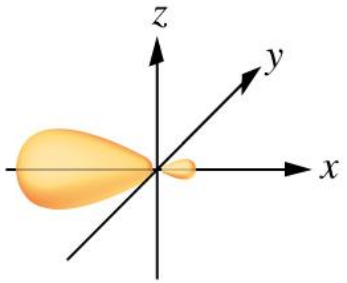


p_x orbital

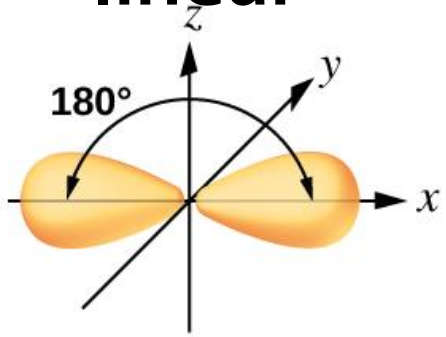
hybridization



sp

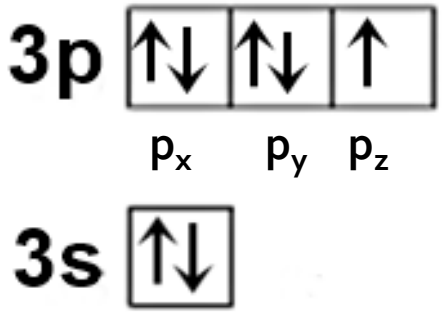


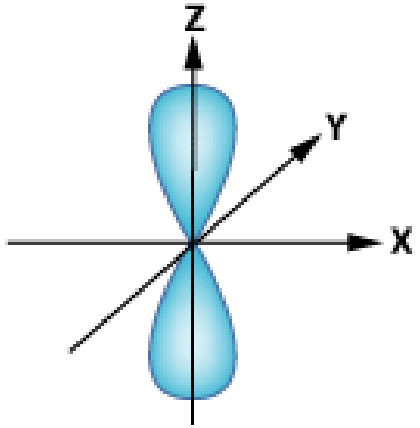
sp



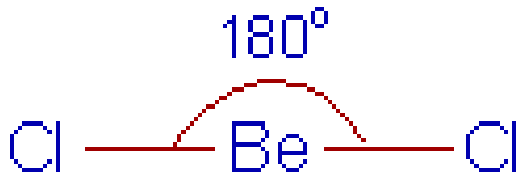
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

พิจารณา : Cl $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^5$





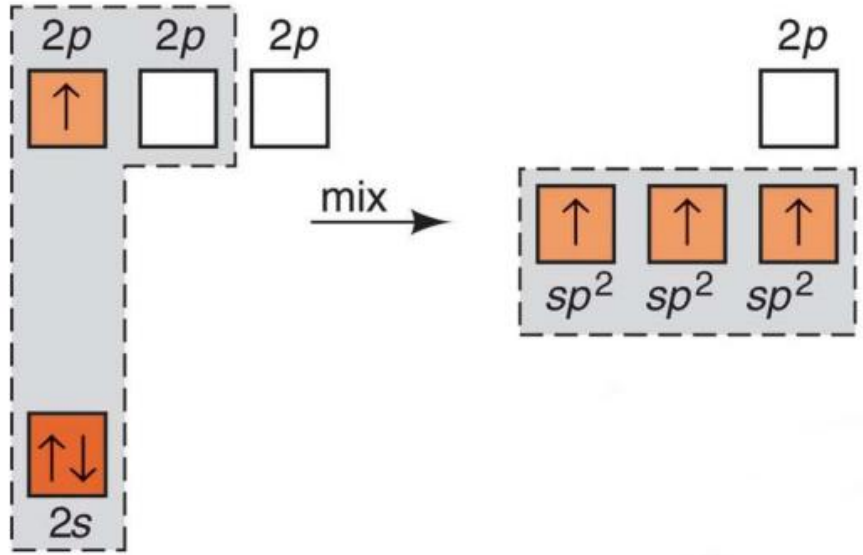
$BeCl_2$



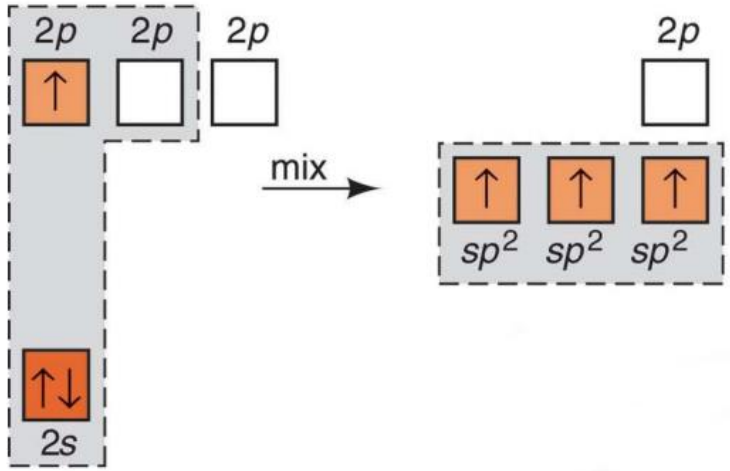
ประเภท Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

sp^2 hybridization

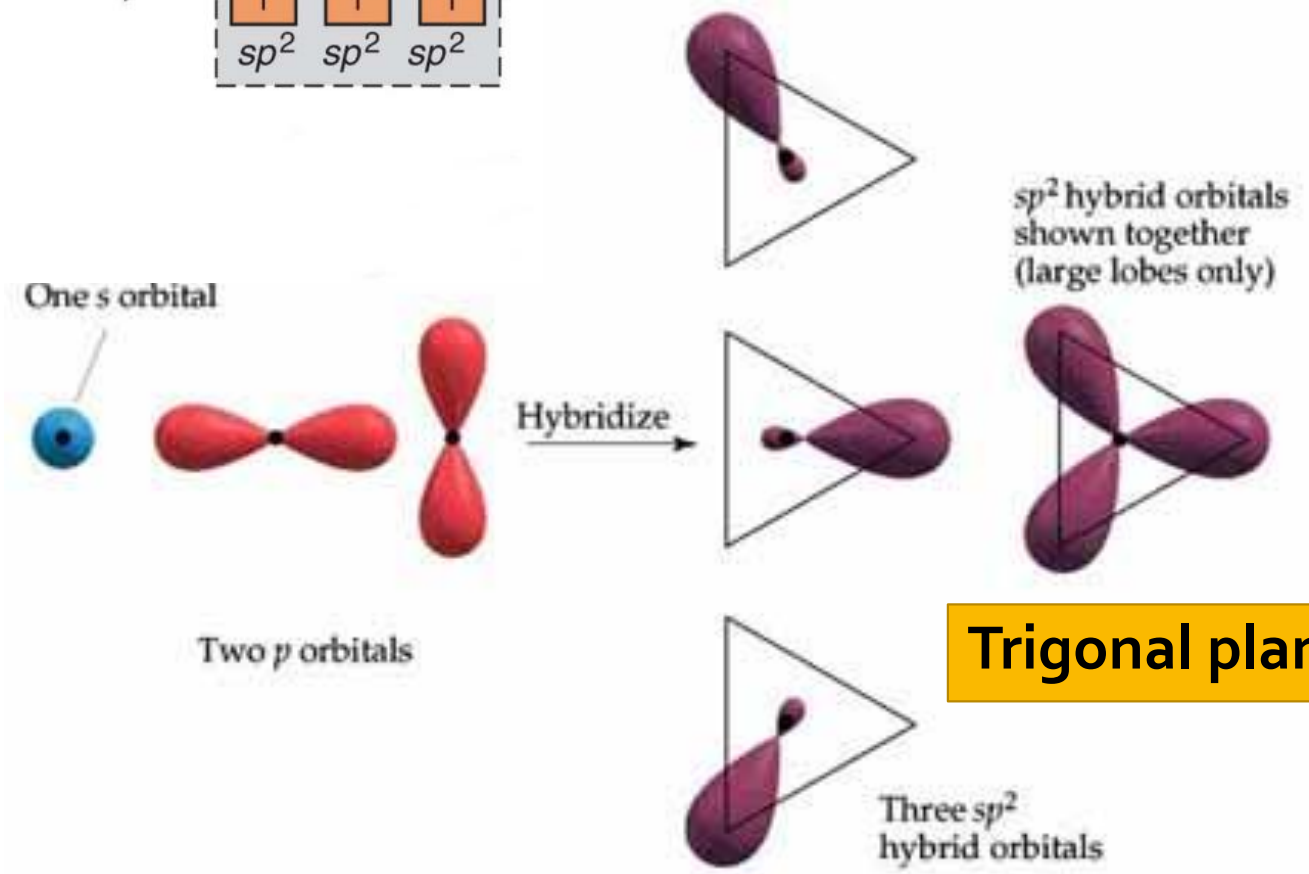
เกิดจากการรวมกันระหว่าง s หนึ่งออร์บิทัลและ p สองออร์บิทัลได้ไฮบริดออร์บิทัลเป็นสามเหลี่ยมแบนราบ (Trigonal planar)



Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

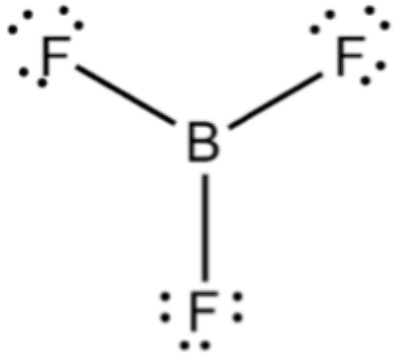


B $1s^2$ $2s^2$ $2p^1$

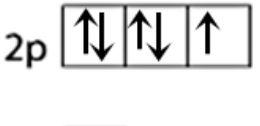


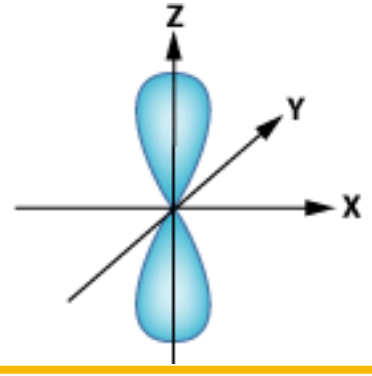
Trigonal planar

BF_3



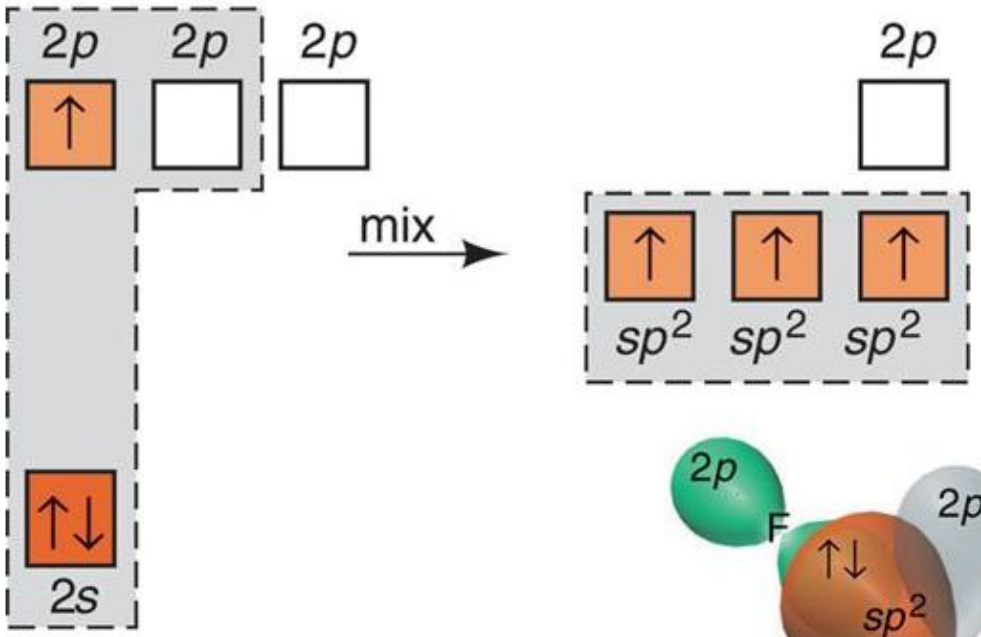
F $1s^2$ $2s^2$ $2p^5$

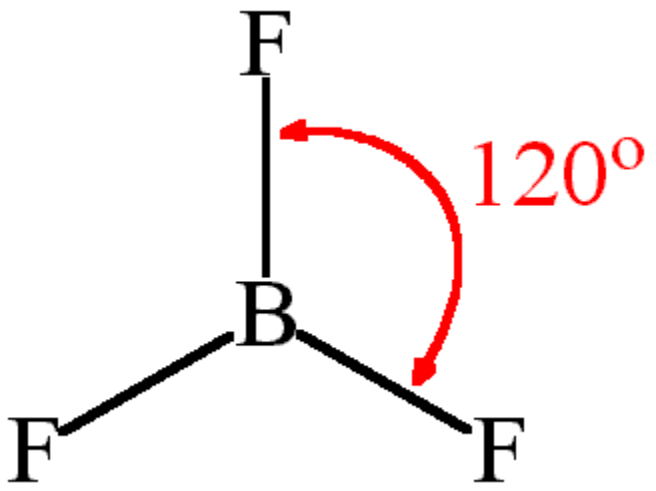


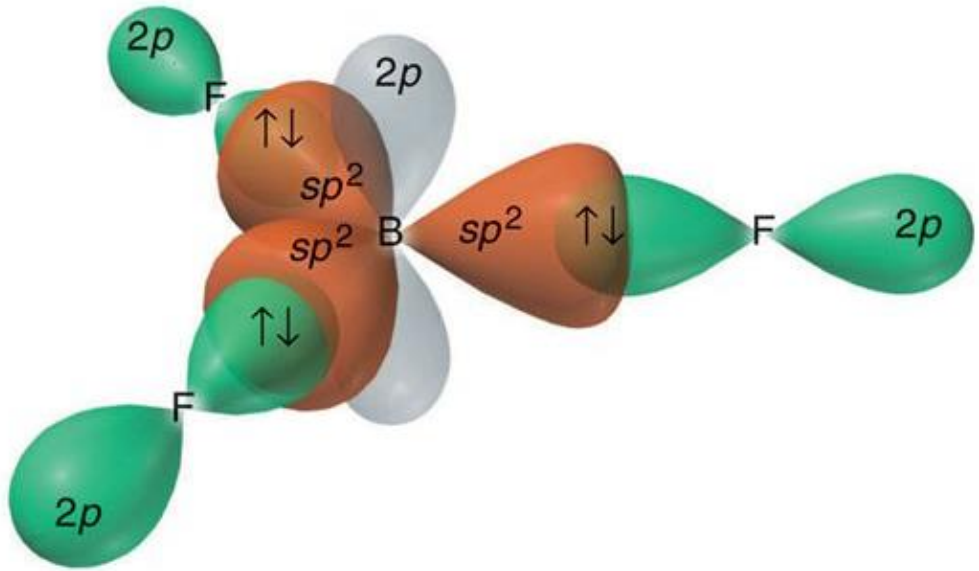


Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

The sp^2 hybrid orbitals in BF_3.



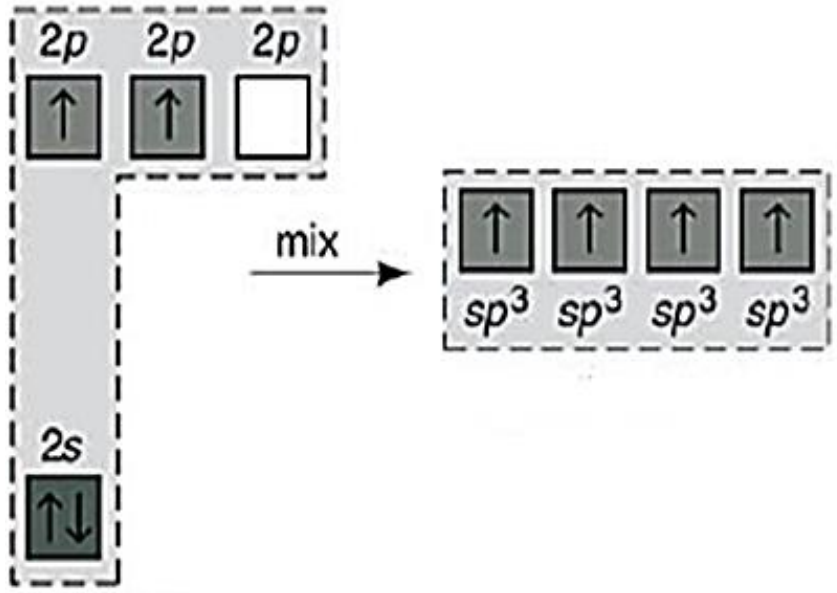




ประเภท Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

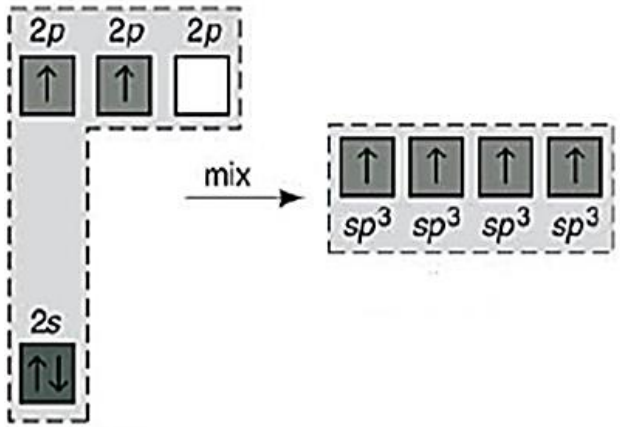
sp^3 hybridization

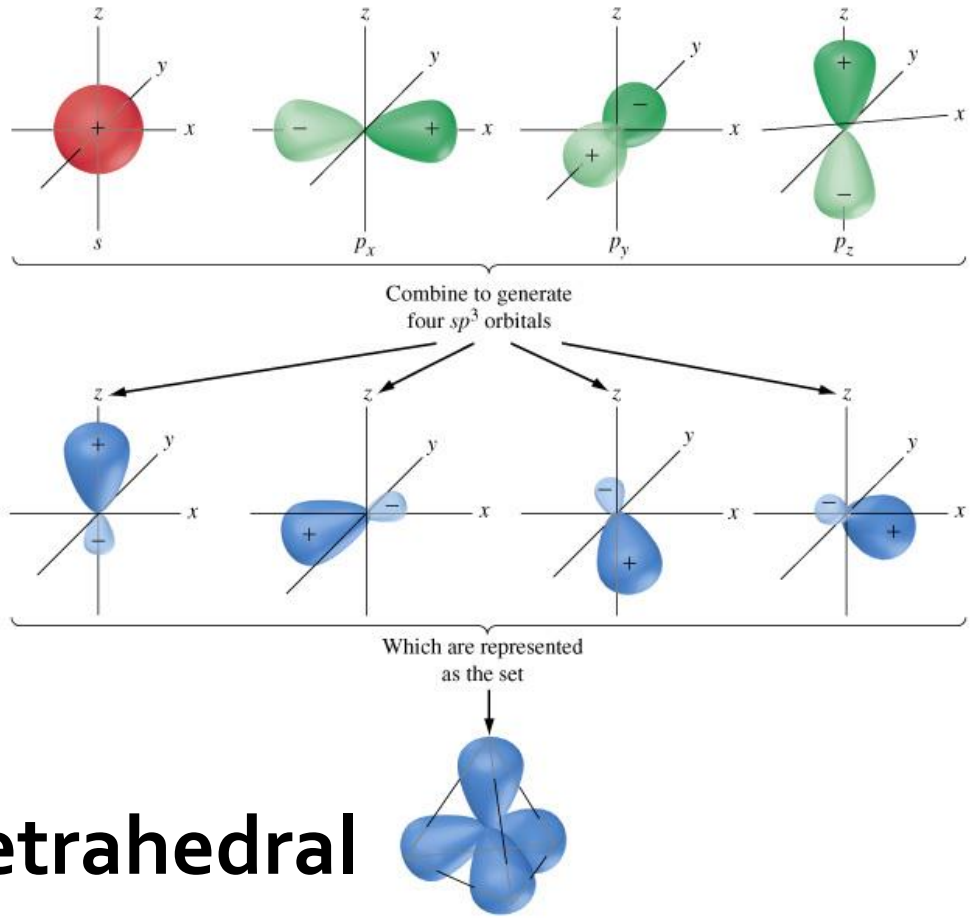
เกิดจากการรวมกันระหว่าง s หนึ่งออร์บิทัลและ p สามออร์บิทัลได้ไฮบริดออร์บิทัลเป็นรูปทรงสี่หน้า (Tetrahedral)



Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

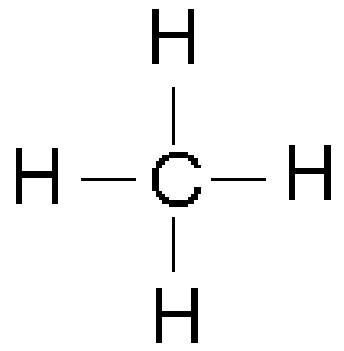
C $1s^2$ $2s^2$ $2p^2$



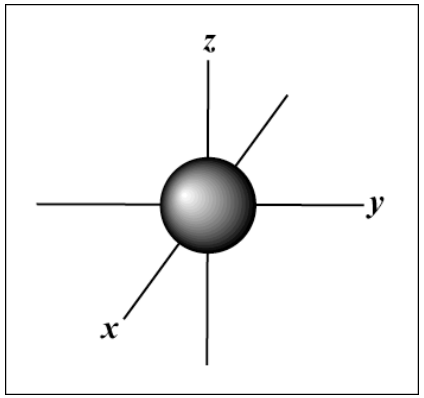


tetrahedral

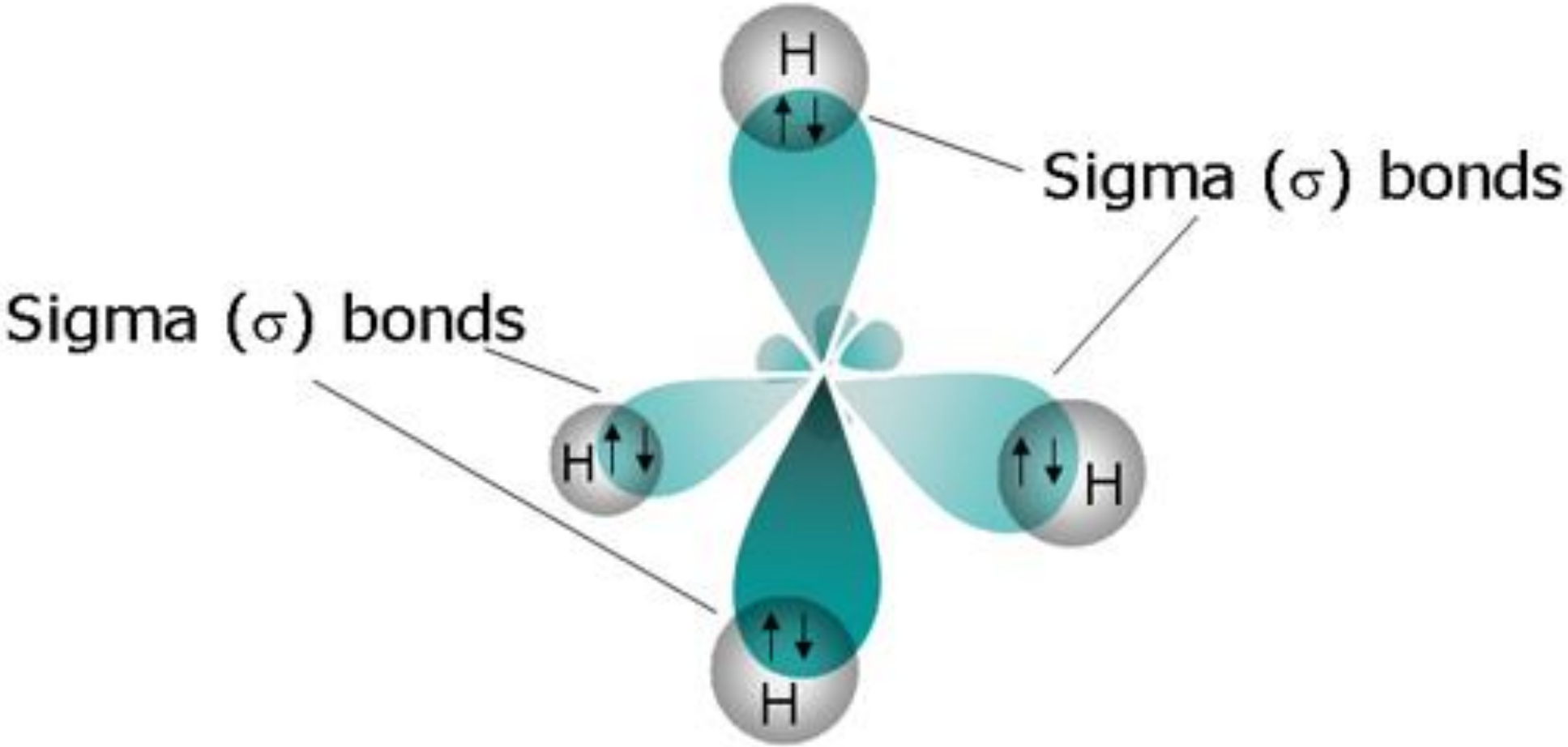
CH_4



H $1s^1$



Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

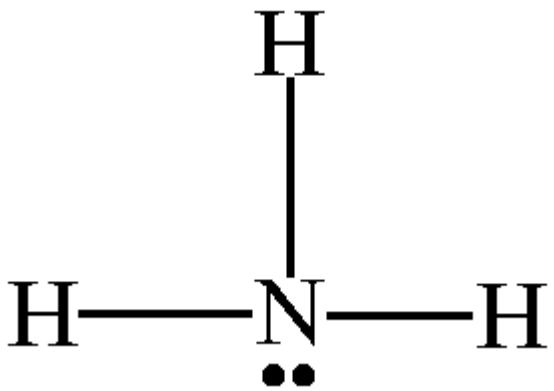


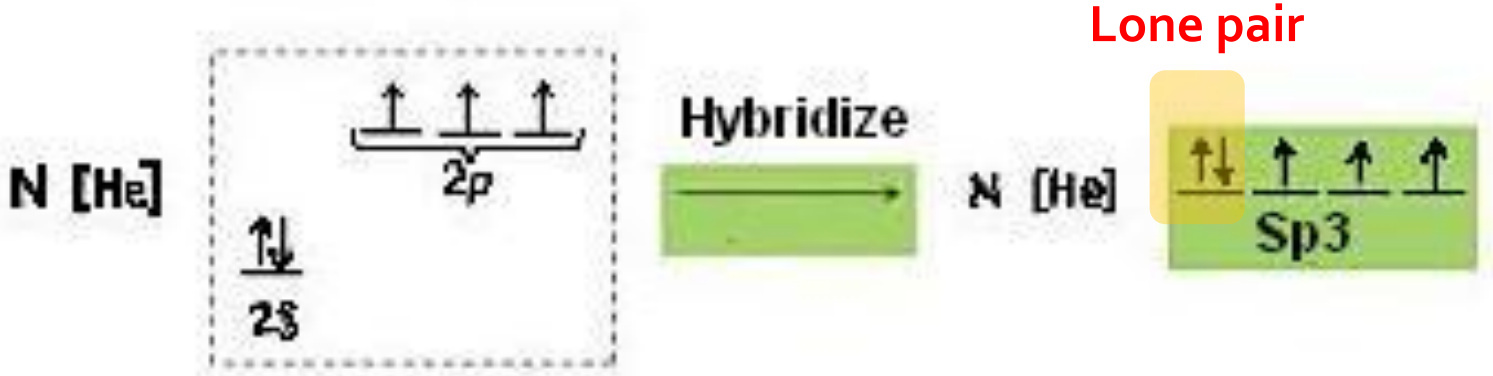
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

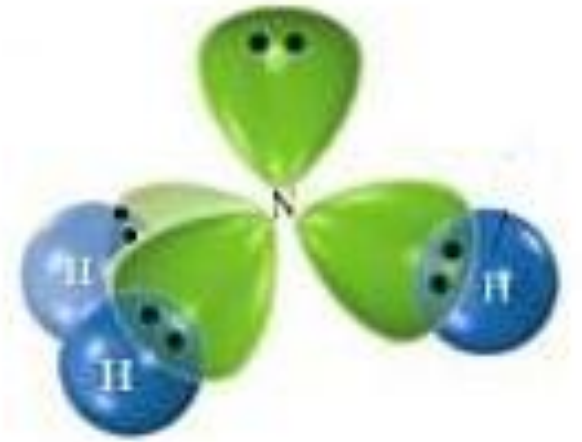
NH_3

N $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$

H $1s^1$







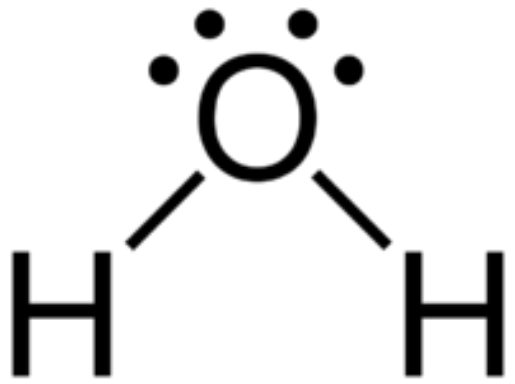
Sp^3 hybridization in NH_3

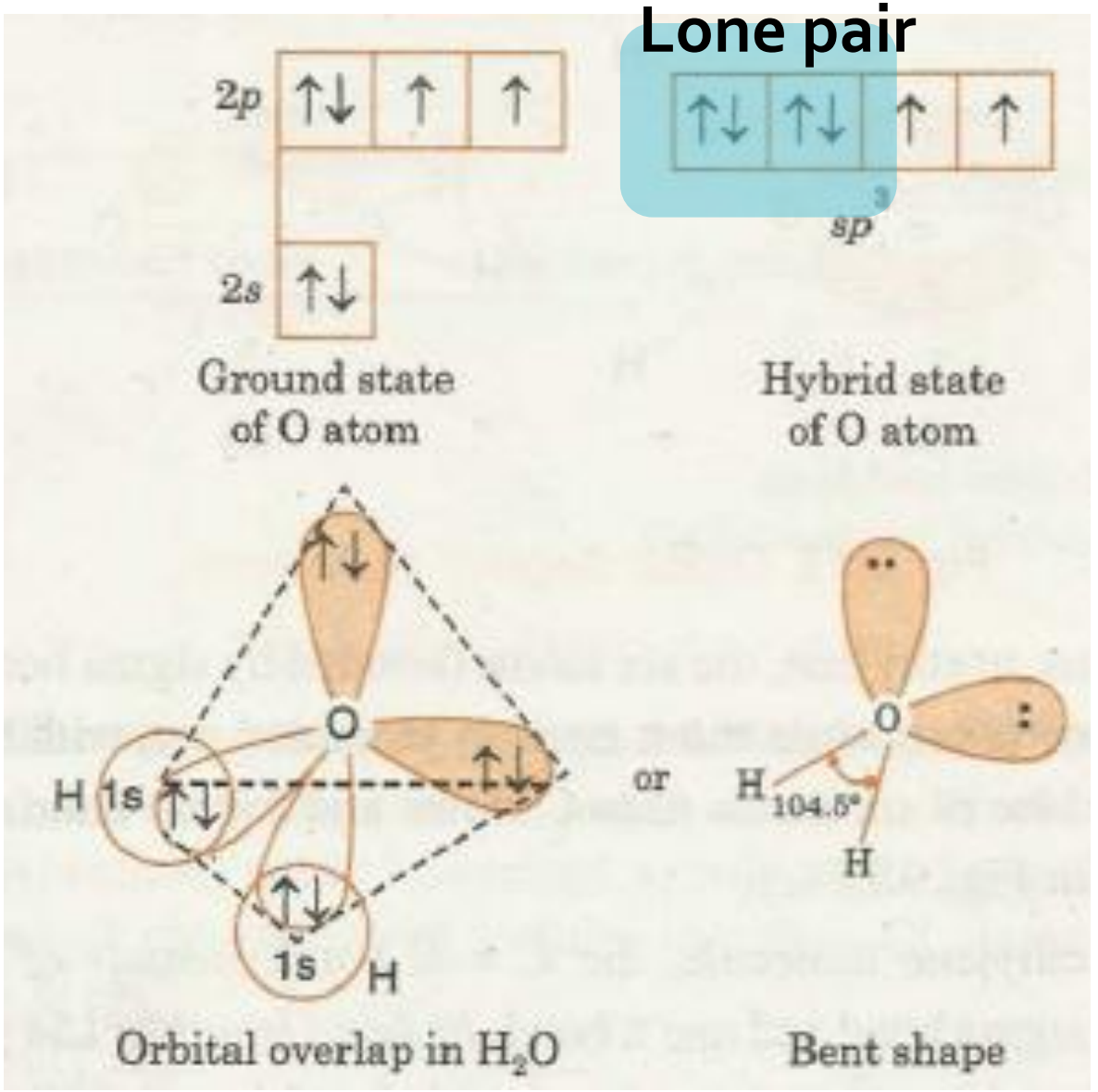
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

H_2O

O $1s^2$ $2s^2$ $2p^4$

H $1s^1$

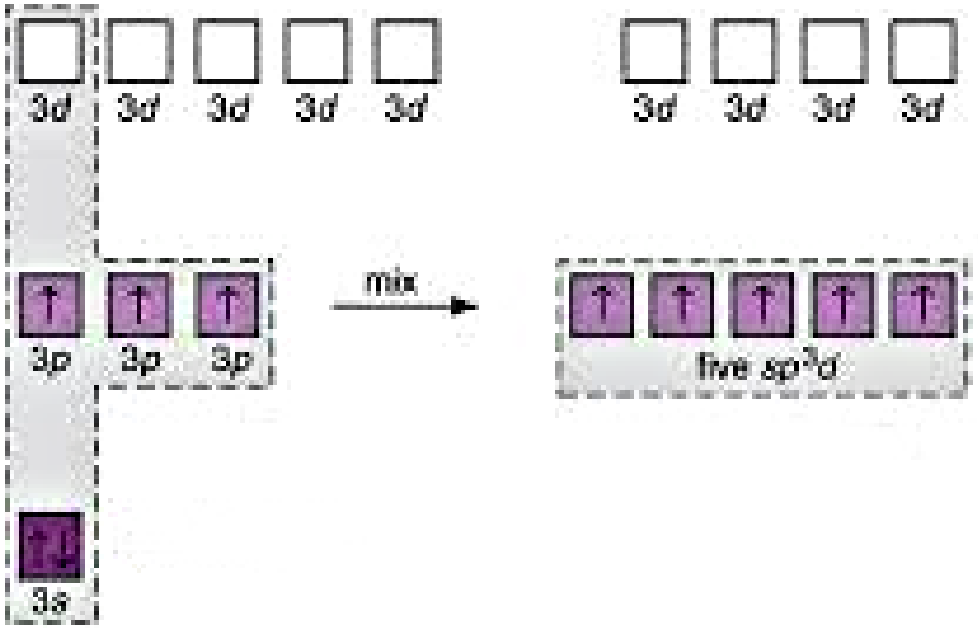


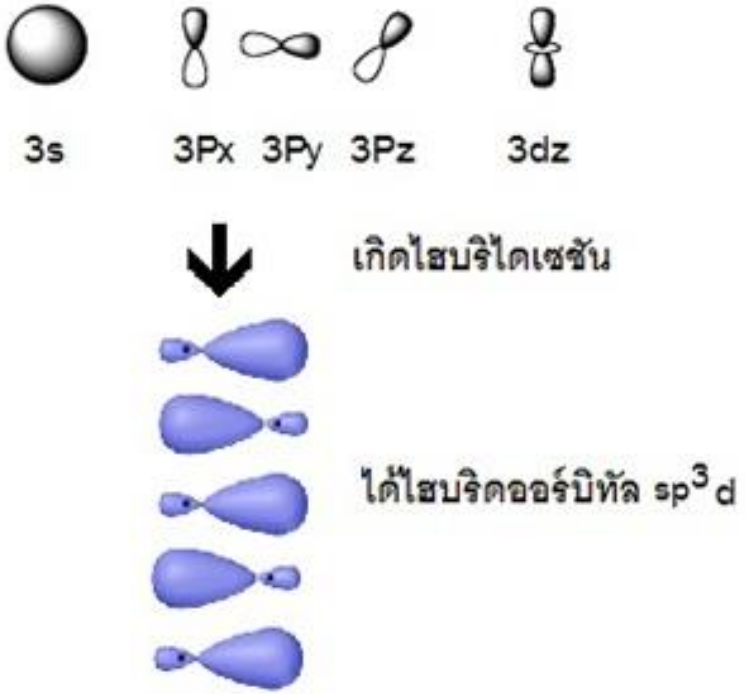


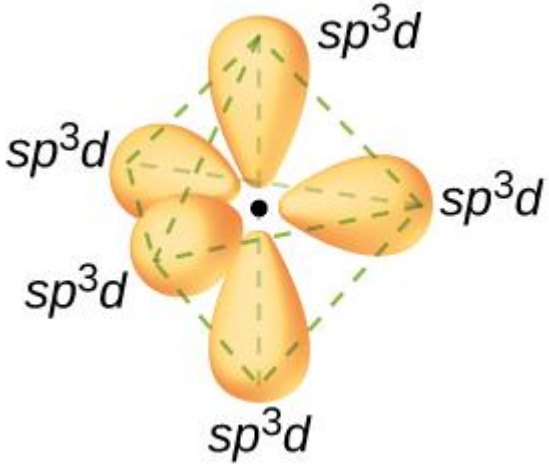
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

sp^3d hybridization

เกิดจากการรวมกันระหว่าง s ออร์บิทัลหนึ่งออร์บิทัล, d ออร์บิทัลหนึ่งออร์บิทัลและ p ออร์บิทัลสามออร์บิทัลได้ไฮบริดออร์บิทัลป็นรูปพีระมิดคู่ฐานสามเหลี่ยม (trigonal bipyramid)



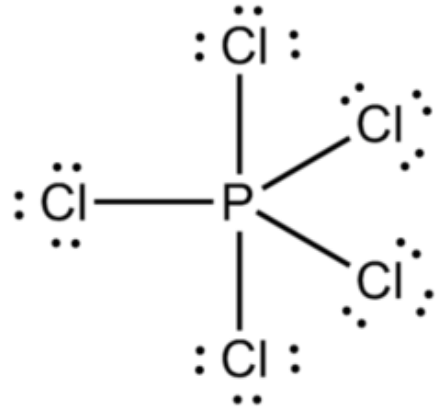




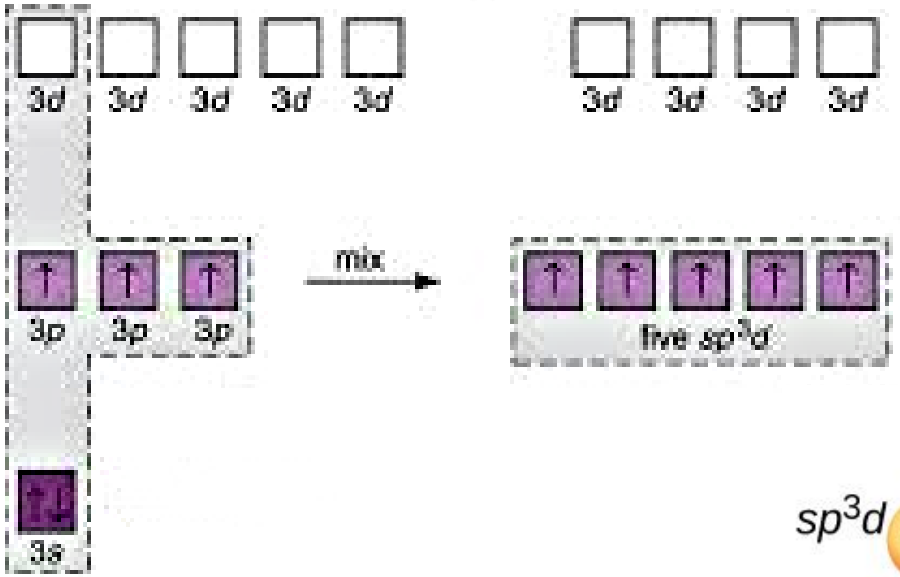
http://www.satriwit3.ac.th/files/1210252020285154

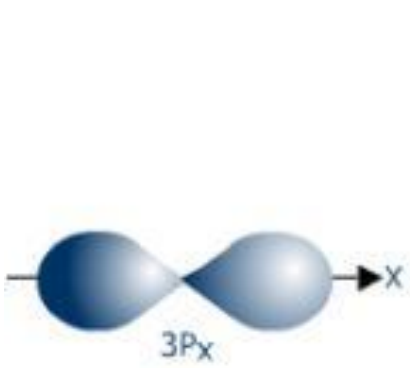
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

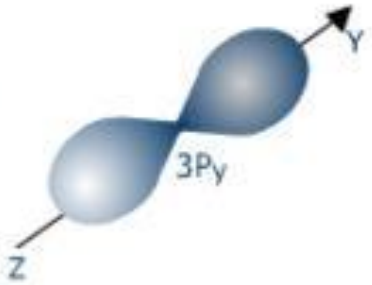
PCl_5

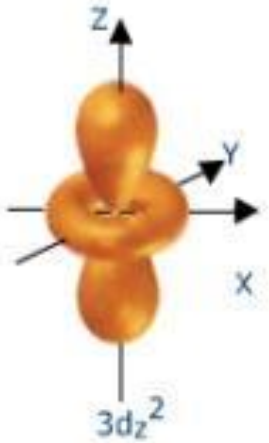


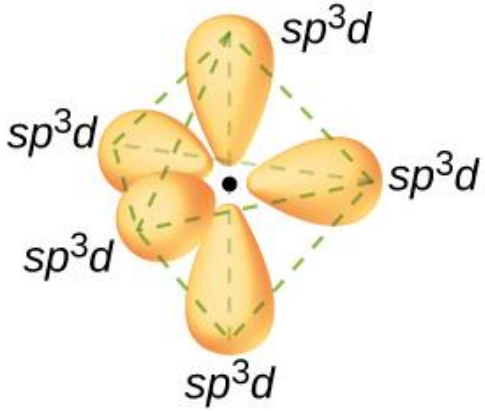
P $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^3$











trigonal bipyramidal

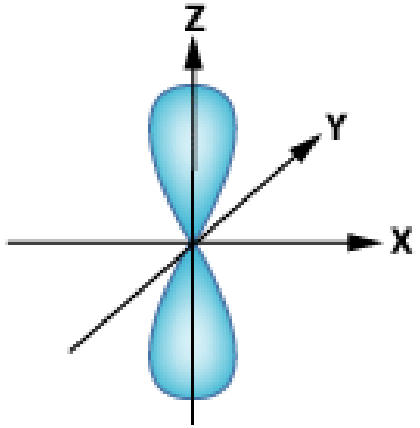
sp^3d hybrid orbitals having trigonal bipyramidal geometry

Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

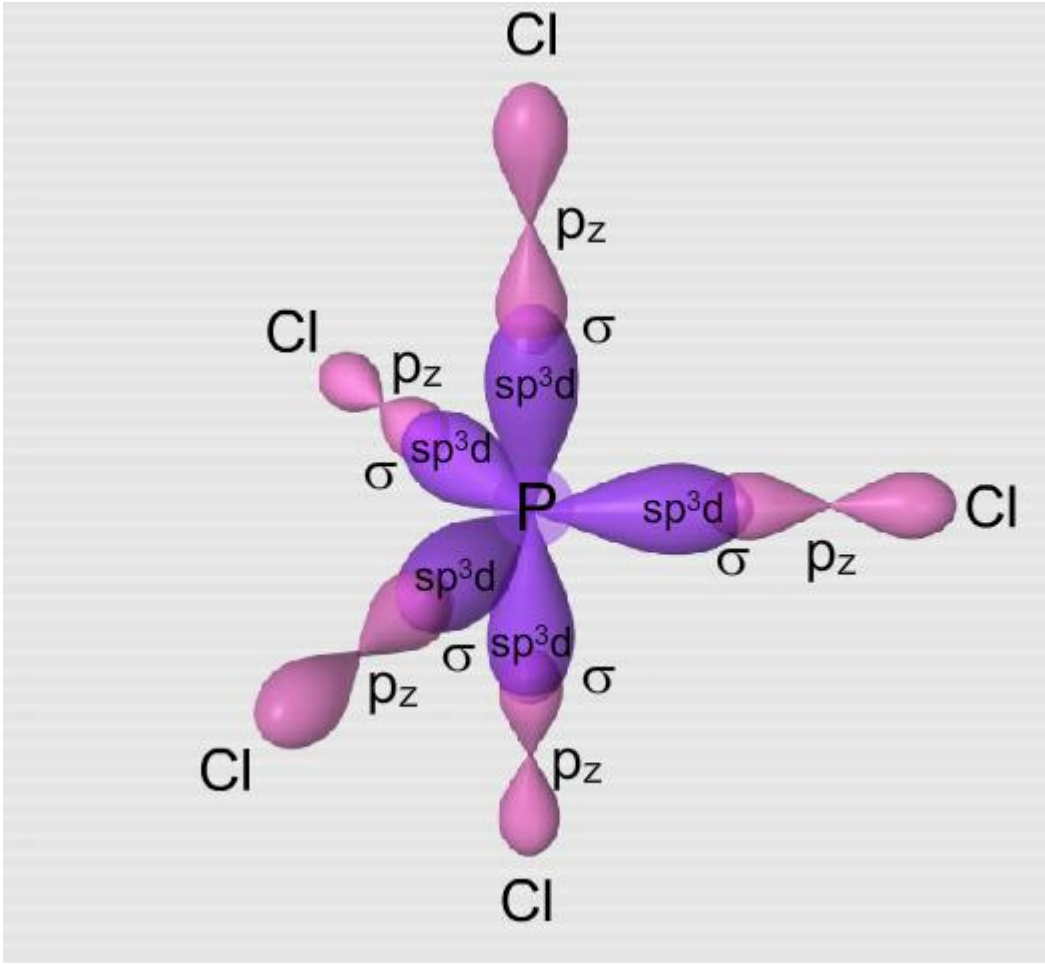
Cl $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^5$

3p ↑↓ ↑↓ ↑

3s ↑↓



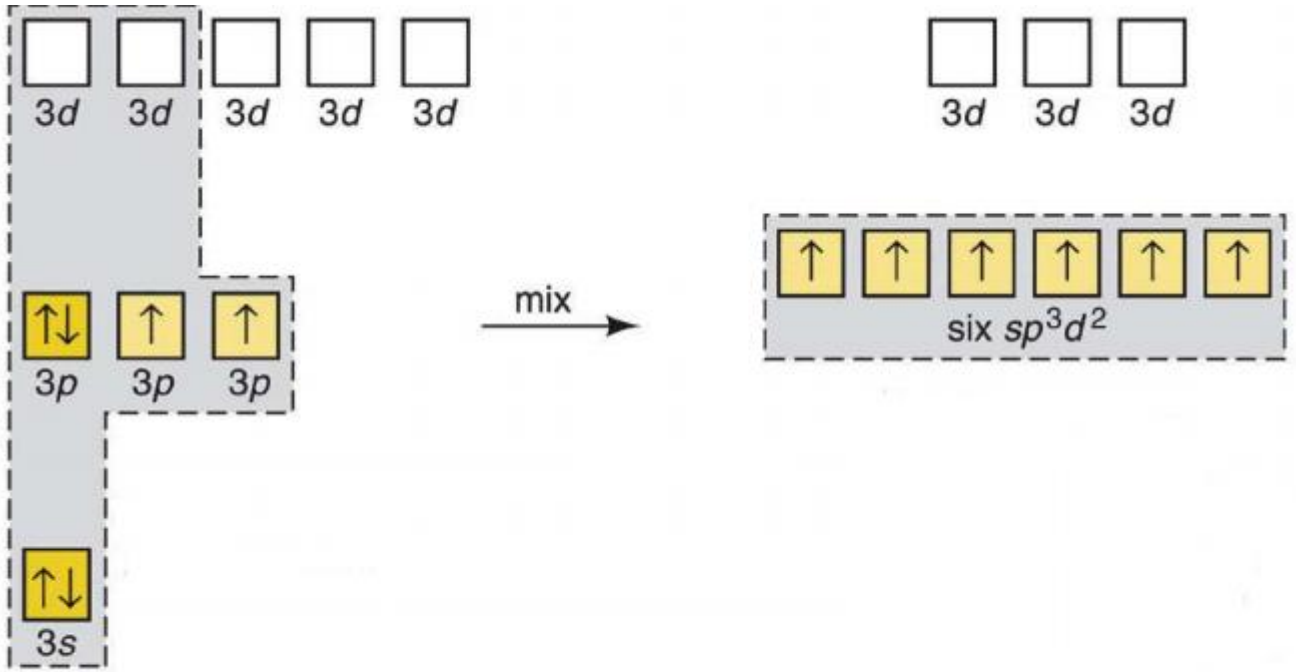
PCl_5

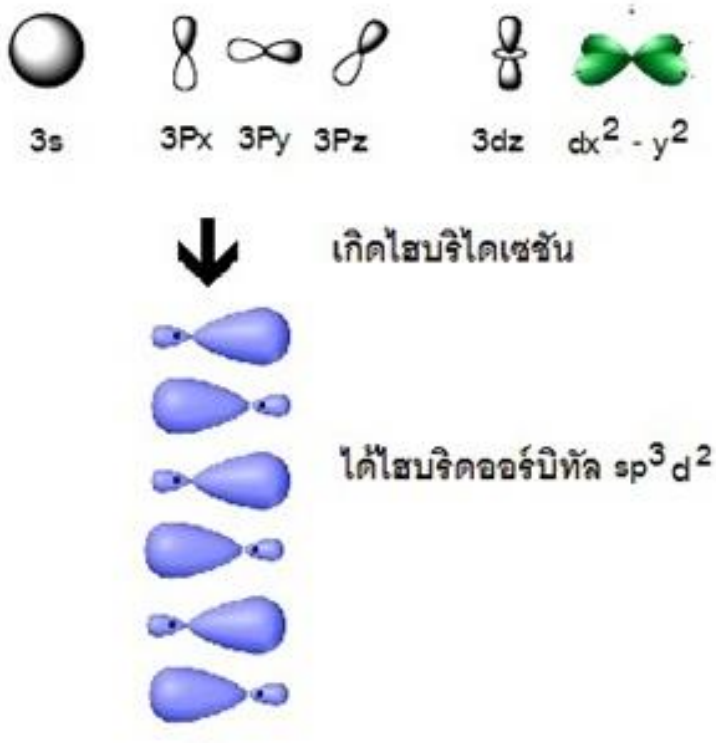


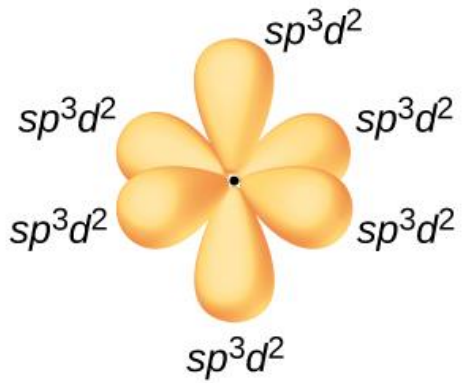
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

sp^3d^2 hybridization

เกิดจากการรวมกันระหว่าง s ออร์บิทัลหนึ่งออร์บิทัล, d ออร์บิทัลสองออร์บิทัลและ p ออร์บิทัลสามออร์บิทัลได้ไฮบริดออร์บิทัลเป็นรูปทรงแปดหน้า (octahedron)

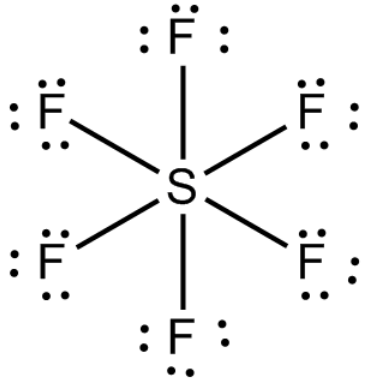




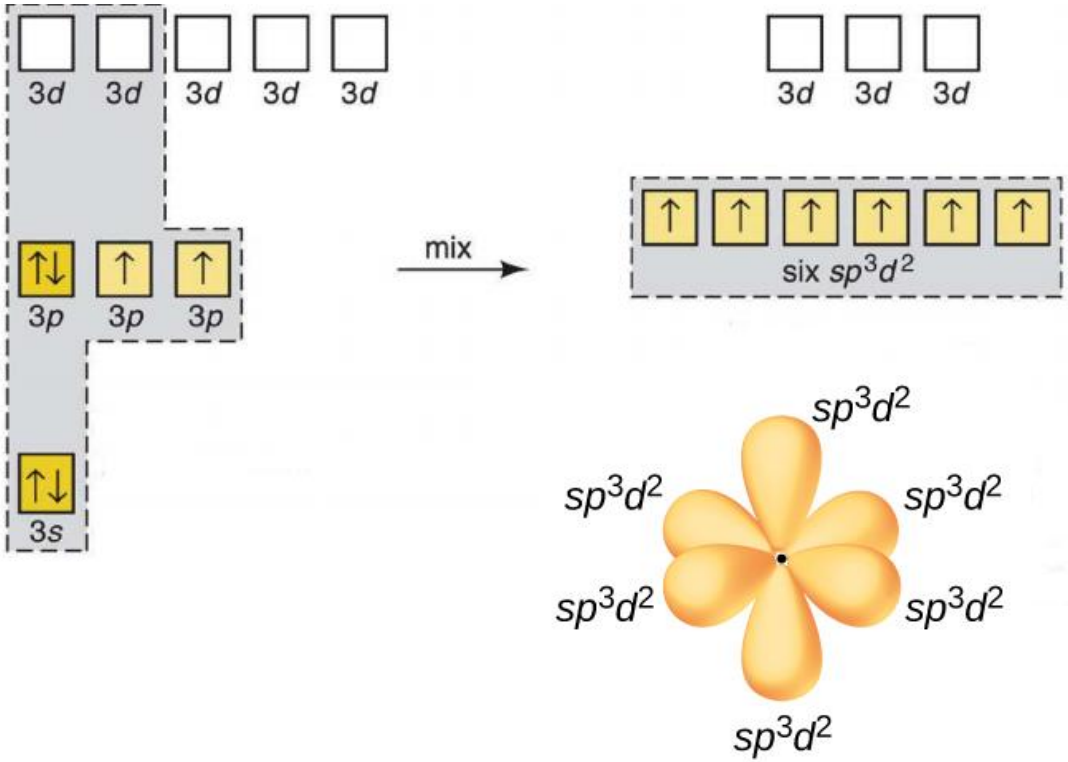


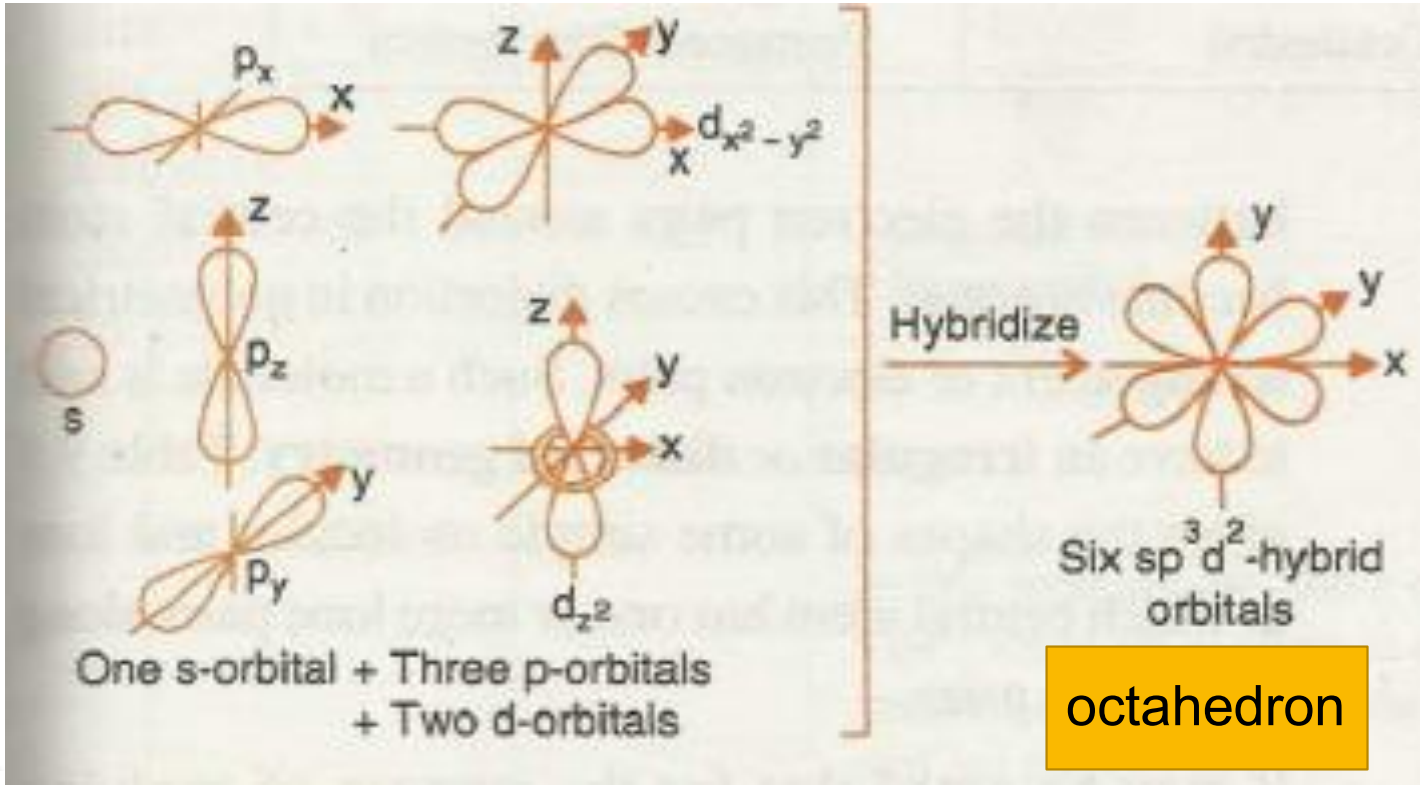
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

SF_6



S $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^4$

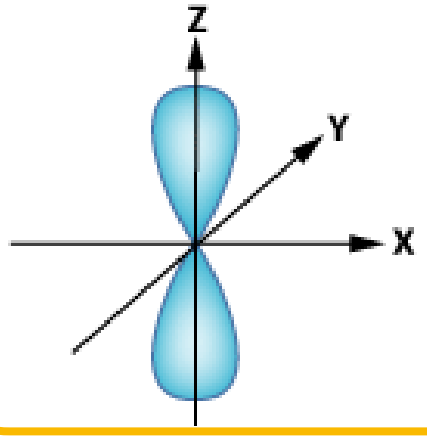




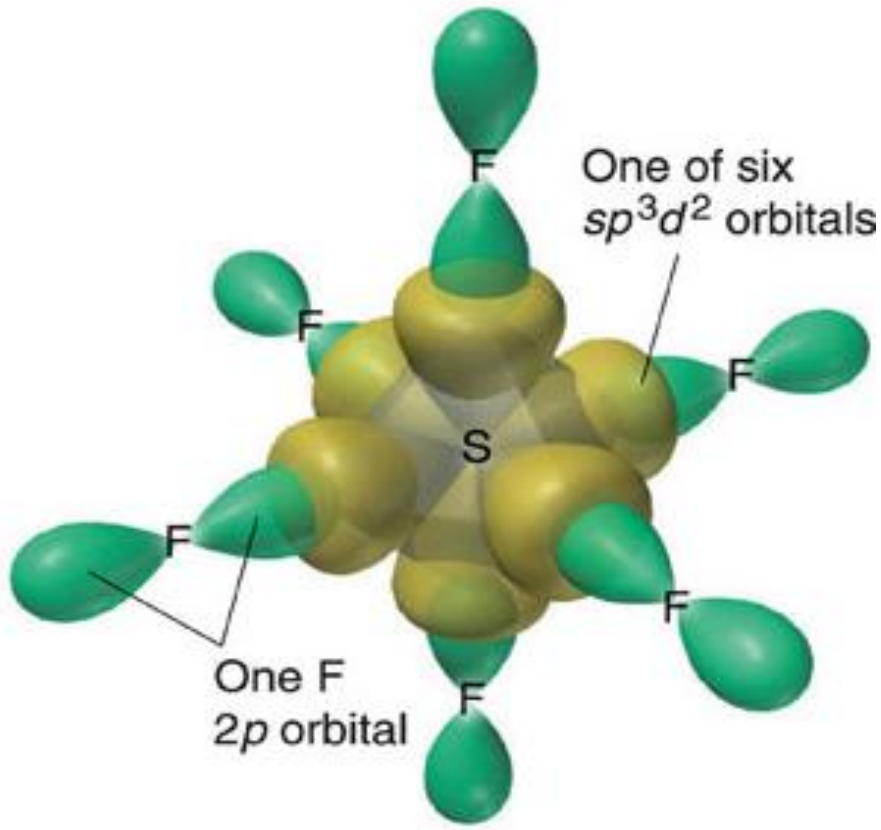
octahedron

Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

F $1s^2$ $2s^2$ $2p^5$



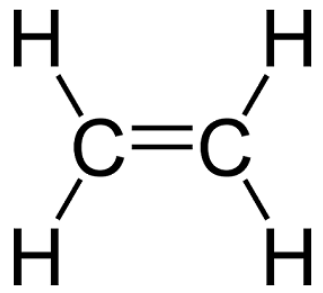
SF_6

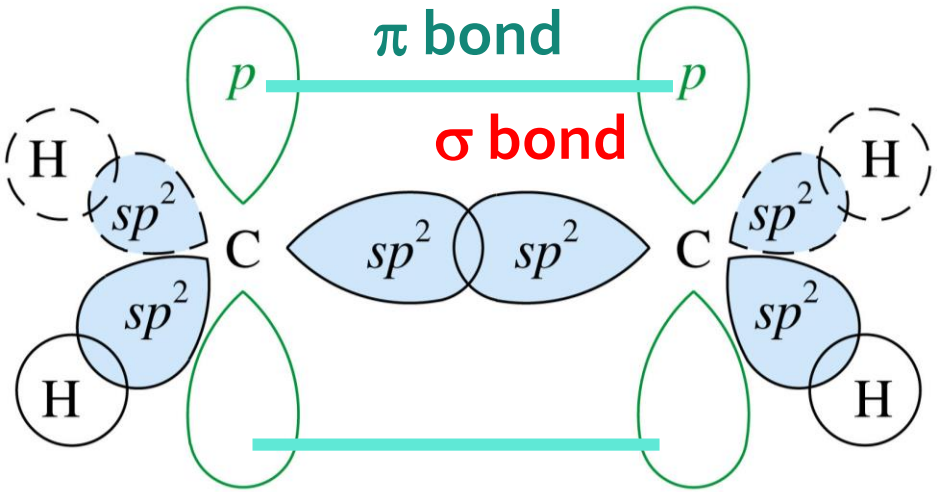


Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

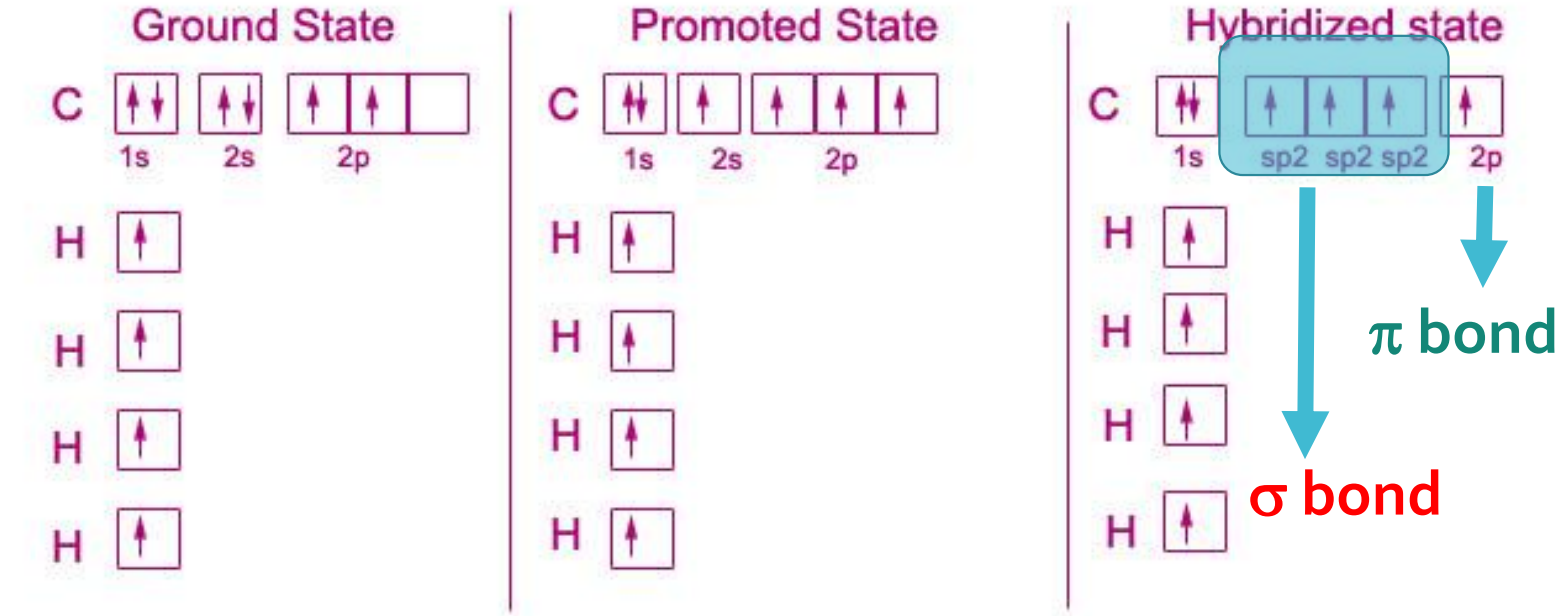
Multiple bonding

C_2H_4 ethylene





C $1s^2$ $2s^2$ $2p^2$



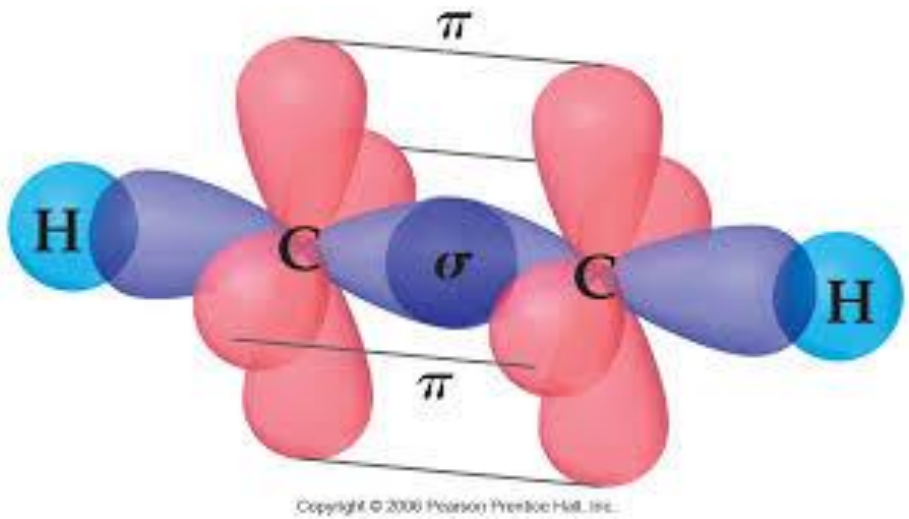
Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

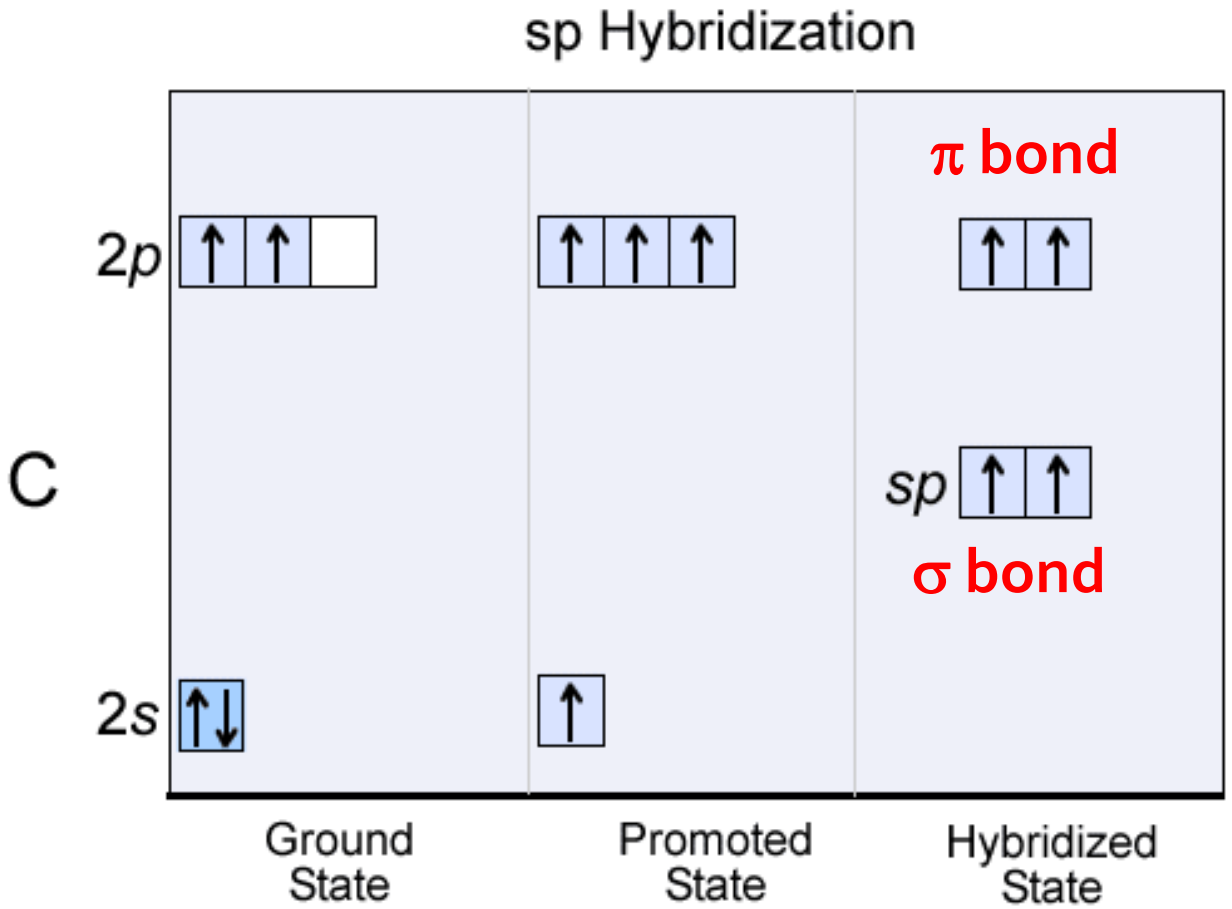
Multiple bonding

C $1s^2$ $2s^2$ $2p^2$

C_2H_2 acetylene

H—C≡C—H





©NCSSM 2003

Hybridization (ไฮบริไดเซชัน)

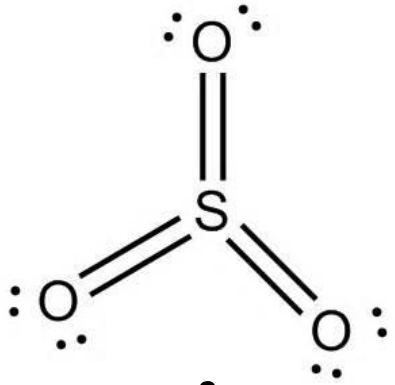
A single bond has 1 σ bond
A double bond has 1 σ bond and 1 π bond
A triple bond has 1 σ bond and 2 π bond

TABLE 7.5 Hybrid Orbitals and Their Geometry

Number of Charge Clouds	Geometry of Charge Clouds	Hybridization
2	Linear	sp
3	Trigonal planar	sp^2
4	Tetrahedral	sp^3
5	Trigonal bipyramidal	sp^3d
6	Octahedral	sp^3d^2

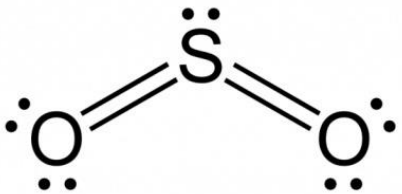
จงบอกประเภทของไฮบริไดเซชันตามอะตอมที่เป็นสีแดง

SO_3



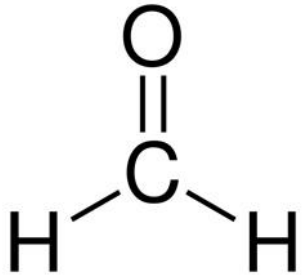
sp^2

SO_2



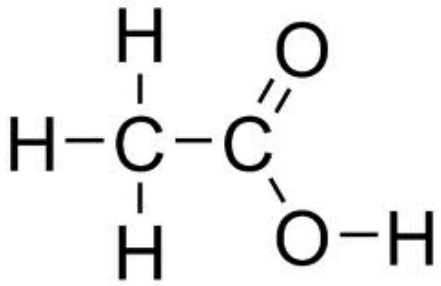
sp^2

H_2CO



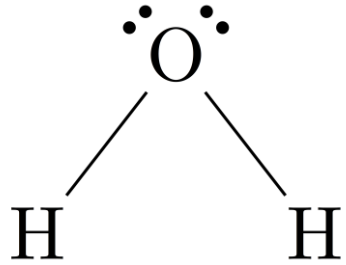
sp^2

CH_3COOH



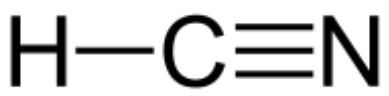
sp^2

H_2O



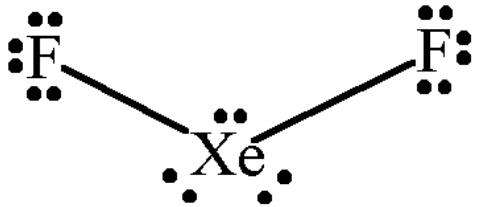
sp^3

HCN



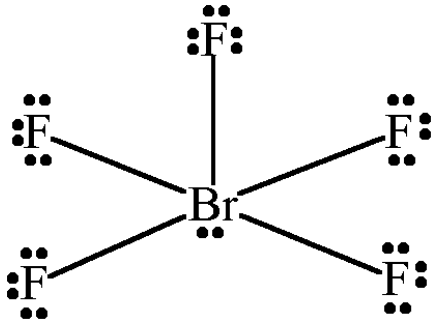
sp

XeF_2



sp^3d

BrF_5



sp^3d^2

เขียนแผนภาพออร์บิทัล และรูปร่างโมเลกุลตามหลักการไฮบริไดเซชันของ CO_3^{2-}

HOMEWORK

จงเขียนสูตรแบบลิวอิส แผนภาพออร์บิทัลและทำนายรูปร่างโมเลกุลที่เกิดขึ้นจากการไฮบริไดเซชันพร้อมทั้งระบุว่าเป็นไฮบริไดเซชัลแบบไหน และระบุ σ bond และ π bond

1. CF_4
2. XeF_4
3. NO_3^-
4. HCN
5. PF_3