

分子空间结构与物质性质 · 一 · 「价层电子对互斥模型(VSEPR)」

- 价层电子对互斥模型 (Valence Shell Electron Pair Repulsion) 可以用来预测分子的立体模型
- 理论认为，分子的空间构型是中心原子周围的“价层电子对”相互排斥的结果。价层电子对是指分子中的中心原子与结合原子间的 σ 键电子对和中心原子上的孤电子对，由于相互排斥作用，尽可能趋向彼此远离，排斥力最小
- 多重键只计其中的 σ 键电子对，不计 π 键电子对

判断分子中中心原子上的价层电子对数

价层电子对数 = 孤电子对数 + 成键电子对数

$$\text{价层电子对数} = \frac{1}{2}(a + xb)$$

a 是中心原子的价电子数（阳离子要减去电荷数、阴离子要加上电荷数）； b 是每个配位原子提供的价电子数， $O = 0$ ；碱金属(*eg. H*) = 1； x 是与中心原子结合的原子数

分子或离子	中心原子	a	x	b	价层电子对数	孤电子对数	说明	VSEPR 模型
SO_2	S	6	2	0	$\frac{1}{2}(6 + 2 \times 0) = 3$	$3 - 2 = 1$	$2\sigma + 1$ 孤电子对	平面三角形
NH_4^+	N	$5 - 1 = 4$	4	1	$\frac{1}{2}(4 + 4 \times 1) = 4$	$4 - 4 = 0$	$4\sigma + 0$ 孤电子对	四面体形
CO_3^{2-}	C	$4 + 2 = 6$	3	0	$\frac{1}{2}(6 + 3 \times 0) = 3$	$3 - 3 = 0$	$3\sigma + 0$ 孤电子对	平面三角形

VSEPR 模型与分子空间结构

分子	价层电子对数	σ 键电子对数	孤电子对数	VSEPR 模型	分子立体构型
CO_2	2	2	0	直线形	直线形
BF_3	3	3	0	平面三角形	平面三角形
SO_2	3	2	1	平面三角形	V形
CH_4	4	4	0	正四面体形	正四面体形
NH_3	4	3	1	四面体	三角锥
H_2O	4	2	2	四面体	V形

电子间排斥力大小：孤电阻对—孤电阻对 > 孤电阻对—成键电子对 > 成键电子对—成键电子对