

分子空间结构与物质性质 · 一 · 「价层电子对互斥模型」

- 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

1. 判断分子中中心原子上的价层电子对数

1.1 情况一 题目给定分子式

价层电子对数 = 孤电子对数 + 成键电子对数

$$\text{孤电子对数} = \frac{1}{2}(a - xb)$$

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); x 是与中心原子结合的原子数; b 是与中心原子结合的原子最多能接受的电子数 (氢为 1; 其他原子为“8 减去该原子的价电子数”, 如氧和氧族元素中的 S、Se 等均为 2, 卤族元素均为 1; 等等)

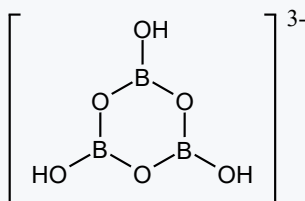
分子或离子	中心原子	a	x	b	孤电子对数	价层电子对数	说明	VSEPR 模型
SO_2	S	6	2	2	$\frac{1}{2}(6 - 2 \times 2) = 1$	$2 + 1 = 3$	$2\sigma + 1$ 孤电子对	平面三角形
NH_4^+	N	$5 - 1 = 4$	4	1	$\frac{1}{2}(4 - 4 \times 1) = 0$	$4 + 0 = 4$	$4\sigma + 0$ 孤电子对	正四面体形
CO_3^{2-}	C	$4 + 2 = 6$	3	0	$\frac{1}{2}(6 - 3 \times 2) = 1$	$3 + 0 = 3$	$3\sigma + 0$ 孤电子对	平面三角形

Table 1-1

1.2 情况二 题目给定结构式

看最外层电子数可以形成几个共价键 (包含 σ 键和 π 键), 剩余的电子数/2, 即为孤电子对数。如果是阳离子 (或阴离子), 则最外层电子数减去 (或加上) 其电荷的绝对值

1. [2020 全国卷 III] $B_3H_6^{3-}$ 的结构为:



, B 原子最外层有 3 个

电子, 有 3 个电子形成共价键, 无孤电子对, 因此 B 原子的杂化轨道类型为: sp^2

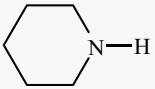
2.  中的 N 最外层有 5 个电子，由 3 个电子形成共价键，因此，还剩下 2 个电子未形成共价键，因此，N 原子含一个孤电子对，杂化轨道类型为： sp^3

Figure 1-1

2. 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

Table 2-1

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