

## 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  $\sigma$  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  $\sigma$  键电子对, 不计  $\pi$  键电子对

## 判断分子中中心原子上的价层电子对数

### 情况一 题目给定分子式

$$\text{价层电子对数} = \text{孤电子对数} + \text{成键电子对数}$$

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

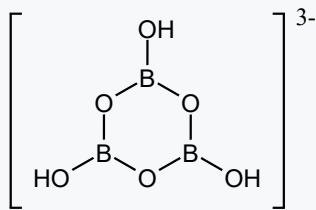
$a$  是中心原子的价电子数（阳离子要减去电荷数、阴离子要加上电荷数）； $x$  是与中心原子结合的原子数； $b$  是与中心原子结合的原  
子最多能接受的电子数（氢为 1；其他原子为“8 减去该原子的价电子数”，如氧和氧族元素中的 S、Se 等均为 2，卤族元素均为 1  
；等等）

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

## 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  $\sigma$  键和  $\pi$  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]  $\text{B}_3\text{H}_6^{3-}$  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： $sp^3$

# VSEPR 模型与分子空间结构

分子	价层电子对数	$\sigma$ 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