

分子的结构

几何结构

构型和构象

刚性

外部

电子结构

键型和键能

柔性

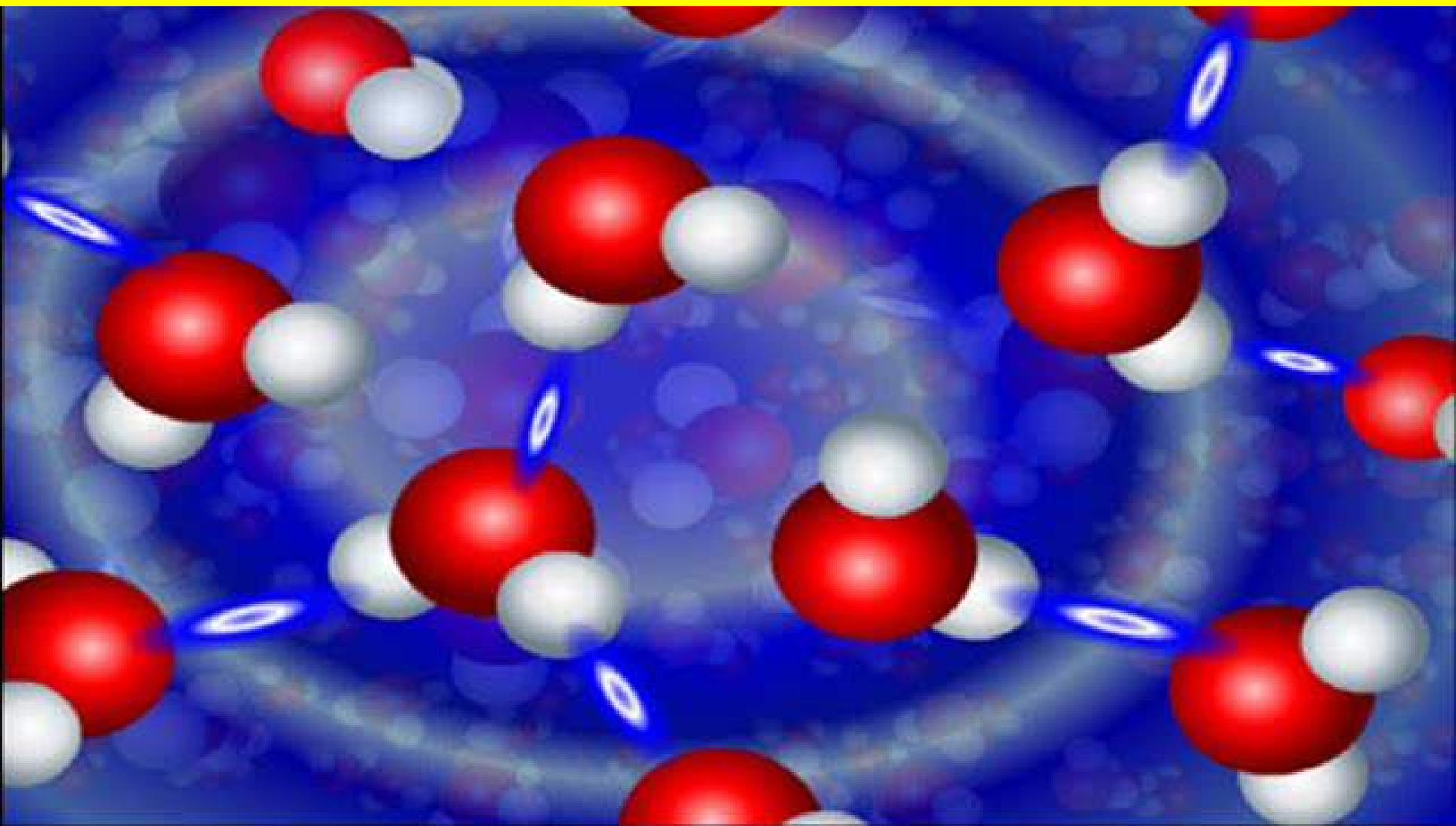
内在



分子的性质

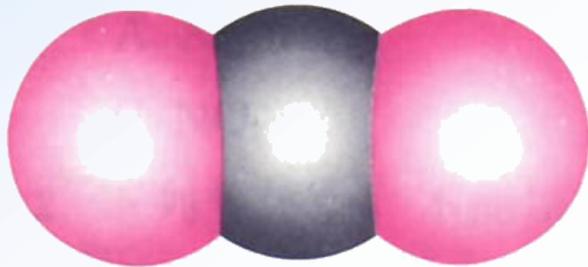


我国科学家首次拍摄到水分子内部结构





同为三原子分子，为什么 CO_2 和 H_2O 分子的空间结构不同？



CO_2

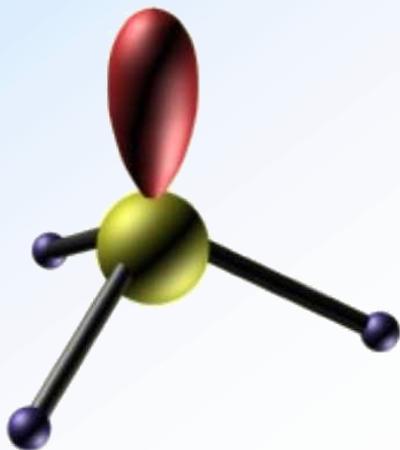


H_2O

为了探究其原因，发展了许多结构理论。有一种简单而有效的理论可以用来预测分子的立体结构，是什么理论呢？

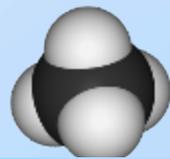
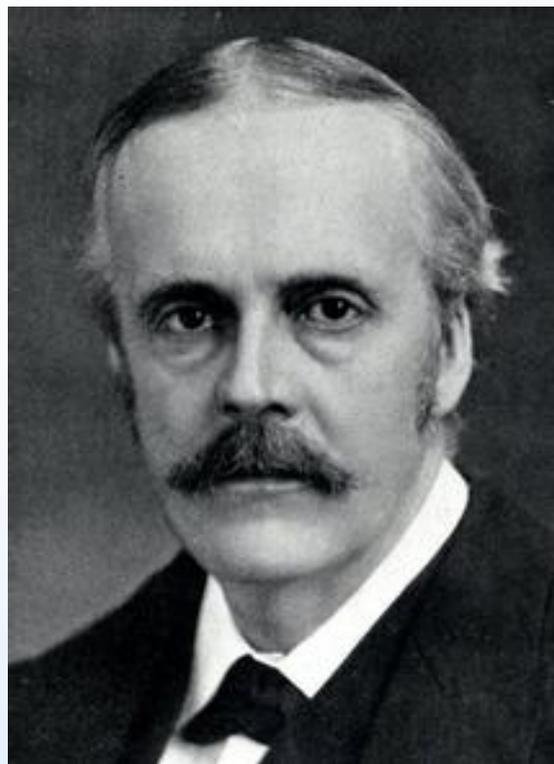


价电子对互斥理论



一、价电子对互斥 (VSEPR) 理论

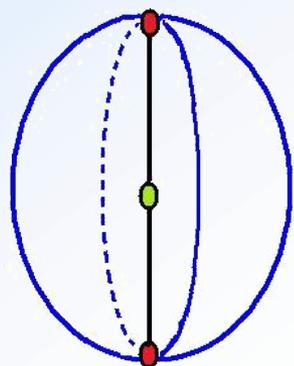
1940年希吉维克(Sidgwick)提出价电子对互斥理论，主要应用于 AX_m 型分子或离子中。原子周围各个价电子对之间相互排斥，在键长一定的条件下，相互间距离越远越稳定。所谓价电子对包括成键电子和孤对电子。



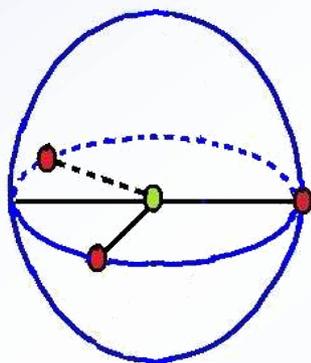
要点

当中心原子A周围存在m个配体及n个孤对电子对E时：

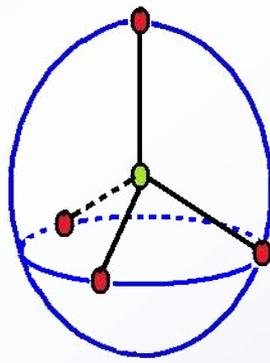
1. 为使价电子对间斥力最小，可将价电子对看作等距离地排布在同一球面上，形成规则的多面体形式。



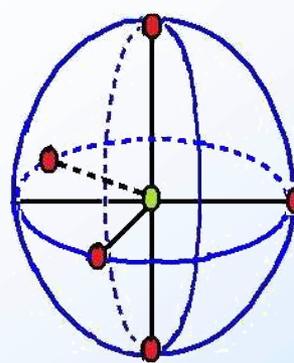
直 线



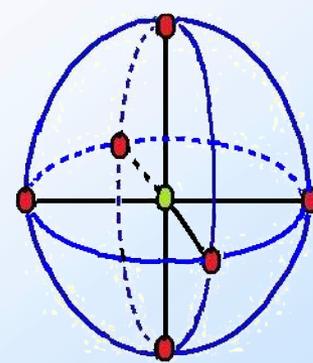
平面正三角形



正四面体



三角双锥体



正八面体

注 意

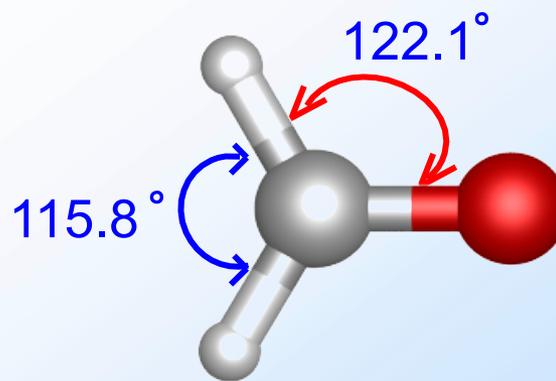
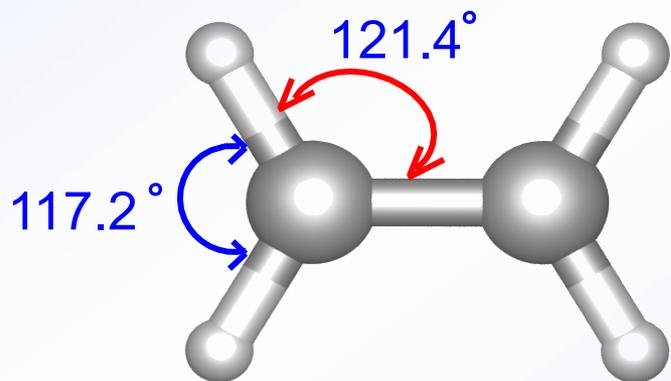
斥力包括静电库仑斥力，还有Pauli斥力。



2. 将双键、三键等多重键按照单键形式处理，多重键只影响键角大小。排斥力大小次序定性表示为：

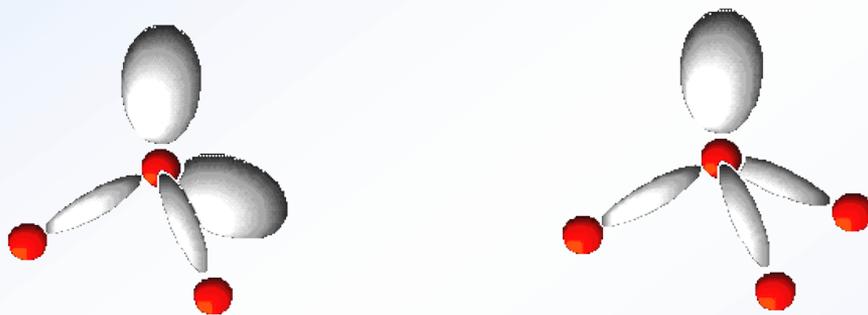
叁键-叁键 > 叁键-双键 > 双键-双键 > 双键-单键 > 单键-单键

例如， C_2H_4 和HCHO



3. 成键电子对(bp)和孤对电子对(lp)的分布情况不同。

斥力 $lp-lp \gg lp-bp > bp-bp$



另外，电子对间的斥力还与其夹角有关，键角越小，斥力越大。

键角 $30^\circ > 60^\circ > 90^\circ > 120^\circ > 180^\circ$



4. 电负性高的配体，吸引价电子能力强，价电子离中心原子较远，占据空间角度相对较小。



配位原子相同时,随中心原子电负性变小,键角减小

○



● 二、推断分子或离子空间构型的步骤

★ 1. 确定中心原子价电子对数(以 AX_m 为例)

$$VP = \frac{1}{2} [A \text{ 的价电子数} + X \text{ 提供的价电子数} \pm \text{离子电荷数} \left(\begin{array}{l} \text{负} \\ \text{正} \end{array} \right)]$$

- (1) A的价电子数=主族序数;
- (2) 配体X: H和卤素每个原子各提供一个价电子, 氧与硫不提供价电子;
- (3) 正离子应减去电荷数, 负离子应加上电荷数。

$$\text{例: } VP(\text{SO}_4^{2-}) = \frac{1}{2} (6 + 4 \times 0 + 2) = 4$$

价电子数

价电子对数



$$N = 5 + 3 = 8$$

4



$$N = 5 + 4 - 1 = 8$$

4



$$N = 8$$

4



$$N = 5$$

2.5



$$N = 10$$

5



$$N = 8$$

4

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/55523002211011310>