

## 例析路易斯结构式的书写

江苏省新海高级中学 222000 蒋 泓

路易斯结构式源于路易斯结构理论,又称为八隅体理论。该理论的基本要点如下:一个共价化合物(或共价分子)能够稳定存在,是由于电子对的共享使每个原子能够形成一种稳定的稀有气体电子构型。在书写路易斯结构式时,两原子间以短线相连,孤对电子用小黑点表示。

对于简单的分子或离子通过观察即可确定如

何书写。如:水、氨、乙酸、氮气的路易斯结构式如下:

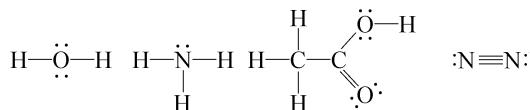


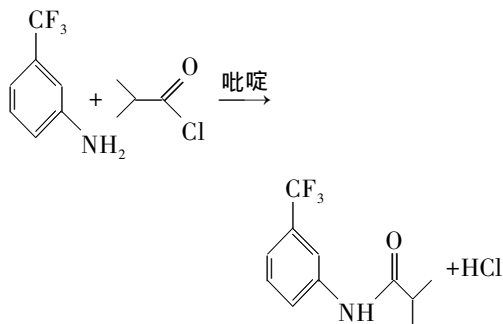
图 1

► (6) 4-甲氧基乙酰苯胺 ( $\text{H}_3\text{CO}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{NHCOCH}_3$ ) 是重要的精细化工中间体,写出由苯甲醚 ( $\text{H}_3\text{CO}-\text{C}_6\text{H}_5$ ) 制备 4-甲氧基乙酰苯胺的合成路线\_\_\_\_(其他试剂任选)。

分析 (1) 反应①发生取代反应,应取代苯环取代基上的氢原子,根据 B 的结构简式, A 为甲苯,即结构简式为:  $\text{C}_6\text{H}_5-\text{CH}_3$ , C 的化学名称为三氟甲基苯;

(2) 反应③是 C 上引入  $-\text{NO}_2$ , 且在对位, C 与浓硝酸、浓硫酸, 并且加热得到, 此反应类型为取代反应;

(3) 根据 G 的结构简式, 反应⑤发生取代反应, 即化学方程式为:



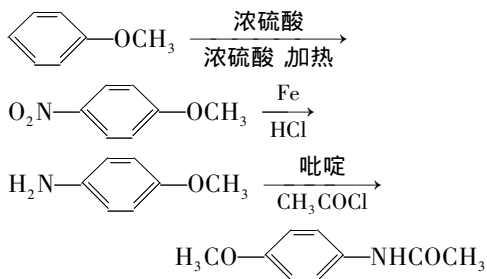
吡啶的作用是吸收反应产物的 HCl, 提高反应转化率;

(4) 根据有机物成键的特点, G 的分子式为:  $\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{O}_3\text{NF}_3$ ;

(5)  $-\text{CF}_3$  和  $-\text{NO}_2$  处于邻位, 另一个取代基

在苯环上有 3 种位置,  $-\text{CF}_3$  和  $-\text{NO}_2$  处于间位, 另一取代基在苯环上有 4 种位置,  $-\text{CF}_3$  和  $-\text{NO}_2$  属于对位, 另一个取代基在苯环上有 2 种, 因此共有 9 种结构;

(6) 根据目标产物和流程图, 苯甲醚应首先与混酸反应, 在对位上引入硝基, 然后在铁和 HCl 作用下  $-\text{NO}_2$  转化成  $-\text{NH}_2$ , 最后在吡啶作用下与  $\text{CH}_3\text{COCl}$  反应生成目标产物, 合成路线是:



高考复习的目的, 不仅要让学生建立起相应的知识体系, 更要通过复习来提高解决问题和综合运用知识的能力。基于理解的有机化合物复习, 就是让学生建立“理解”的概念, 而不是讲授彼此毫无相关联的技能, 既要明晰考查目标, 也要明晰学生理解的目标, 并根据学生的实际情况设计教学, 为帮助学生把教材中很多的离散知识内容进行归纳, 形成大概念, 在“大概念”的基础上去理解“小概念”, 理解“小概念”之间的联系和关联性, 不再仅仅是记忆层次知识和掌握固化技能, 而应直抵知识本质, 掌握学科学习的方法、培养学科思维, 让高考复习成为培养和发展学生核心素养主要途径。

(收稿日期: 2017-08-15)

在书写时,注意一定不要漏写孤对电子。

复杂的分子或离子的路易斯结构式的书写则必须通过计算、排列、判断等一系列步骤才能准确书写。下面就以  $\text{HN}_3$  为例,介绍如何分步书写路易斯结构式。

第一步:计算出分子(或离子)中的成键数和孤对电子数。

设  $n_0$  为共价键分子(或离子)为达到八隅体所需电子总数,  $n_v$  为共价键分子(或离子)的价电子总数。在构成路易斯结构时,原子提供的价电子数,是按周期表的族数给出的。 $n_s$  为所有原子之间共享的电子数。

对于  $\text{HN}_3$  分子:

$$n_0 = 2 + 3 \times 8 = 26 \quad n_v = 1 + 3 \times 5 = 16$$

成键数:

$$n_s / 2 = (n_0 - n_v) / 2 = (26 - 16) / 2 = 5$$

孤对电子对数:

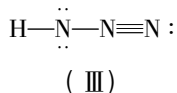
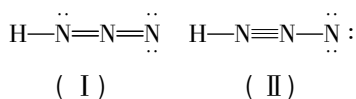
$$(n_v - n_s) / 2 = (16 - 10) / 2 = 3$$

第二步:画出分子的基本骨架,两原子间以短线相连,然后标出孤对电子。

在链状分子中,一般电负性较小的原子居中,而 H 及电负性较大的原子(如 O、Cl)则处于端基的位置。依次排好各个原子的位置后,先用单键将原子连接起来。如下式所示:



由上式可知一个  $\text{HN}_3$  分子中有 3 个  $\sigma$  键,由计算知成键数为 5,则可知有 2 个  $\pi$  键。由上计算可知有 3 对孤对电子,故可写出如下三种路易斯结构式:



第三步:标上形式电荷  $Q_F$ ,判断其稳定性。

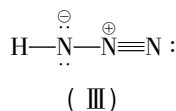
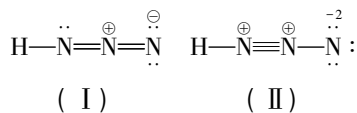
形式电荷  $Q_F = \text{原子的价电子数} - \text{成键电子数} - \text{孤电子数}$

以(II)  $\text{H}-\text{N}\equiv\text{N}-\ddot{\text{N}}:$  为代表来计算各原子的形式电荷,然后标上。

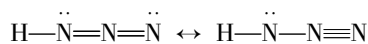
$$Q_{F(\text{H})} = 1 - 1 = 0 \quad Q_{F(\text{N}(1))} = 5 - 4 = 1 \quad Q_{F(\text{N}(2))} =$$

$$5 - 4 = 1 \quad Q_{F(\text{N}(3))} = 5 - 1 - 6 = -2$$

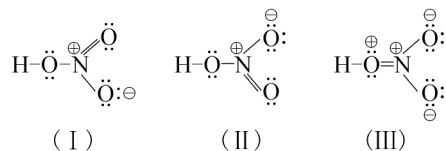
以相同方法计算并标出另外两个路易斯结构式的形式电荷。



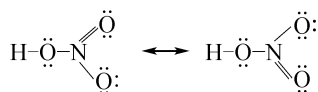
由稳定性的判断依据可知:在路易斯结构式中  $Q_F$  应尽可能小,若共价分子中所有原子的形式电荷均为零,则是最稳定的路易斯结构式。若相邻原子间的形式电荷为同号,这种结构是不稳定的。所以三个路易斯结构式中(II)是不稳定的,(I)(III)比较稳定。比较稳定的这两种结构式互称为共振式,表示如下:



再看硝酸,硝酸可能的路易斯结构式有以下三种,同样可以根据形式电荷来判断它们的稳定性。



(III)中相邻的 O 和 N 的形式电荷均为 +1,不稳定。(I)、(II)较稳定。硝酸的共振式如下:



例 1 (第 28 届中国化学奥林匹克) 2013 年,科学家通过计算预测了高压下固态氮的一种新结构:  $\text{N}_8$  分子晶体。其中,  $\text{N}_8$  分子呈首尾不分的链状结构;按照价键理论,氮原子有 4 种成键方式;除端位以外,其他氮原子采用 3 种不同类型的杂化轨道。

3-1 画出的 Lewis 结构式并标出形式电荷。

3-2 略。

解 第一步:计算出分子中的成键数和孤对

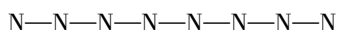
电子数。对于  $N_8$  分子  $n_0 = 8 \times 8 = 64$ ,  $n_v = 5 \times 8 = 40$ 。

$$\text{成键数} = n_s / 2 = (n_0 - n_v) / 2 = (64 - 40) / 2 = 12$$

$$\text{孤对电子对数} = (n_v - n_s) / 2 = (40 - 24) / 2 = 8$$

第二步:画出分子的基本骨架,两原子间以短线相连,然后标出孤对电子。

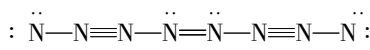
在本题中,由题目给出条件“链状结构”,可写成如下形式。



由成键数为 12,且分子内有 7 个  $\sigma$  键,可推知应有 5 个  $\pi$  键。由“ $N_8$  分子首尾不分的链状结构”可知呈对称结构。除端位以外,其它氮原子采用 3 种不同类型的杂化轨道,即  $sp$ 、 $sp^2$ 、 $sp^3$  这三种杂化方式。则分子中存在三键,双键。可以写出以下两种:



( I )



( II )

第三步:标上形式电荷  $Q_F$ ,判断其稳定性。

根据题目要求,计算( I )( II) 的形式电荷。从左往右氮原子标号为 1-8,计算形式电荷,标注。

( I ) 的具体计算过程如下:

$$Q_{F(N(1))} = 5 - 3 - 2 = 0$$

$$Q_{F(N(2))} = 5 - 4 = 1$$

$$Q_{F(N(3))} = 5 - 2 - 4 = -1$$

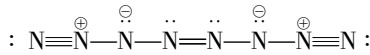
$$Q_{F(N(4))} = 5 - 3 - 2 = 0$$

$$Q_{F(N(5))} = 5 - 3 - 2 = 0$$

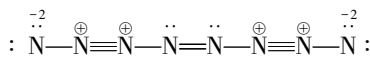
$$Q_{F(N(6))} = 5 - 2 - 4 = -1$$

$$Q_{F(N(7))} = 5 - 4 = 1$$

$$Q_{F(N(8))} = 5 - 3 - 2 = 0$$



( I )



( II )

通过分析可以看出( II) 式不稳定,舍去。

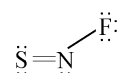
例 2 氟硫氮化合物是一类重要的化合物,

假如  $SNF$ 、 $NSF$  均存在,试写出它们的路易斯结构式。

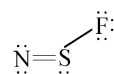
解 由计算得

$$\text{成键数} = n_s / 2 = (n_0 - n_v) / 2 = (24 - 18) / 2 = 3$$

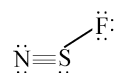
写出  $SNF$  路易斯结构式:



再写  $NSF$  路易斯结构式:

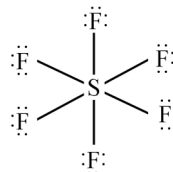


该结构虽然各个原子均满足 8 电子稳定结构,但 N 的形式电荷为 -1, S 的形式电荷为 +1,考虑到 S 为第三周期元素,可以将它周围电子修正为  $10e^-$  写成:



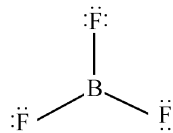
此时各原子形式电荷均为 0,该结构更稳定。

在  $POCl_3$ 、 $SF_6$ 、 $XeO_3$  等化合物中,中心原子的价电子较多,同时又有空的 d 轨道,形成共价键后,外围电子超过  $8e^-$ ,称为富电子化合物。例如:



而  $BF_3$  分子中,硼原子周围是  $6e^-$ ,未达到  $8e^-$ ,为缺电子化合物。

其稳定的结构式为



由上可知,路易斯结构八隅体存在例外情况,例如奇电子化合物  $NO_2$ ,缺电子化合物  $BeCl_2$ 、 $BF_3$ ,富电子化合物  $SF_6$ 、 $PCl_5$  等。在书写时要多加注意。

( 收稿日期: 2017-01-10 )