

## 一种利用外层原子价态书写路易斯结构式的简便方法

汪海平\*

江汉大学光电材料与技术学院, 武汉 430056

**摘要:** 本文提出了一种简便的绘制路易斯结构式方法。该方法首先构建一个符合外层原子价态的初步结构, 并将分子的电荷(如存在)放置于中心原子。接下来, 若中心原子的电子数未满足八个, 将通过转换成键电子和外层原子上的孤对电子来达到八隅体结构, 此过程将自动产生形式电荷, 无需额外计算。此方法不同于传统需先计算价电子总数的做法, 更侧重于利用化合价来构建路易斯结构式, 从而减少计算错误的可能性。

**关键词:** 路易斯结构式; 形式电荷; 共价键; 八隅体规则

**中图分类号:** G64; O6

## A Streamlined Method for Drawing Lewis Structures Using the Valence State of Outer Atoms

Haiping Wang \*

School of Optoelectronic Materials & Technology, Jiangnan University, Wuhan 430056, China.

**Abstract:** This article presents a streamlined approach to drawing Lewis structures that begins by constructing a trial structure that adheres to the valence states of the outer atoms, with any molecular charge (if present) placed on the central atom. The subsequent step adjusts bond and lone pairs to fulfill an octet configuration for the central atom if its electron count deviates from 8. This method facilitates the automatic generation of formal charges, eliminating the need for additional calculations typically required in other approaches that start with determining the total number of valence electrons. By focusing on valence configurations to construct Lewis structures, this method reduces the potential for errors associated with miscalculations.

**Key Words:** Lewis structures; Formal charge; Covalent bond; Octet rule

上世纪初, 美国物理化学家路易斯首次提出采用绘制示意图的方式来表示分子中的原子如何成键, 这种示意图就是通常所说的路易斯结构式<sup>[1]</sup>。在路易斯结构式中, 原子的价电子用小黑点表示, 两个原子之间的共价键是它们共享一对电子的结果。这种二维的路易斯结构表达式因为简单、直观, 备受化学家喜爱, 并在化学科学的发展中起着重要的作用。比如, 结合八隅体规则(即8电子结构), 路易斯结构式提供了一种判断分子结构合理性的有效手段<sup>[2]</sup>。另外结合价层电子对互斥理论, 路易斯结构式还可以预测分子的三维结构<sup>[3]</sup>。除了提供与分子的键和结构有关的基本信息外, 有机分子的路易斯结构表示法对于正确理解有机反应机理也非常重要<sup>[4]</sup>。

目前大多数教科书介绍的路易斯结构式书写方法是, 首先求出分子中所有价电子的总数, 然后将这些电子(“小黑点”)指定为成键电子对或孤电子对, 目的是让每个原子(氢除外)的最外层轨道都

形成惰性气体原子的稳定电子层结构<sup>[5,6]</sup>。尽管该方法具有不需要掌握较多化学知识的优势，但它需要相对复杂的数学计算，如果出现一个简单的数学错误就会写出不正确的路易斯结构式<sup>[7]</sup>。为此，本文提出了一种从化学角度构建路易斯结构式的方法，作为绘制路易斯结构式方法的补充，该方法的优点是不需要计算价电子总数，同时无需进行复杂的计算即可写出形式电荷。

## 1 几种常见原子的键合基序

在学习本方法之前，学生要能理解形成正常共价键时电子对原子的影响。以中性化合物 $XH_n$  ( $X = C, N, O, F$ )的键合为例，原子 $X$ 需要形成多少个正常的共价键才能获得八隅体电子结构，这里共价键的数量一般称为原子价，其数值等于18减去其相应元素周期表族数。在讨论化合物 $XH_n$ 之前，先看下简单分子 $H_2$ 的路易斯结构式。如图1所示，两个各带一个电子的氢原子通过共享电子形成共价键，使得每个氢都具有二隅体电子结构(即氦的电子结构)。在最终的路易斯结构式中，通常用一条线表示成键电子对，另外，两个不同氢原子上的电子分别用“点”和“叉”表示，以表明它们来自两个不同的原子。

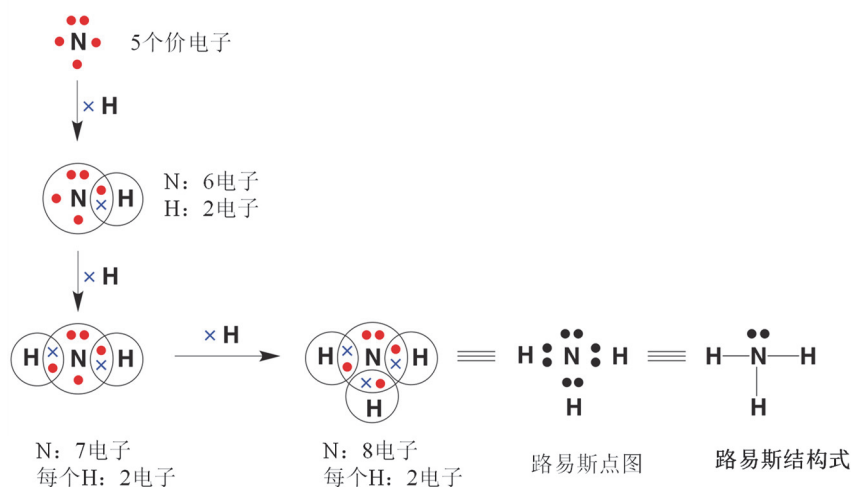
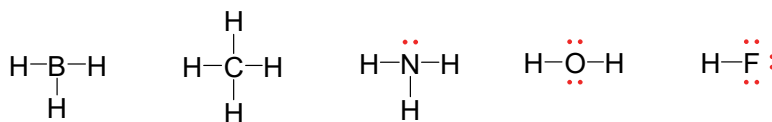


图1  $H_2$ 的路易斯结构式画法

在书写中性化合物 $XH_n$ 的路易斯结构式时，第一步要确定原子 $X$ 的价电子数，该数值对应于其元素周期表族的最后一位数字，如表1所示。第二步是确定原子 $X$ 上需要连接多少氢原子，使其满足八隅体电子结构。以 $NH_3$ 的路易斯结构式画法为例(见图2)，氮原子拥有五个价电子，其中三个价电子逐一与氢原子结合生成三个 $N-H$ 键，最终实现了氮的八隅体电子结构，使得氮显示出三价。需要注意的是，氮在达到八隅体电子结构时没有使用其所有价电子，因此有两个非成键电子，即一对孤电子保留在氮原子上。与之相似，氧原子需要结合两个氢原子来实现八隅体电子结构，而氟原子只需要结合一个氢原子。因此， $H_2O$ 和 $HF$ 中的氧和氟原子分别带有两和三对孤对电子(图3)。值得注意的是，虽然满足八隅体电子结构是有利的，但并不总是可行的。例如，硼原子只有3个价电子，只能与3个氢原子结合，因此 $BH_3$ 具有六隅体电子结构，这使得 $BH_3$ 具有较高的反应活性，在正常条件下以二聚体形式存在，即 $B_2H_6$ ，其成键特征为三中心两电子键<sup>[8]</sup>。

表1 C、N、O和F元素的族、价电子数及其常见原子价

元素	C	N	O	F
族	14	15	16	17
价电子数	4	5	6	7
常见原子价	4	3	2	1
$XH_n$ 分子式	$CH_4$	$NH_3$	$H_2O$	$HF$
$XH_n$ 中X的电子数	8	8	8	8


 图2 NH<sub>3</sub>的路易斯结构式画法

 图3 不同XH<sub>n</sub>的路易斯结构式

## 2 根据外部原子的价态书写YX<sub>n</sub>分子的路易斯结构式

除了XH<sub>n</sub>的分子外, 其他YX<sub>n</sub>型分子的路易斯结构式的绘制可以通过以下几步完成:

步骤一 在中心原子(Y)和外部原子(X)之间绘制满足外部原子价态要求的键数, 写出其初步的试验结构。例如, 当X为氧原子时需要连两个键, X为氟原子时只需要连一个键, 并将孤对电子写到外部原子(X)上, 使外部原子满足八隅体电子结构, 此时X上的成键电子对和孤电子对的数量和等于4。

步骤二 如果分子带电荷, 就把电荷写在中心原子(Y)上。

步骤三 接着确定中心原子(Y)上的电子数(EC)和非键电子数(NB), 并写出分子的最终试验结构。这里,  $EC = \text{中心原子的价电子数}(m) + \text{键的数量}(b) - \text{原子所带电荷}(Q)$ ,  $NB = \text{中心原子上的价电子数}(m) - \text{键的数量}(b) - \text{原子所带电荷}(Q)$ 。

步骤四 如果EC等于8, 即中心原子具有八隅体电子结构, 则不需要改变键的数量, 只需要在中心原子上添加孤对电子(如果有)即可, 如图3中的NH<sub>3</sub>、H<sub>2</sub>O和HF。

步骤五 如图4所示, 如果EC大于8, 则需要移动一对或多对Y-X成键电子(来自重键或单键), 使电子定域在外部X原子上, 以孤对电子形式呈现, 同时Y上产生形式正电荷, X上产生形式负电荷。相反, 如果EC小于8, 则需要利用X上的孤对电子形成额外的Y-X键, 此时Y上产生形式负电荷, X上产生形式正电荷。需要注意的是, 在少数情况下, 可能无法实现八隅体电子结构, 如BH<sub>3</sub>、CH<sub>3</sub><sup>+</sup>和带有奇数电子的分子。因此, 一个完整正确的路易斯结构式不仅要显示出成键电子和非键电子, 有时候还要写上形式电荷。

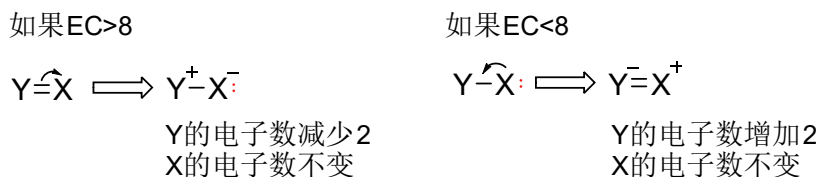


图4 形式电荷的书写: 中心原子电子数减少(左)或增加(右)

上述方法的优点是不需要复杂的计算就可以较快写出试验结构，如果该结构不是正确的路易斯结构式，可以借助简单的化学原理对该结构进行修正。通过取中心原子的价电子数，并对所连接的每个键“计数”，在必要时调整电荷，就可以简单地确定中心原子的电子数。相应地，非键电子数通过取中心原子的价电子数，每连接一个键就减一，并在需要时调整电荷就可以简单地确定。以 $\text{NF}_3$ 为例，如图5上所示，第一步写出其试验结构，即将氮原子以单键形式与三个氟原子相连，每个氟原子带有三对孤电子对。因为 $\text{NF}_3$ 分子不带电荷，直接跳到第三步，经过简单的计算可以得出，中心原子N的电子数(EC)和非键电子数(NB)分别为8和2。第四步，根据EC等于8，即中心N原子具有八隅体电子结构，最后在N原子上添加2个非成键电子，就可以写出 $\text{NF}_3$ 分子的路易斯结构式。按照相同的方法，也可以画出 $\text{CO}_2$ 分子的路易斯结构式(见图5下)。对于 $\text{NF}_3$ 、 $\text{CO}_2$ 这类分子，由于中心原子都满足八隅体电子结构，其试验结构无需修正即是正确的路易斯结构式。

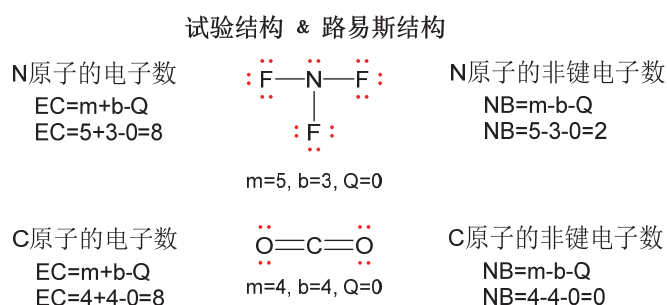


图5  $\text{NF}_3$ 和 $\text{CO}_2$ 的试验结构和路易斯结构

$\text{O}_3$ 在结构上与 $\text{CO}_2$ 相似，其试验结构如图6所示，由一个中心氧原子与外部两个氧原子以双键相连。由于中心氧原子的EC等于10，超过了八隅体电子结构，因此需要将其中一对成键电子移动到一个外层的氧原子上，使中心氧原子具有八隅体电子结构，同时中心氧原子写上形式正电荷，而其中一个外层氧原子写上形式负电荷。除了将成键电子对移动到右侧氧原子之外，也可以将成键电子对向左侧移动，从而产生图6所示 $\text{O}_3$ 的共振结构式。

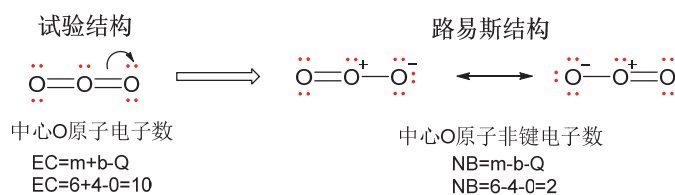
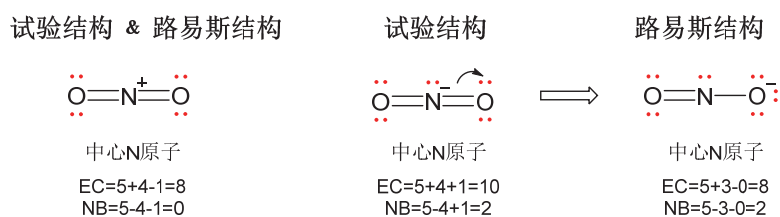
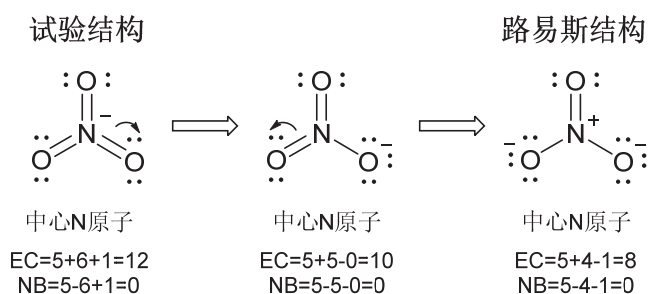


图6  $\text{O}_3$ 的试验结构和路易斯结构

对于硝基正离子( $\text{NO}_2^+$ )，其试验结构通过在氮和两个氧原子之间绘制双键来构建，同时将正电荷写在中心氮原子上，氮原子的电子数表明它具有八隅体电子结构，因此其试验结构也是路易斯结构(图7左)。亚硝酸根阴离子 $\text{NO}_2^-$ 的试验结构与 $\text{NO}_2^+$ 的试验结构相似，只是中心氮原子带负电荷，但由于试验结构中的氮原子电子数为10，需要将一对N—O成键电子转变为氧上的孤对电子，同时氧原子带一个负电荷(图7右)。

在 $\text{NO}_2^-$ 的路易斯结构式中，氮原子带有一对孤电子，这对电子可以与氧原子结合，从而产生硝酸根阴离子( $\text{NO}_3^-$ )。在图8  $\text{NO}_3^-$ 的试验结构中，氮原子通过双键与三个氧原子相连，负电荷位于氮上，氮原子上电子数为12(即 $5 + 6 + 1$ )。这要比所需的八隅体多4个电子，所以需要将两对N—O成键电子移动到外部氧原子上，使氮的电子数从12逐步减少到8，氮的形式电荷最终变为+1，两个氧原子的形式电荷为-1。


 图7  $\text{NO}_2^+$ 和 $\text{NO}_2^-$ 的试验结构和路易斯结构

 图8  $\text{NO}_3^-$ 的试验结构和路易斯结构

由以上例子可以发现,即使初始试验结构中心原子的电子数大于8,但只要知道每将一对成键电子转移到外部原子上就会使中心原子的电子数减少两个,就可以将试验结构简化为一个符合八隅体规则的路易斯结构。也就是说,如果初始试验结构中心原子的电子数为EC,则需要转移的键的数目为 $(EC-8)/2$ 。

### 3 缺电子分子的路易斯结构式

以上讨论的几个例子都是中心原子的电子数大于8的情况,然而,在少数情况下,试验结构的中心原子可能出现小于八隅体结构(即低价)的电子数。例如,对于CO分子的试验结构,将氧视为外部原子,中心碳原子仅具有六隅体电子结构(图9)。为使碳获得八隅体电子结构,氧原子可以利用其一对孤对电子与碳原子相互作用形成额外的C—O键,结果导致碳获得八隅体电子结构,并得出正确的路易斯结构式。

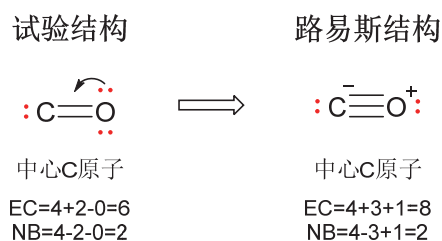


图9 CO的试验结构和路易斯结构

### 4 复杂体系的路易斯结构式

上面介绍的路易斯结构式画法主要针对的是中心原子容易识别或一些双原子分子,一旦学生掌握了这些分子的路易斯结构式画法,就可以将其应用于其他复杂的分子体系。例如,硝酸的分子式 $\text{HNO}_3$ ,准确来说是 $\text{O}_2\text{N}(\text{OH})$ ,其试验结构如图10左边所示,氮原子通过单键与OH相连,另外与两个氧原子均以双键连接。试验结构中氮原子电子数为10,因此,N=O双键中其中一对成键电子需要作为氧上的孤对电子进行重新定位,所得路易斯结构式中氮重新具有八隅体电子结构,同时氮原子带

一个形式正电荷，氧原子带一个形式负电荷。

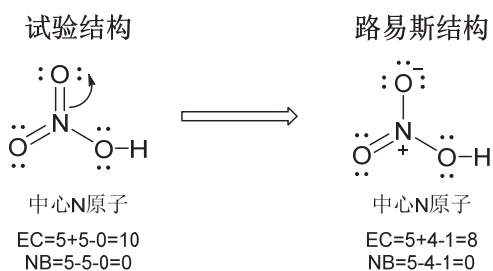


图10 HNO<sub>3</sub>的试验结构和路易斯结构

## 5 结语

综上所述，本文提出的路易斯结构式的画法包括：① 首先初步构建满足外部原子价态的试验结构，并将电荷(如果有)放置在中心原子上；② 然后相互转换成键电子和孤对电子，以满足中心原子的八隅体电子结构，这个过程自动产生形式电荷，而不需要进行复杂的计算，因此与其他专注于计算全部价电子然后重新分配的数学方法相比，更容易写出正确的路易斯结构式<sup>[9]</sup>。另外，一些文献<sup>[10]</sup>绘制路易斯结构式的方法侧重于绘制所有原子都以单键连接的试验结构，然后给原子添加孤对电子或形式电荷，这些孤对电子或形式电荷由所连接键的数量决定。但是，这些试验结构形式电荷的总和并不一定与分子的电荷相对应。相比之下，本文所述方法的试验结构的形式电荷之和等于分子的电荷，这也是本方法的优势之一。

## 参 考 文 献

- [1] Lewis, G. N. *J. Chem. Phys.* **1933**, 1, 17.
- [2] Gillespie, R. J.; Robinson, E. A.; Gilbert, N. *J. Comput. Chem.* **2007**, 28 (1), 87.
- [3] 刘宗怀, 何学侠, 陈沛, 石峰. *大学化学*, **2023**, 38 (11), 242.
- [4] Zhou, W.; Xu, Z.; Zhao, J. *J. Chem. Educ.* **2023**, 100 (9), 3694.
- [5] 李效东. *化学*. 长沙: 国防科技大学出版社, 2012.
- [6] 邢其毅, 裴伟伟, 徐瑞秋, 裴坚. *基础有机化学*. 第4版. 北京: 北京大学出版社, 2017.
- [7] 任子兴. *中学化学教学参考*, **2023**, No. 4, 43.
- [8] Parkin, G. *J. Chem. Educ.* **2019**, 96, 2467.
- [9] 杨帆, 黄小军, 李仲辉. *四川教育学院学报*, **2008**, 24 (1), 106.
- [10] Curnow, O. *J. Chem. Educ.* **2021**, 98 (4), 1454.