



II. 化学結合

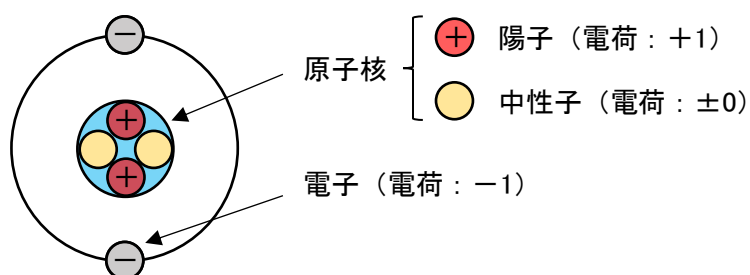


1 原子の電子配置

1) 原子の構造

全ての物質は原子からできており、原子は原子核と電子から構成される。さらに原子核は陽子と中性子から構成されており、陽子の個数を原子番号という。

原子は、陽子と電子数が等しく、電氣的に中性である。陽子と中性子の重さはほぼ等しく、質量数で表すと1となる。電子の重さは無視できるほど小さく、その質量数は0となる。



$$\begin{matrix} A \\ Z \end{matrix} W$$

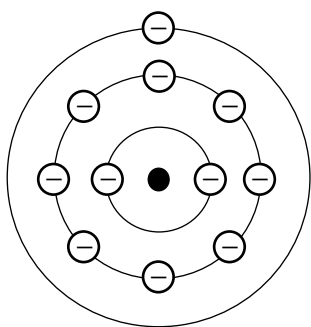
W: 元素記号

A: 質量数

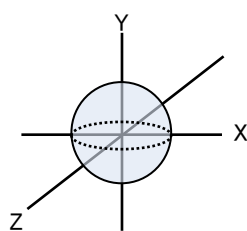
Z: 原子番号

2) 電子殻と軌道

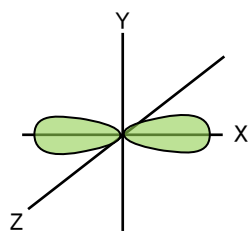
原子核の周りにおける電子が存在する層のことを電子殻といい、原子核に近い順に K 殻、L 殻、M 殻…と呼ばれている。各電子殻に入る電子の数は $2n^2$ 個 (n : 主量子数) であり、主量子数は K 殻=1、L 殻=2、M 殻=3…となる。さらに、電子殻には電子軌道 (s 軌道、p 軌道、d 軌道など) があり、1つの軌道に電子は最大2つ収容される。



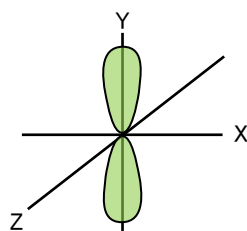
電子殻	軌道、(数)	収容電子数
K	1s (1)	2
L	2s (1)、2p (3)	8
M	3s (1)、3p (3)、3d (5)	18
N	4s (1)、4p (3)、4d (5)、4f (7)	32



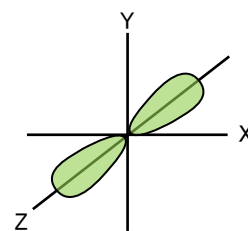
s 軌道



p_z 軌道



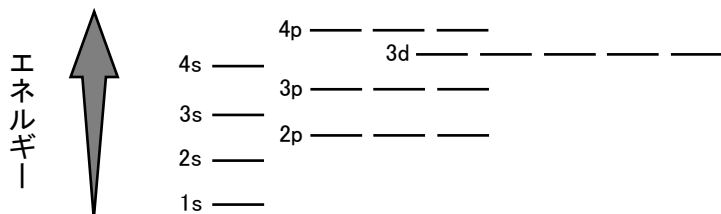
p_y 軌道



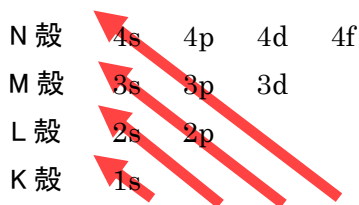
p_x 軌道

3) 電子配置

- ・構成原理：電子はエネルギー準位の低い軌道から入る。
- ・パウリの排他原理：原子軌道に収容される2個の電子は、反対向きのスピンをもつ。
- ・フントの規則：エネルギー準位が同じ軌道が複数あるとき、電子はまず同じ方向に軌道を占有する。



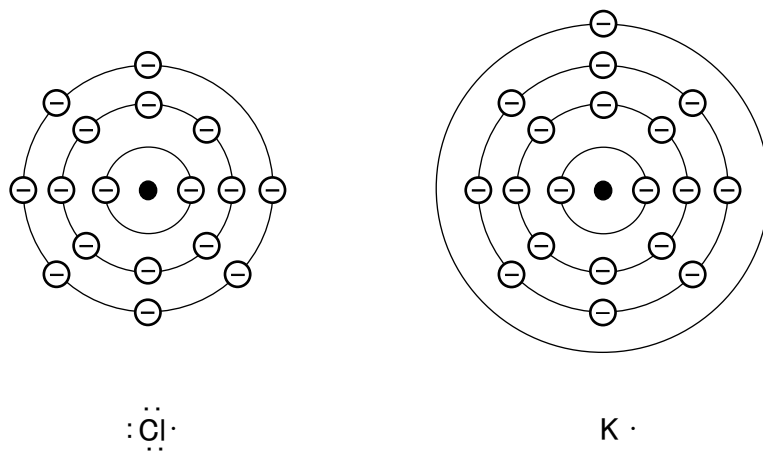
エネルギー準位の関係 ($1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p \dots$)



4) 価電子

価電子とは、化学結合などに関与する**最外殻電子**のことである。価電子を点電子で示す化学記号をルイス構造式という。

原子は最外殻電子が**希ガス(Heを除いて8個)**と同じとき安定化する。そのため、価電子が7個の塩素原子は、電子を1個取り込み、 Cl^- となりやすい。一方、価電子が1個のカリウム原子は、電子を1個放出して、 K^+ となりやすい。



5) 周期表

周期表の縦の列を族 (1~18 族)、横の列を周期という。同族の元素は価電子の数が同じである。

一般に、周期表の右上ほど、電気陰性度、イオン化エネルギー、電子親和力が大きくなる。なお、電気陰性度と電子親和力は、希ガスを除く。

※電気陰性度：共有結合のときに、共有電子対から電子を引きつける力

イオン化エネルギー：原子の最外殻から電子 1 個を取るときに必要なエネルギー

電子親和力：原子 1 個が最外殻に電子 1 個を取り入れるときに生じるエネルギー

周期\族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
以下略																		

(1) 典型元素

1、2、12~18 族は典型元素と呼ばれており、族ごとに特有の性質を示す。

1 族 (アルカリ金属) : +1 価になりやすい

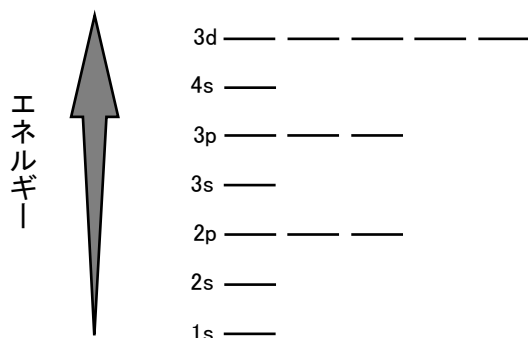
2 族 (アルカリ土類金属) : +2 価になりやすい

17 族 (ハロゲン) : -1 価になりやすい

18 族 (希ガス) : 化合物を作りにくい

(2) 遷移元素

3~11 族は遷移元素と呼ばれており、d 軌道や f 軌道に不対電子をもつことで、複数の酸化数をとることや、多様な錯体を形成することができる。

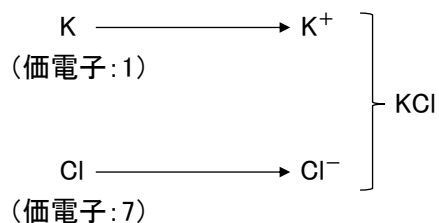


2 化学結合の様式

化学結合の様式として、原子間結合の共有結合、イオン結合、金属結合がある。

1) イオン結合

陽イオンと陰イオンが静電的引力（クーロン力）による結合をイオン結合という。イオン結合は**金属原子と非金属原子**との間で形成されることが多いが、塩化アンモニウムなどの非金属同士でもイオン結合を形成する。

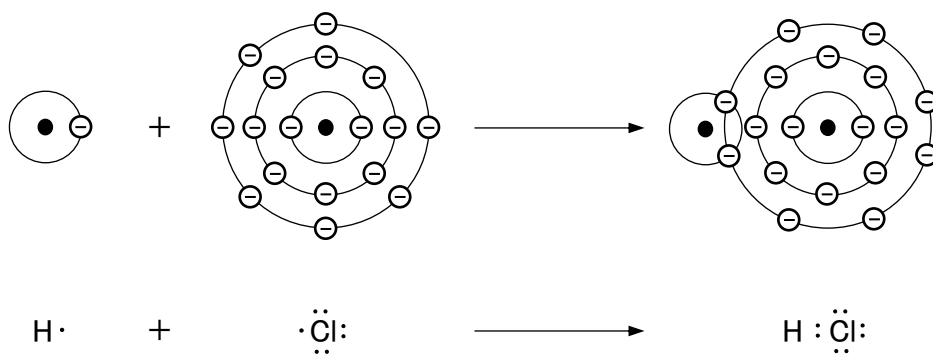


2) 金属結合

自由電子による**金属原子と金属原子**の結合を金属結合という。

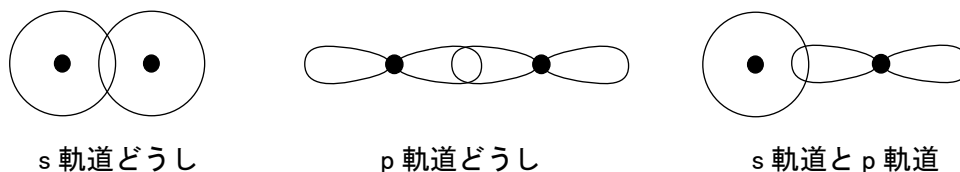
3) 共有結合

原子間で電子対を共有して形成する結合を共有結合といい、**非金属原子と非金属原子**で形成される。共有結合に関与していない電子対を**非共有電子対（ローンペア）**という。



(1) σ 結合

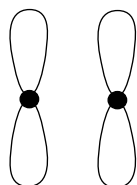
σ 結合は、原子間の1本目の結合であり、軌道と結合が平行で、結合を自由に回転することができる。 σ 結合の分子軌道は、s軌道やp軌道で形成されている。



(2) π 結合

π 結合は、2~3本目からの結合であり、2つのp軌道の側面どうしで形成されているため、結合を回転することはできない。また、 π 結合が増えるほど、原子間の結合距離は短くなる。

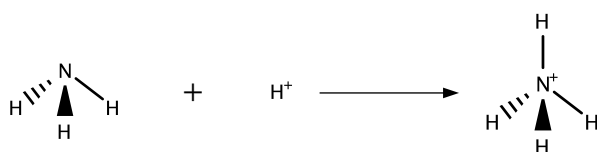
炭素-炭素間結合距離 (エタン>エチレン>アセチレン)



p軌道どうし

(3) 配位結合

配位結合は、一方の原子が非共有電子対(ローンペア)を他の原子に共有する結合である。非共有電子対をもつアンモニアがプロトンと反応してアンモニウムイオンの生成をする際に配位結合をするが、このとき、配位結合した結合を区別することはできない。

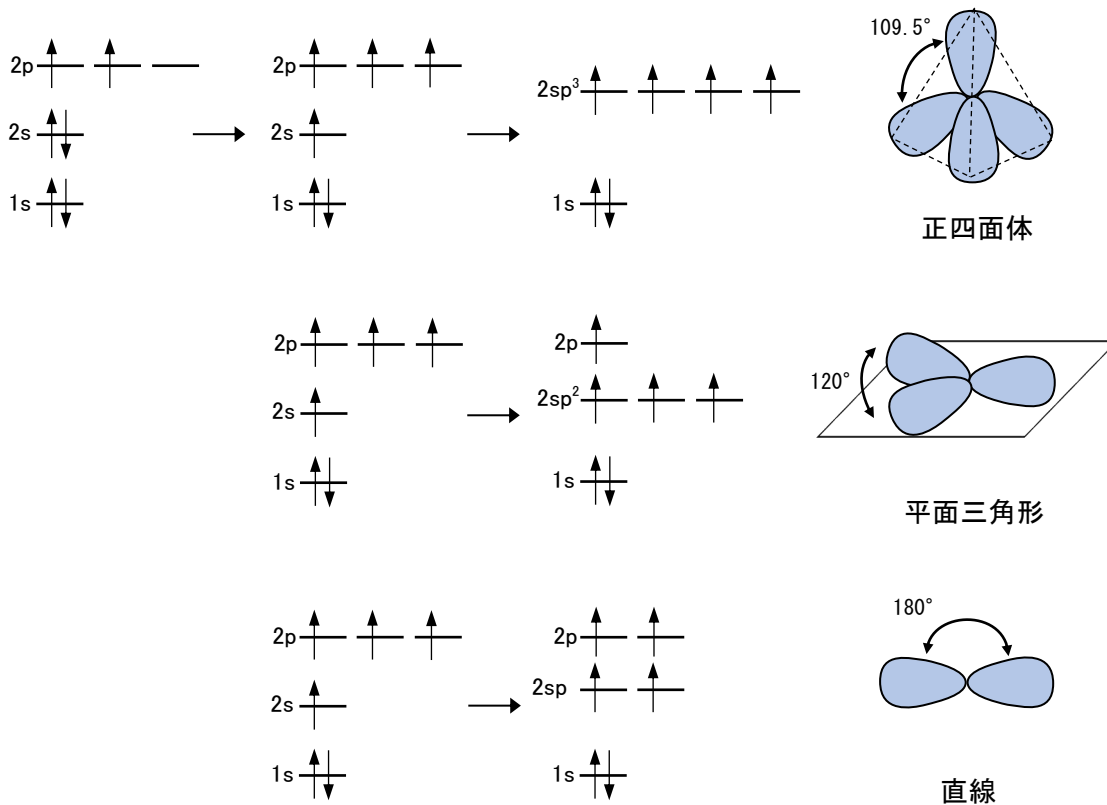


配位結合に関与する非共有電子対をもつ基を配位子といい、配位原子として窒素、リン、酸素、硫黄などがある。これらの配位子が金属と結合して錯体を形成する。

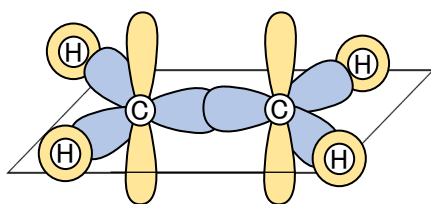
3 混成軌道

混成軌道とは、原子が化学結合をするときに新たに作られる原子軌道のことである。
以下、炭素原子の sp^3 、 sp^2 、 sp 混成軌道を表す。

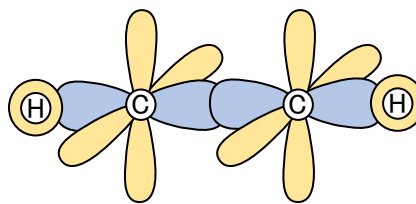
・ ${}_6\text{C}$ の場合



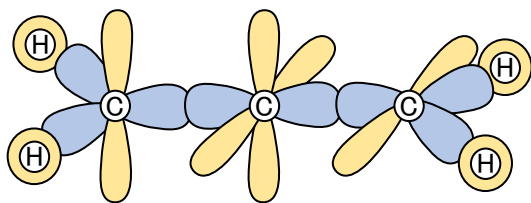
・ エチレン、アセチレン、アレンの軌道図



エチレン



アセチレン



アレン

※アレン (プロパジエン) の2つの π 結合は、互いに直交している。

【混成軌道の練習】

化合物	混成軌道	化合物	混成軌道
CH ₄ メタン		H ₂ O 水	
C ₂ H ₆ エタン		BH ₃ ボラン	
C ₂ H ₄ エチレン		C ₂ H ₃ N アセトニトリル	
C ₂ H ₂ アセチレン		C ₆ H ₆ ベンゼン※ ¹	
CO ₂ 二酸化炭素		C ₄ H ₅ N ピロール	
C ₃ H ₄ アレン		CH ₃ ⁺ メチルカチオン	
NH ₃ アンモニア※ ²		CH ₃ ⁻ メチルアニオン	

※¹ 芳香族化合物の環の構成原子は sp² 混成軌道をとる。

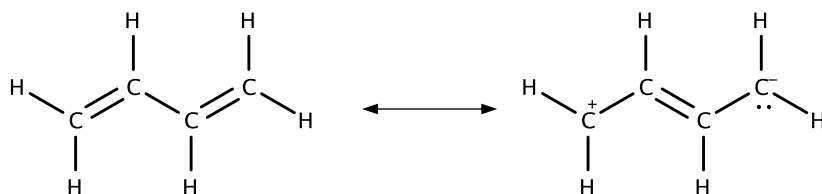
※² sp³ 混成軌道の結合角は通常 109.5°だが、アンモニアや水のように非共有電子対があると結合角は 109.5°より小さくなる。(結合角：メタン>アンモニア>水)

4 共役と共鳴の概念

1) 共役と共鳴

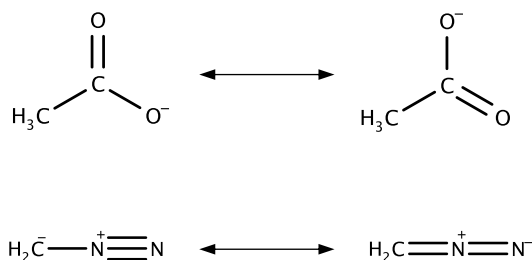
共役系とは、二重結合と単結合が交互にある構造のことである。
共役系をもつ化合物は、共鳴（ π 電子が非局在化）することで安定な状態となる。

・ buta-1, 3-diene の共鳴

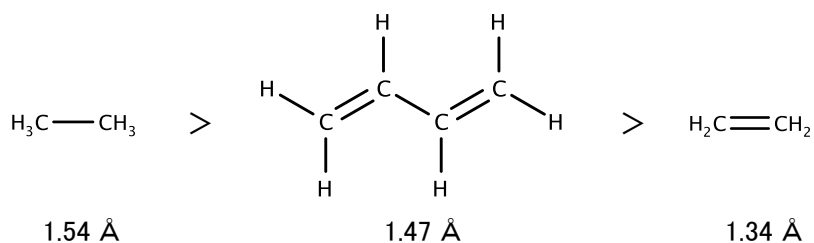


共鳴構造式は電子の位置のみ異なり、共役系が長いほど安定な物質となる。
共鳴構造式を関係づけは、両端に頭のある矢印（ \longleftrightarrow ）と決められている。

共鳴構造式の例



・ 共鳴による結合距離 (buta-1, 3-diene の C2-C3 結合の場合)



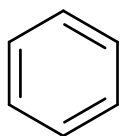
共鳴により、C2-C3 結合が通常の単結合より二重結合性を帯びているため、単結合より短く、二重結合より長くなる。

2) 芳香族性

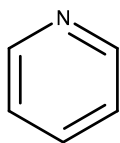
芳香族化合物は、環状共役化合物であり、共鳴により π 電子が非局在化しているため安定である。有機化合物が芳香族性を持つためには以下の条件を満たす必要がある。

- ① 環全体が平面構造（環の構成原子が全て sp^2 混成軌道）
- ② π 電子が $(4n+2)$ 個存在する（Hückel 則）。

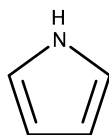
・代表的な芳香族化合物



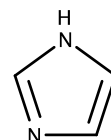
ベンゼン



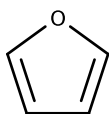
ピリジン



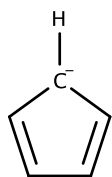
ピロール



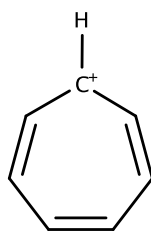
イミダゾール



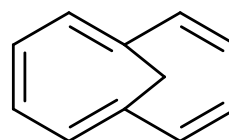
フラン



シクロペンタ
ジエニルアニオン



シクロヘプタ
トリエニルカチオン

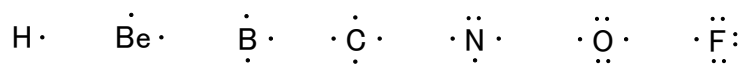


架橋[10]アヌレン

5 ルイス構造式

化学結合に関与する最外殻電子を価電子とよび、価電子を点電子で表したものをルイス構造式という。最外殻電子は希ガスと同じになると安定化する。

・原子の価電子



・代表的なルイス構造式

