3.2 分子化合物

化合物とは、二つ又はそれ以上の純粋な物質に分解出来る純粋な物質のことです(1.3 章)。蔗糖、ピーナッツ砂糖菓子の砂糖は**分子式(molecular formula)**が $C_{12}H_{22}O_{11}$ の化合物です。これを硫酸と混ぜると、化学反応が起こり、蔗糖は黒色の炭素、元素と無色の水、化合物に分解します。

1 分子の $C_{12}H_{22}O_{11} \rightarrow 12$ 原子の C + 11 分子の H_2O

蔗糖のような分子化合物の最小単位の各分子は、12 原子の炭素と 11 分子の水に変わります。この化学変化(又は化学反応)の記述には、各化合物の成り立ちをその分子式で表します。これが、分子に含まれる各原子の数を表す手短な方法です。

化合物の際だつ点は、それを構成する元素の特徴が失われることです。赤リン(Fig. 3.3)は、むかつくような臭いの、赤橙色の液体(Fig. 3.8)の元素、臭素と激しく反応して無色の液体になります。生成物の構造式は PBr_3 、分子当たり 1 原子のリンと 3 原子の臭素、4 個の原子が含まれます。同様に、Tab.3.1 の分子になると元素として水素、炭素、窒素、酸素の特質は失われます。

<u>Fig. 3.8 リンと臭素の反応。(a) メスシリンダー中の橙赤色の液体の臭素と蒸発皿の赤リン。(b) 臭素をリンに注ぐと、反応して無色の液体、3 臭化リンが生成します。</u>

TABLE 3.1 一般的な分子とその分子式

エタノールやスクロース(蔗糖)は**有機化合物(organic compound)**の例です。そのような化合物は必ず炭素と水素を含んでいます。そしてエタノールやスクロースのようにそれに加えて、酸素、窒素、硫黄、リンを1個又はそれ以上含んでいます。有機化合物は重要で、衣服の材料、食物、我々の周りの生態系の基礎となるものです。それらは経済的にも重要で、例えば、合衆国では7億ポンド以上のエタノールが毎年、合成されます。それ以外にも砂糖、デンプン、セルロースの発酵によって合成されます。アルコールは他の化学物質を溶解し、化粧品、医薬品にも用いられます。さらに殺菌剤、凍結防止剤として、そして近い将来合衆国では、車の燃料として広く利用されるかもしれません。

化合物の表現にはいくつかの方法があります。エタノールの式 C_2H_6O は分子当たり 2 つの炭素原子、6 つの水素原子、1 つの酸素原子があることを示す簡単な分子式です。

C₂H₆O エタノールの分子式 C₂H₅OH エタノールの構造式

有機化合物の分子式では、元素記号はアルファベットの順序に表され、下付の各数字は分子中の同じ原子の数を示します。右の式は原子がどのグループにあるかを示す方法です。そのような式を**構造式(structural formula)**と呼び、分子中の原子のつながり方と原子の化学的に重要な基(官能基)を強調します。ここで重要な官能基は C 原子についた OH で、全てのアルコールに含まれます。これは役に立つ情報で、**官能基(functional group)**は分子が他の原子又は分子と反応するときの攻撃を受ける場所です。有機化合物の化学の特徴は、官能基が決めます。例えば、アルコールの化学は C 原子に結合した OH 基で決まります。よって、エタノール (CH_3CH_2OH) はプロパノール $(CH_3CH_2CH_2OH)$ と反応でほんの少し違うだけです。

分子中の原子の繋がり方を、もっと詳しく表した分子式をみることがあります。構造式の原子数を数えると分子式を決めることが出来ます。

構造式

これらの構造式に書かれた線は化学結合(chemical bond)を表し、分子中で原子を繋ぐ力です。

例題 3.1 分子式

練習問題 3.2 分子式

分子模型

前節では化学で用いる記号とそれらが表す超顕微鏡的な世界の関係を示しました。Tab. 3.1 と Fig. 3.5 で

は原子間の接続と空間での原子の位置まで示す模型で、分子が表されています。三種の模型があり: (a) "球-棒模型"、(b) "space-filling モデル"、(c) 遠近画法モデルです。天然ガスの主成分のメタンを三つの分子模型で示します。球-棒模型では、球が原子を示し、短い棒が原子間の連結、化学結合を表します。メタンの模型では暗い球が C 原子を明るい球が H 原子です。

スペース充填モデルはより現実的で、原子の空間での配向だけでなく、相対的な大きさも示します。原子が空間を占める様子は良く分りますが、原子間の化学結合は見えず、時には一つの原子が他の一つを視界から隠すこともあります。

(a)や(b)のモデルをいつも利用するわけでもないので、よく遠近画法で紙面に分子構造を示します。楔型の 実線を、結合が紙面から浮き出る結合、点線を紙面から裏に向かって伸びる結合に用います。実線は紙面上 にある結合を表します。

コンピューターを使うと、正確なモデルを画面上に簡単に作成できます。コンピューターによるエタノー ルの球-棒模型を示します。この教科書には、そのようなモデルが沢山示されています。

分子模型を紹介したわけは、分子の構造がその機能に密接に関係し、模型がそのためにまず化学者にとって役に立つからです(現代化学 p107: Buckyballs. エイズ、現代化学の囲み記事で概説したように)。本書では分子モデルで分子をよく表します。9章の始めに分子構造を予測するための方法を詳しく解説します。

例 3.2 分子式を書く 練習問題 3.3 分子式