

3.7 化合物式を書く

簡単なイオン性化合物の式の予測は出来ます、しかし何千もの化合物は非常に複雑です。ある化合物の試料を受け取って、その式をどう決めるか？答えは化学分析にあります。他の色々なものの中でも分子式や構造の決定を取り扱う化学の主要な部門です。

百分組成

定比例の法則によると、純粋化合物は常に質量が同じ比率で結合した同じ元素から出来ています。このように分子組成を表すのに少なくとも二つの方法があります：(a) 分子当たりの各タイプの原子の数によって、又は(b) 化合物のモル当たりの各元素の質量によってです。実際には少なくとももう一つ分子組成を表す方法があり、それは(b)由来のものです。組成は化合物の全質量に対して相対的な化合物の各元素の質量によって与えられ、すなわち、各元素の質量パーセントによって、または質量の**百分組成(percent composition)**によって与えられます。アンモニアでは

$$\text{NH}_3 \text{ の N の質量\%} = 14.01 \text{ g N} / 17.030 \text{ g NH}_3 \times 100\% = 82.27 \%$$

$$\text{NH}_3 \text{ の H の質量\%} = 3.024 \text{ g H} / 17.030 \text{ g NH}_3 \times 100\% = 17.76 \%$$

練習問題 3.11 百分組成

実験式および分子式

ここで今までとは逆の手続きを考えてみましょう：相対質量や百分組成データを使って分子式を求めます。試料中の元素の中味が分かっており、ある質量の化合物に含まれる元素の質量(百分組成)が、化学分析により決定されているとします。そうすると 1 モルの化合物の各元素の相対モル数が計算でき、それから化合物の各元素の相対原子数が分かります。例えば A と B の原子から成る化合物について、百分組成から式への段階は

$$\begin{aligned} \%A &\rightarrow x \text{ mol A} \\ \%B &\rightarrow y \text{ mol B} \end{aligned} \rightarrow (x \text{ mol A}) / (y \text{ mol B}) \rightarrow \text{A}_x\text{B}_y$$

ヒドラジンを考えます、アンモニアの非常に近い親類で、温水加温システムに溶解している酸素を除いたり、汚染された水より金属イオンを取り除くために用いられます。ヒドラジン試料の質量パーセントは 87.42% N そして 12.58% H です。100 g のヒドラジンを秤り取ります、百分組成から試料は 87.42 g の N と 12.58 g の H を含みます。試料 100 g 中の各元素のモル数は従って

$$87.42 \text{ g の N} \times (1 \text{ mol N} / 14.007 \text{ g N}) = 6.241 \text{ mol の N}$$

$$12.58 \text{ g の H} \times (1 \text{ mol H} / 1.0079 \text{ g H}) = 12.48 \text{ mol の H}$$

ここで、100 g の試料中の元素のモル数を用いて、1 つの元素のモル数を他方に対する相対値として求めます。ヒドラジンでは、この比は N の 1 に対し H は 2 モルとなり、H 原子の 2 モルが N 原子 1 モル毎に存在することを示します。このように、1 分子中に N の 1 原子に対して H は 2 原子です、すなわち最も簡単な原子の比は式 NH_2 で表されます。

百分組成データから化合物の原子数の比が計算出来ます。しかし、分子式は 2 種類の情報を伝えねばなりません：(a) 1 分子中の各元素の原子の相対数(原子比)および(b) 分子中の原子の総数です。ヒドラジンでは H 原子は N 原子の 2 倍です。これは分子式が NH_2 の可能性を示します。しかし百分組成データは分子中の原子の最も簡単な比を与えるに過ぎません、よって N_2H_4 , N_3H_6 , N_4H_8 等々もこの百分組成に当てはまります。原子比が最も簡単で可能な式、 NH_2 のような式を**実験式(empirical formula)**と呼びます。これに対して、分子式は分子中の各種の原子の真の数を示します；実験式の整数倍になります。

分子式を決めるには、実験でモル質量を求めなければなりません。例えば、実験ではヒドラジンのモル質量はモル当たり 32.0 g です、すなわち式質量がモル当たり 16.0 g の NH_2 の 2 倍です。これはヒドラジンの分子式が NH_2 実験式の 2 倍で、すなわち N_2H_4 ということです。

さらに、百分成分データの役立つ例として、防虫剤(虫よけ玉)としてよく見かける化合物ナフタレンについて、実験室で次のような情報を集めたとします；炭素%= 93.71；水素%=6.29；モル質量=128 g/mol。これらのデータを使って、その化合物の実験式と分子式を計算します。百分成分データから 100 g の試料に 93.71 g の C と 6.29 g の H が含まれます。それ故、試料の各元素のモル数が判ります。

$$93.71 \text{ g の C} \times (1 \text{ mol C} / 12.011 \text{ g C}) = 7.802 \text{ mol の C}$$

$$6.29 \text{ g の H} \times (1 \text{ mol H} / 1.0079 \text{ g H}) = 6.24 \text{ mol の H}$$

これはどの試料のナフタレンも H に対する C の比は次式になります。

モル比 = $7.802 \text{ mol C} / 6.24 \text{ mol H} = 1.25 \text{ mol C} / 1.00 \text{ mol H}$

さて、次にこの小数を含む分数を H に対する C の整数比に変える必要があります。 $1+1/4 = 4/4+1/4 = 5/4 = 1.25$ ですから、H に対する C の比は次式で表され、

$$\text{モル比} = (5/4 \text{ mol C}) / (1 \text{ mol H}) = 5 \text{ mol C} / 4 \text{ mol H}$$

ナフタレンでは 4 個の H 原子に 5 個の C 原子が含まれます。このように最も簡単な、即ち実験式は C_5H_4 となります。もし C_5H_4 が分子式すると、モル質量は 64 g/mol です。しかし実験で実際のモル質量は 128 g/mol 、実験式の 2 倍の値が得られます。

よって分子式は $(\text{C}_5\text{H}_4)_2$ か C_{10}H_8 です。

例題 3.7 百分組成から式を計算する

問題を解く鍵と考え方

3.2 実験および分子式を見つける

練習問題 3.12 実験および分子式

式を決定して用いる

化合物の百分組成が実験的に決定できれば、その化合物の実験式を計算で求めることが出来ます。その時、モル質量が何らかの実験法で決定されていると、実験式を分子式に変換できます。

スズ金属と紫色のヨウ素は反応してオレンジ色のヨウ化スズを与えます。(図 3.20)

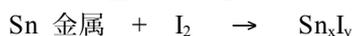


Fig. 3.20 SnI_4 を与えるスズ(Sn)とヨウ素(I_2)の反応。(a) 重さを測った金属スズ(左)と非金属のヨウ素(右)。後ろのフラスコには反応溶媒の酢酸エチル。(b) 反応物の暗い混合物をマイヤーフラスコ中で加熱します。反応混合物を冷却後、過剰のスズを濾過により取り除きます。オレンジ色の生成物 SnI_4 (前の濾紙上)が沈殿、濾過によって取り出します。

Sn_xI_y の式は次の実験によって決めることが出来ます、すなわち重さを量った Sn と I_2 の混合物を有機溶媒中で加熱します。実験を始めると、最初の混合物中の Sn の量は、存在する I_2 全てと反応するに要する量よりもずっと過剰です。従って、全てのヨウ素は反応し、オレンジ色のスズ-ヨウ素の化合物が生成し、有機溶媒に溶けます。そして、未反応の固体のスズ金属を、濾過によってその溶液から分離します(図 3.20)。 Sn_xI_y の x と y の値を見つける実験で次のようなデータを集めました。

最初の混合物の Sn の質量	1.056 g
最初の混合物の I_2 の質量	1.947 g
反応後に回収した Sn の質量	0.601 g

第 1 段階は 1.947 g の I_2 と結合した Sn の質量を求めることです。これらの質量を Sn と I のモルに変換し、最終的に実験式の Sn と I のモル比になります。

反応で消費された Sn の質量 = $1.056 \text{ g} - 0.601 \text{ g} = 0.455 \text{ g}$

$0.455 \text{ g} / 118.7 \text{ g} = 3.83 \times 10^{-3} \text{ mol}$ の Sn が Sn_xI_y に存在します。

$1.947 \text{ g} / 253.81 \text{ g} = 7.671 \times 10^{-3} \text{ mol}$ の I_2 が Sn_xI_y に存在します。

この時点で、ヨウ素が複数の I 原子としてスズと結合していることが判ります。それ故、スズと結合する I のモル数は

$$(7.671 \times 10^{-3} \text{ mol I}_2) \times (2 \text{ mol I}) / (1 \text{ mol I}_2) = 15.34 \times 10^{-3} \text{ mol I}$$

反応する Sn と I の比を求めることが出来ます。

$$(15.34 \times 10^{-3} \text{ mol I}) / (3.83 \times 10^{-3} \text{ mol Sn}) = (4.00 \text{ mol I}) / (1.00 \text{ mol Sn})$$

Sn 原子に対する I 原子の比は 4:1 です、実験式は SnI_4 となります。分子式を見つけるにはもっと実験データが必要で、ここでは分子式と実験式が同じであることが判っています。

例題3.8 二元酸化物の化学式を決める

0.586 g のカリウムは 0.480 g の O_2 ガスと反応して、化学式 K_xO_y の白色固体になります。白色固体の化学式は？

解： K_xO_y の x, y を求める問題です。まず、 K と O のモル数を求めます。 O に対する K のモル数の比から化学式が分かります。

1. K のモル数の計算

$$0.586 \text{ g K} \cdot (1 \text{ mol K} / 39.10 \text{ g K}) = 0.0150 \text{ mol K}$$

2. O のモル数の計算

$$0.480 \text{ g O}_2 \cdot (1 \text{ mol O}_2 / 32.00 \text{ g O}_2) \cdot (2 \text{ mol O} / 1 \text{ mol O}_2) = 0.0300 \text{ mol O}$$

この段階で、 1 mol の O_2 分子が 2 mol の O 原子になることを考えに入れて、 O 原子のモル数を求めます。

3. モル数の比を求めます。

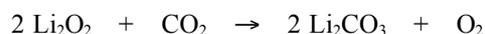
$$0.0300 \text{ mol O} / 0.0150 \text{ mol K} = O \text{ 原子} 2 \text{ モル} / K \text{ 原子} 1 \text{ モル}$$

4. 化合物の実験式は K_2O です。

この問題の化合物 K_2O をカリウムスーパーオキシド(超酸化物)と呼びます。酸素が金属と反応すると、3タイプのイオン性化合物が生成します。

化合物のタイプ	例	名前	酸素を含むアニオン
酸化物	Li_2O	酸化リチウム	O^{2-}
過酸化物	Na_2O_2	過酸化ナトリウム	O_2^{2-}
超酸化物	KO_2	カリウムスーパーオキシド	O_2^-

過酸化物やスーパーオキシドは自給式の呼吸器やスペースカプセルで用いられます、炭酸ガスを吸収して酸素を発生するからです。



問題を解く鍵と考え方

3.3 実験および分子式を見つける

練習問題 3.13 二元化合物の実験式

化合物の式が判ると、それを色々な方向に利用出来ます。原子を三次元空間に置いて、化合物の構造を決めることが1つです。これは化学の大切な部分で、構造の知識が反応性を知る原点です。この点については、このテキストの色々なところで触れます。分子式のもう一つの利用は定量的な化学においてです。例えば、図 3.8 のリンと臭素の反応生成物の式から、リンを完全に反応させるには臭素がいくら必要か判ります。又、化合物の式を知っていると、化学反応でどれだけの生成物が導けるか判ります。

例題 3.9 化学式を用いて

練習問題 3.14 式を用いて