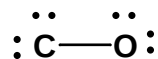


例題 9.1 ルイス構造を描く

一酸化炭素 CO; 二酸化炭素 CO₂; ホスゲン Cl₂CO のルイス構造を描きなさい。

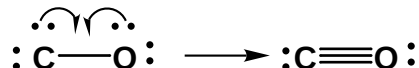
CO の解答

1. これは二原子分子です、よって中心原子はありません。
2. 原子価電子の総数は $= 4(\text{C}) + 6(\text{O}) = 10$
3. C と O に一重共有結合を作る： $\text{C}-\text{O}$
4. C と O の周りに残りの電子対を置く：



C と O は依然、完全なオクテットになるのにもう一つの電子対を必要とする。

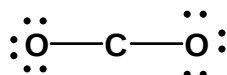
5. C と O の間に三重結合作ることでオクテットが完成。



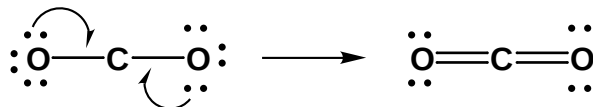
各原子は 3 個の結合対を共有し、1 個の孤立対を持つ、そして電子のオクテットを完成する。

CO₂ の解答

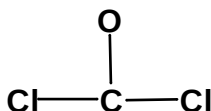
1. 中心原子は C です、電子に対する親和力の低い原子です。
2. 原子価電子の総数は $= 16 = 4(\text{C}) + 2 \times 6(\text{O})$
3. 一重共有結合を作る： $\text{O}-\text{C}-\text{O}$
4. 末端原子の周りに残りの電子対を置く：



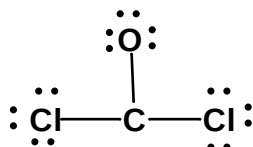
5. C は 4 個の電子対を共有していない。よって O 原子上の孤立対を用いて、炭素-酸素二重結合を作る。

Cl₂CO の解答

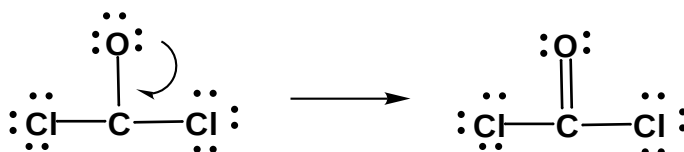
1. 中心原子は C です、電子に対する親和力の低い原子です。
2. 原子価電子の総数は $= 2 \times 7(\text{Cl}) + 4(\text{C}) + 6(\text{O}) = 24$
3. 各原子の対に一重共有結合を作る。12 個の電子対の内、3 個が使われる。



4. 残りの 9 個の電子対を末端原子の周りに置く(2 個の Cl と 1 個の O)、各原子に 3 対：



5. 中心の C は完全なオクテットになっていない、そこで O 原子からの孤立対を用いて、もう一つの炭素-酸素結合を作る。ここですべての原子が 4 個の電子対を共有する。

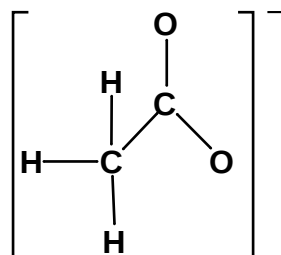
**例題 9.2 共鳴構造を描く**

アセテート(酢酸)イオンの共鳴構造を描きなさい。

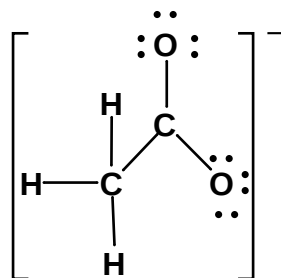
解：アセテート(酢酸)イオンは全体で 24 個の原子価電子あるいは 12 電子対を持ちます：

$$2 \times 4(\text{C}) + 3 \times 1(\text{H}) + 2 \times 6(\text{O}) + 1 (\text{負電荷}) = 24$$

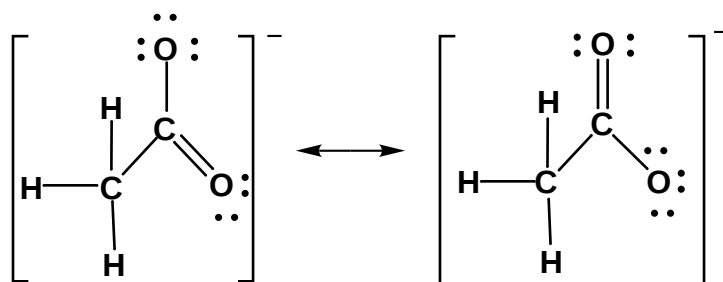
イオンは炭素-炭素結合を持ち、1 個の炭素は 2 個の O 原子に結合、他の炭素原子は 3 個の H 原子に結合しています。



6 対の電子は原子対間の単結合形成に用いられ、残りの 6 対の電子は O 原子周りの孤立対として置かれます。



左の C 原子は 4 対の電子を共有しています。他方の C 原子にも 4 対の電子を共有させるために、2 つの共鳴構造が描かれます。

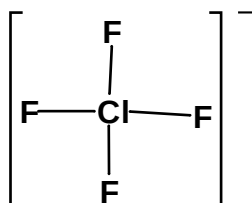


例題 9.3 中心原子周りに 8 個以上の電子を持つ分子のルイス構造

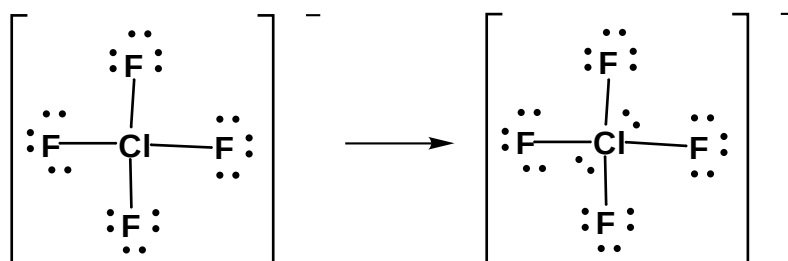
[ClF₄]⁻イオンのルイス構造を描きなさい。

解：Fig. 9.5 の従って、次のように進めます。

1. Cl 原子が中心原子です。
2. このイオンは 36 個の原子価電子を持っています：7(Cl) + 4 × 7(F) + 1 (イオン電荷) あるいは 18 電子対
3. 4 つの一重共有 Cl-F 結合を持つイオンを描きます。

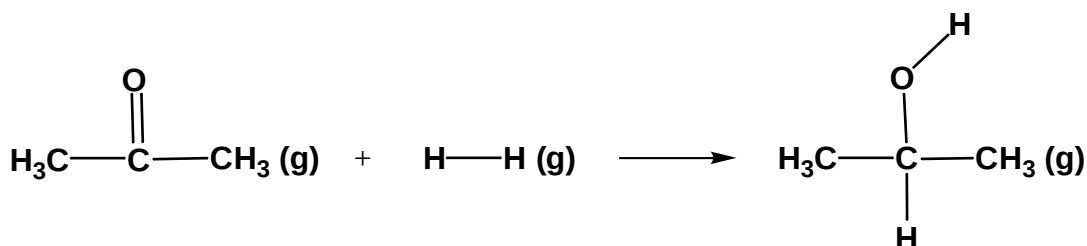


4. 末端原子に孤立対を置きます。4 個の F 原子に孤立対を置くと、2 個の電子対が残ります、そして Cl 原子は 4 対以上収容できますので、2 個の孤立対を中央の Cl 原子に置きます。



例題 9.4 結合エネルギーを使って

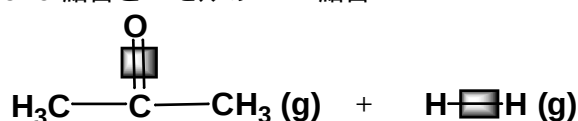
アセトン、一般的な工業用溶剤は水素添加によりイソプロパノール、消毒用アルコールに変換出来ます。



結合エネルギーを用いて反応のエンタルピー変化を予測しなさい。

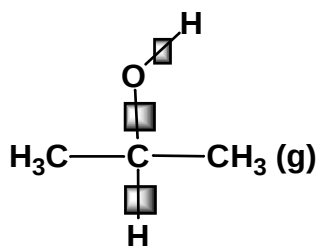
解：まず反応物と生成物を見て、切断される結合と形成される結合を調べます。この反応では 2 個の C-C 結合と 6 個の C-H 結合が変わりません。そこで、反応物で切断された結合と生成物に形成された結合にだけ注目します。

切断された結合： 1 モルの C=O 結合と 1 モルの H-H 結合



必要とされるエネルギー = 745 kJ (C=O) + 436 kJ (H-H) = 1181 kJ / mol

形成された結合： 1 モルの C-H 結合、1 モルの C-O 結合および 1 モルの O-H 結合



発生するエネルギー = 414 kJ (C-H) + 351 kJ (C-O) + 464 kJ (O-H) = 1229 kJ / mol

$\Delta H^\circ_{\text{rxn}} = \sum D(\text{切断された結合}) - \sum D(\text{形成された結合}) = 1181 \text{ kJ} - 1229 \text{ kJ} = -48 \text{ kJ}$

正味の反応は発熱的と予想されます。

例題 9.5 結合分極の評価

次の結合対について、どちらが分極しているか(極性が大きい)、そして正と負極を示しなさい。

1. Li-F と Li-I
2. C-S と P-P
3. C=O と C=S

解：

1. Li と F は周期表の反対側に位置します(フッ素は右上端、 $\chi(\text{Li}) = 1.0$, $\chi(\text{F}) = 4.0$)。同様に Li と I は表の反対側にありますが、I は右下端で($\chi(\text{I}) = 2.5$)、F よりも電気陰性度は小さくなります。従って、Li の正電荷、ハロゲン化物の負電荷に伴い、結合は強く分極する(極性を持つ)と予想されますが、Li-F 結合が Li-I よりもより分極しています。事実、LiF は CsF と同じくらいイオン性です
2. P-P 結合は同種の 2 原子間結合なので、非極性(あるいは純粋な共有結合性)です。C は第 2 周期にあり、S は第 3 周期ですが、表の右端近くにあります。結果として、C と S は同じ電気陰性度(2.5)を持ち、その結合も非極性であると予想されます。
3. O は周期表 S の真上にあります、それで O は S よりもより電気陰性です。従って、C=O は問い(2)で非極性と予測された C=S よりも分極しています。C-O 結合については、O が分極した C-O 結合でより負電荷を持つ原子です。この場合、 $\Delta\chi$ は 1.0、中位の極性の結合です。