9.3　共有結合

ルイス電子ドット構造

共有一重結合は、二つの原子が一対の電子を共有する場合に形成されます。最も簡単な例は H_2, F_2, ICl のような二原子分子です。分子中の電子の分布について、大雑把ですが、役に立つ描像は–化学者は**ルイス電子ドット構造(Lewis electron dot structure)**と呼びます–原子にルイスドット記号をもって始め、各原子が貴ガスの電子配置を取るまで原子価電子を割り当てて描かれます(Tab. 9.2)。例えば、H_2 のルイス構造は二つの水素核(H•)間で共有される二つの電子(ドット 2 個)を示します、従って各 H 原子は貴ガス、ヘリウムの配置を持ちます。二つの結合電子はしばしば、一対の電子の代わりに直線で表現されます。

ICl のルイス構造を得るには、I と Cl のルイスドット記号から始めます(共に 7A 族にあり、各 7 個の原子価電子を持っています)。各原子のドット記号は 1 個の不対電子のことであり、それらの電子は原子間で共有され、一重結合を形成します。

分子中の各原子は 4 対の電子の中で 1 個共有しており、よって*貴ガス配置をそれぞれが持つことになります。すなわち各原子は八隅電子によって囲まれています。*

二つの元素記号の間の一対のドットあるいは直線で表現される電子の共有対は結合電子です；これらは**結合対(bod pair)**と呼ばれます ICl の他の 6 対は**非結合(nonbonding)**あるいは電子の**孤立対(lone pair)**です。それらは結合に関係しません、しかしその代わり、結合電子と同じ電子殻を占めます、そして分子の構造を決める上では重要です(9.5 章)。

Tab. 9.2　周期族によるルイス構造の例

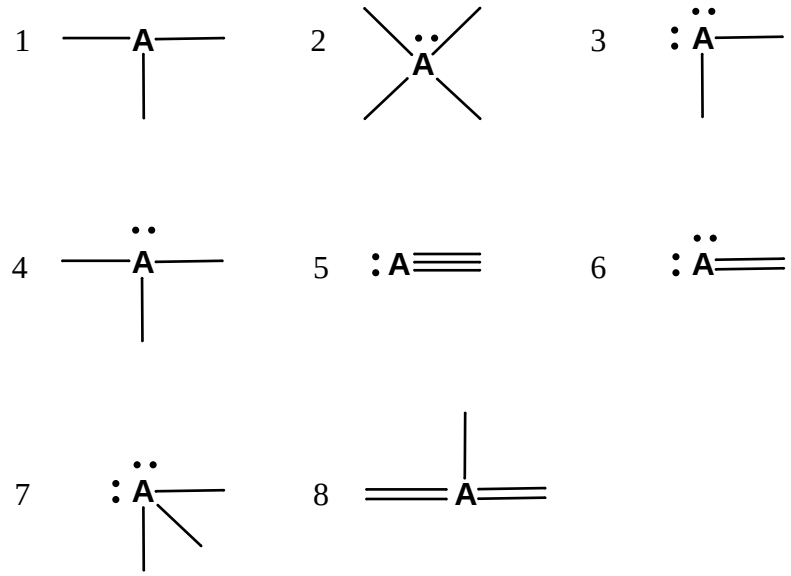
Tab. 9.2 の他の分子は原子間で 1 個以上の共有結合を持っています；すなわち、原子間には 2 あるいは 3 対の結合電子でさえ存在し得ます。

ホルムアルデヒド分子では炭素–酸素二重結合は二つの電子対から生まれます。このように、酸素原子(2 つの結合対と 2 つの孤立対)は炭素原子(4 つの結合対)と同じように 4 電子対に囲まれます。(貴ガス、ネオンは C や O が H_2CO 分子で取る配置と同じように 4 対の原子価電子を持ちます。)最後に H 原子は 2 つの電子を共有します、これは貴ガスのヘリウムと配置が同じです(Fig. 9.4)。

Fig. 9.4 ホルムアルデヒド分子、H_2CO のコンピュータで描いたモデル(色コード：C＝ 灰色、H＝ 白色、O＝ 赤色)。分子は等価表面と呼ばれる面に包まれています。(面の前面を切り取ると、分子が見えます。)電子密度はこの面ではどこでも同じです。

練習問題 9.2 **八隅則**

原子 A の孤立及び結合対についての次の組み合わせの中でどれが八隅則に一致しますか？すなわち、どの組み合わせで A が 4 対の電子に囲まれていますか？



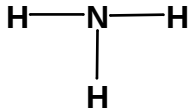
練習問題 9.3 **ルイス電子ドット構造**
Tab. 9.2 のルイス構造を使って次の問に答えなさい。
1. C_2H_4 及び SCl_2 には何個の孤立対と結合対がありますか？
2. N_2 分子には何個の結合がありますか？孤立対の数は何個？

ルイス構造を描く

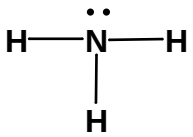
分子構造の知識は現代の化学および生物学の中心にあります。従って、分子や多原子イオンのルイス電子ドット構造の描き方を学ぶことは重要です、特に分子やイオンの構造を予測する助けになるからです。Fig. 9.5 はルイス構造を描く指針が示されています。

Fig. 9.5　分子および多原子イオンのルイス電子ドット構造を描く指針

アンモニア、NH_3 は有用な肥料で、合衆国で生産される最も重要な化成品リストの 5 番目です。H 原子が端の原子で、N 原子は分子の中心の原子です。原子価電子の総数は族数の和になります：5(N について) + (各 H について 1) = 8 電子、あるいは 4 対の原子価電子。まず利用できる 4 対の電子の内の 3 対を使って、各原子対の間で一重結合を作ります。

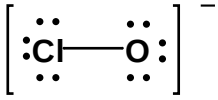


共有一重結合の形成後、1 対の電子が残っています、これが中心原子の孤立対になります。



各 H 原子は必要とされ 1 対の電子を共有の形で持ちます、そして中心の N 原子は 4 対の電子を共有します。つまり窒素の対の内の 3 個は共有する結合対で、4 番目は孤立電子対です。

次亜塩素酸イオン ClO^- は家庭用漂白剤や水泳プールの消毒剤として売られている $Ca(ClO)_2$ に見つけられます。このイオンは 14 の原子価電子を持っています：7(Cl) + 6(O) + 1(イオン上の負イオンに対して) = 14 電子あるいは 7 電子対。Cl–O 結合を形成した後、6 個の残りの電子対を端の原子の回りに分布しなければなりません。両原子共、必要とされる 4 個の電子対の共有状態を持ちます。



NO_2^+ イオンは亜硝酸イオンと呼ばれ 16 個の原子価電子を持ちます：

Fig. 9.5 の指針は N が中心原子になりやすいことを示しています、その理由は電子親和力が酸素よりも低いからです。2 個の N-O 結合を形成後、残り 6 個の電子対を端の O 原子に、それぞれが全部で 4 電子対の共有になるまで分配します。

ここで中心の N 原子は 2 個の電子対が欠損しています。よって各 O 原子の 1 個の孤立電子対を結合電子対に変えて、2 つの NO 二重結合にします。

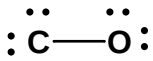
ここでイオン中の各原子は 4 個の電子対を共有することになります。窒素は 4 個の結合電子対を共有し、各酸素は 2 個の孤立電子対と 2 個の結合対を共有します。

例題 9.1 ルイス構造を描く

一酸化炭素 CO; 二酸化炭素 CO_2; ホスゲン Cl_2CO のルイス構造を描きなさい。

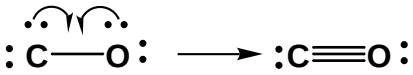
<u>CO の解答</u>

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 (C) + 6 (O) = 10
3. C と O に一重共有結合を作る：C–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。

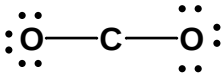
5. C と O の間に三重結合作ることでオクテットが完成。



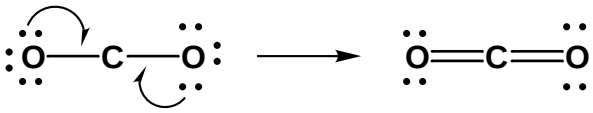
各原子は 3 個の結合対を共有し、1 個の孤立対を持つ、そして電子のオクテットを完成する。

<u>CO_2 の解答</u>

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 (C) + 2 x 6 (O)
3. 一重共有結合を作る：O–C–O
4. 末端原子の周りに残りの電子対を置く：

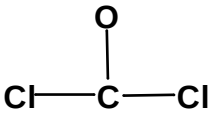


5. C は 4 個の電子対を共有していない。よって O 原子上の孤立対を用いて、炭素-酸素二重結合を作る。

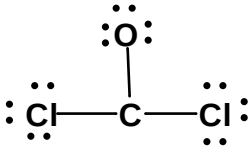


<u>Cl_2CO の解答</u>

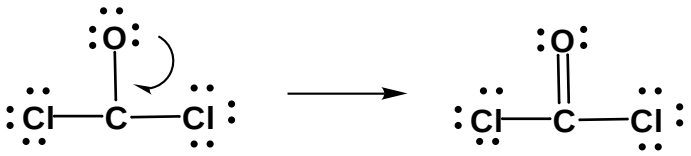
1. 中心原子は C です、電子に対する親和力の低い原子です。
2. 原子価電子の総数は = 2 x 7(Cl) + 4(C) + 6 (O) = 24
3. 各原子の対に一重共有結合を作る。12 個の電子対の内、3 個が使われる。



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 9.1 はいくつかの非常に役に立つ点を示します。まず、CO_2(例題 9.1)と NO_2^+(例題の前の記述)類似性に注目して下さい。共に 16 個の原子価電子を持っており、その分布も同じです。そのような分子は**等電子的(isoelectronic)**であると言います。等電子的な分子やイオンとして考えることが役に立つことが理解できるでしょう。例えば、CO_2 の O 原子を N^-(O と N^-は共に 6 個の原子価電子を持ちます)で置き換えると、イオン OCN^-が形成されます。さらに O を S で置換しますと、SCN^-、チオシアン酸イオンになります。これら全ては 16 個の原子価電子を持っています。

一酸化炭素 CO はシアニドイオン CN^-と等電子的です。(その部分的な結果として、それらの化学は似ており；例えば、両方非常に有毒です、それはヘモグロビンの鉄に結合して、酸素の取り込みを共に阻害するからです)。

もう一つ、H_2CO と Cl_2CO の類似性にも注目して下さい。両方、中心に C=O 基があり、他の原子に対して 2 個の共有一重結合を持ちます。これは化学で非常に重要なグループ分けです、そのような分子の例を沢山見るでしょう。そのいくつかは次のような化合物です：

練習問題 9.4 ルイス構造を描く

硫酸イオン SO_4^{2-}のルイス構造を描きなさい。上記の議論に基づいて、リン酸イオン PO_4^{3-}のルイス構造を描きなさい