共有結合(続き)

共有結合は非金属(p軌道の一部に空きがある原子)同士の結合。2つの原子核が近付くと、2つの核をまたぐ形で、新しい電子軌道(分子軌道)ができる。分子軌道も原子の電子軌道と同じく、節が多いほどエネルギーが高くなるが、球対称でなくなるため、軌道の形は原子軌道よりも複雑になる。2つの原子の電子を、分子軌道に下から順に入れていき、電子のエネルギーの総和が、結合前よりも低くなるなら、それらの原子は共有結合する。希ガス原子の場合は、分子軌道に電子を入れても安定になれないので、結合しない。

オクテット則と電子式

分子軌道の考え方は、分子の結合のしかたを正確に説明してくれるのだが、結合の結果どんな分子軌道ができるのかは、コンピュータを使って計算してみないとわからず、簡便とは言えない。

オクテット則や電子式の考え方は、分子軌道よりも古いが、定性的かつシンプルに分子の形を説明できる。

非金属元素は最外殻電子が不足しており、そこに電子をとりこんで閉殻構造(最外殻のs,p軌道がすべて電子で埋まった状態)になると、最も安定になる。共有結合とは、2つの原子が電子を共有することで、閉殻構造になること、と言い換えられる。

原子の最外殻電子を、黒い・で表した N II N のような表現を電子式と呼ぶ。イオンの場合には[:Ö:]²⁻のように表記する。電子式を使うと、分子の結合のしかたが簡単に推測できる。

分子の立体構造

電子式だけでは、原子の間のつながり方はわかっても、立体構造が予測できない。VSEPRモデル (Valence Shell Electron Pair Repulsive model 原子価殻電子対反発モデル)を使うと、立体構造が予測できる。1つの原子の周囲に存在する共有電子対や孤立電子対など、電子が集中した高電子密度領域は、互いの反発を避けるため、互いに遠くなるように配置する。

元素の周期的性質

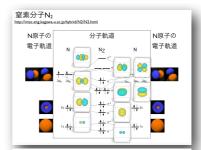
メンデレーエフは、元素を原子量順(当時は原子番号は未発見)に並べつ つ、良く似た性質の元素が一列に並ぶように、横8列の周期表を作った。 ところどころあった欠番の部分は、後に実在することが発見され、元素が

周期的性質を持つことが確信されるに至った。

現在の周期表は、原子量(中性子数と陽子数の和)ではなく原子番号(陽子数)順に元素を並べ、電子がどの軌道に入っているかを表現する。

• s軌道に2個まで電子が入るの

メンデレーエフの周期表(1871 年)								
周期 族	1	2	3	4	5	6	7	8
1	Н							
2 3	Li	Be	В	C	N	0	F	
3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	
4	K	Ca	1	Ti	V	Cr	Mn	Fe Co Ni Cu
5	(Cu)	Zn	2	3	As	Se	Br	
6	Rb	Sr	Yt?	Zr	Nb	Mo	4	Ru Rh Pd Ag
7	(Ag)	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	I u Ag
8	Cs	Ba	Di?	Ce?				
9						5		
10			Er?	La?	Ta	W	6	Os Ir Pt Au
11	(Au)	Hg	Tl	Pb	Bi			I t Au
12				Th		U		



オクテット則

H・+ H・ H:H あるいは H-H あるいは H-H
:Ö +:Ö :Ö:iÖ:あるいは:Ö=Ö:あるいは O=O
:Ñ:+:Ñ・ N:Ñ あるいは N=N あるいは N=N
孤立電子対 共有電子対 N:iNを電子式と呼ぶ

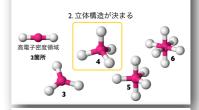
例:水H₂O

I.まず、電子式を書く。

нюн

2つの共有電子対+ 2つの孤立電子対 =4つの高電子密度領域

例: 水H₂O



例:水H₂O

3. 孤立電子対の方向を選ぶ



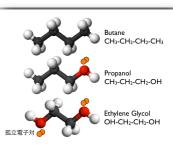
孤立電子対のほうが、互いの反発が大きいので、 孤立電子対同士が遠くなるように方向を選ぶ。

例: 水H₂O

4. 角度を微調整する 孤立電子対



孤立電子対のほうが、互いの反発が大きいので、 角度が広くなり、結合の間が狭くなる。



で、最外殻電子が2個までの元素がまず左端2列に並び、その隣6列に、p 軌道に電子が入る元素が並ぶ。

- エネルギーの低い軌道から順に電子が入っていくため、4sの次には3d軌道にも電子が入りはじめる。原子番号順に並べると、d軌道に電子が入る元素が割りこむため、周期表は18列になる。
- さらに原子番号が大きくなると、f軌道にも電子が入る(ランタノイド、 アクチノイド)。これも含めるには周期表を32列まで拡張する必要がある が、化学的な重要性が低いので、通常は欄外に書かれることが多い。
- 最後に、Heだけは、Beの上ではなく、Neの上に置かれる。閉殻構造で、物性がBeよりもNeに近い希ガスであるため。
- 電子配置を表記する時も、周期表の順に並べる。内殻電子は[希ガス]で 省略することもできる。

例: 22Ti: 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s² 3d² あるいは [Ar] 4s² 4d²

元素の性質

原子番号が1つずつ増えるだけなのに、元素の性質に周期性が生まれるのは、電子軌道(のエネルギー準位)が、不連続になっているから。 性質によっていろんな分類がなされる。

電気的中性の原理

- 1. 最外殻をきっちり電子で埋めること(希ガス型電子配置 = "閉殻構造")
- 2. 電気的に中性であること

結合を作ることで、両方の条件を満たそうとする。

- 金属は電子を手放し希ガス型電子配置(閉殻構造)になろうとする。
- 非金属は電子を獲得して希ガス型電子配置(閉殻構造)になろうとする。
- ・ 水素は両方の性質を持つ。つまり、電子を手放せば陽イオン(水素イオン、陽子)になる一方、電子を共有して閉殻構造になろうともする。

原子・イオンサイズに関する法則性

- 同じ軌道であれば、原子番号が大きくなるにつれどんどん収縮する(核電荷が大きくなるため)
- 外殻軌道ほど半径が大きい。
- 電子がs軌道に新たに入る時に、最も半径が大きくなる。

原子サイズ

- 周期表を右に進むにつれ、同じ軌道に電子が入るだけなので原子半径は 小さくなる。
- 下に行くほど、外殻軌道に電子が入るので原子半径は大きくなる。
- 希ガス→アルカリ金属で電子がs軌道に新たに入るので、原子半径が急増する。

イオンサイズ

- 金属元素では、最外殻電子を除去して陽イオン化すると、閉殻構造になり安定化する。原子番号が大きい 分、希ガスよりさらに小さくなる。
- 非金属元素では、電子を追加して閉殻構造にすると安定化する。電子が増えるので半径は大きくなる。

