

1 : 化学結合論と有機化学

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

1																	2
H HYDROGEN 1.008																	He HELIUM 4.003
Li LITHIUM 6.941	Be BERYLLIUM 9.0122	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;"> Non-metal</div> <div style="text-align: center;"> Metal</div> <div style="text-align: center;"> Noble gas</div> </div> <div style="text-align: center;"> Alkali metal</div> <div style="text-align: center;"> Metalloid</div> <div style="text-align: center;"> Lanthanide</div>															

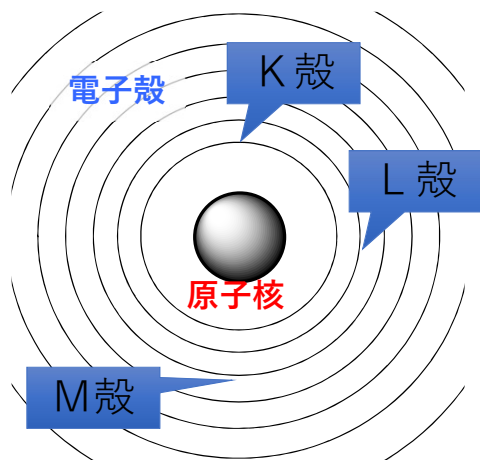
 Alkaline earth metal
 Halogen
 Actinide
 Transition metal

化学結合論と有機化学

- ボーアの原子モデルと原子軌道
 - 基底状態における電子配置
- 分子軌道
- 混成軌道

化学結合論と有機立体化学 (1)

・ 原子の構造 (ボーアの原子モデル)



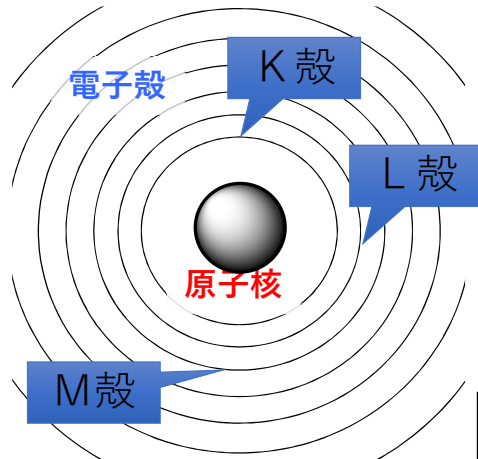
ボーアの原子モデル

殻名	K殻	L殻	M殻	N殻	
収容電子	2	8	18	32	$2n^2$
殻番号	1	2	3	4	n

${}_1\text{H}$							${}_2\text{He}$
${}_1\text{Li}$	${}_2\text{Be}$	${}_3\text{B}$	${}_4\text{C}$	${}_5\text{N}$	${}_6\text{O}$	${}_7\text{F}$	${}_8\text{Ne}$
価電子数							
1	2	3	4	5	6	7	0

● : 電子 (e^-)

ボーアの原子モデルと原子軌道



ボーアの原子モデル

n (主量子数：殻番号)

l (方位量子数：軌道の形)

$l = 0 \sim n-1$

m (磁気量子数：軌道の方向)

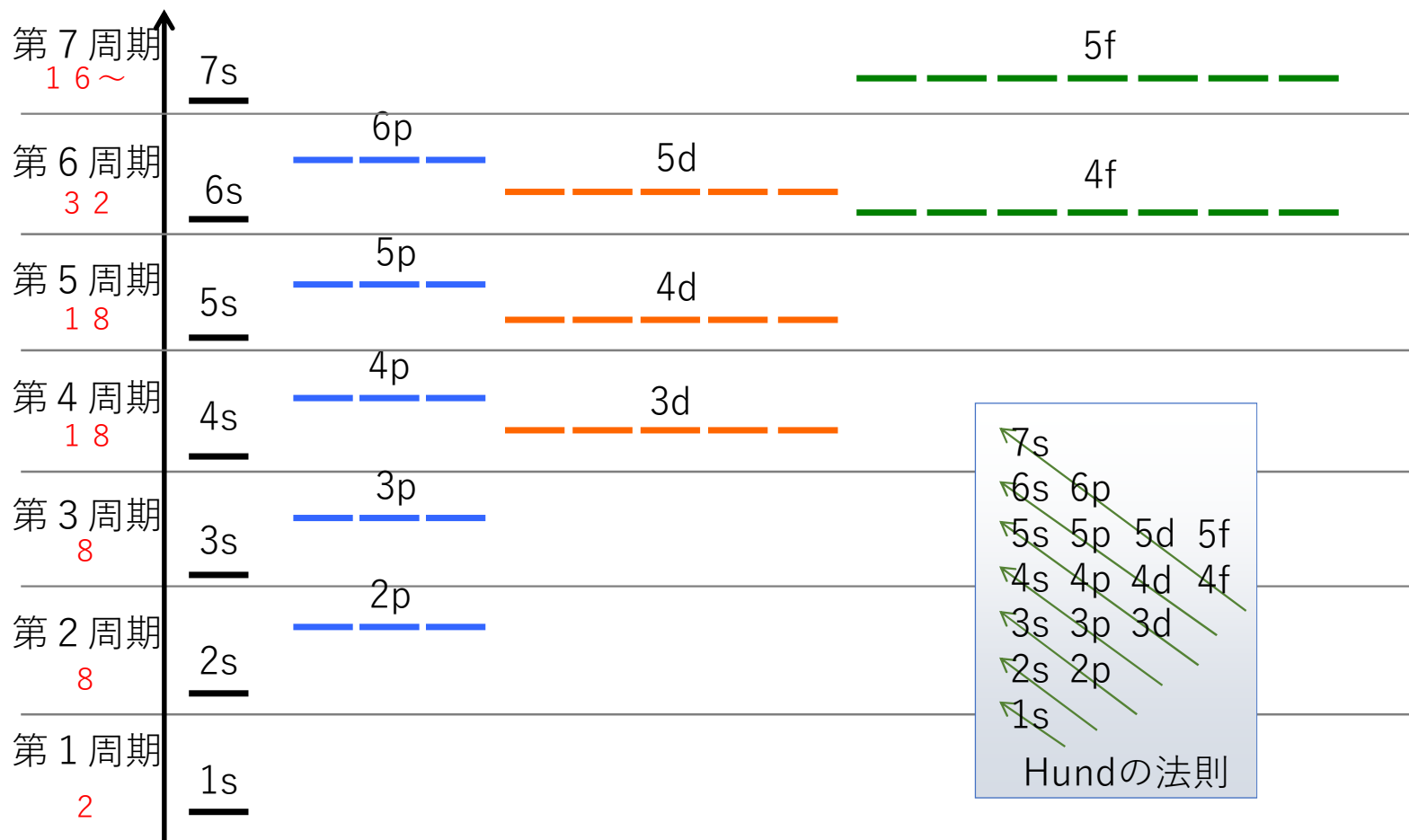
$m (2l+1)$ 個

殻番号	1	2	3	4	n
殻名	K殻	L殻	M殻	N殻	
収容電子	2	8	18	32	$2n^2$

原子軌道

殻名	n	s軌道	p軌道	d軌道	f軌道
		$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
K	1	1s -			
L	2	2s -	2p ---		
M	3	3s -	3p ---	3d -----	
N	4	4s -	4p ---	4d -----	4f (-)x7

原子の基底状態エネルギー準位



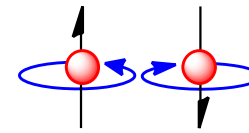
電子配置における原則

- 一つの軌道には、2つの電子が入ることができる。
- 電子は、よりエネルギー準位が低い軌道に電子は配置される。
- エネルギー準位が等しい複数の軌道が存在する場合
電子は、可能な限りスピンを並行にして異なる軌道に入る。

(Hundの法則)

- 一つの軌道には、同じ量子数の電子は入れない。

(Pauliの排他律)
原子の基底状態の電子配置



電子スピン

${}_3\text{B}$			${}_4\text{C}$			${}_5\text{N}$			${}_6\text{O}$			${}_7\text{F}$		
$1\text{S}^22\text{S}^22\text{P}^1$			$1\text{S}^22\text{S}^22\text{P}^2$			$1\text{S}^22\text{S}^22\text{P}^3$			$1\text{S}^22\text{S}^22\text{P}^4$			$1\text{S}^22\text{S}^22\text{P}^5$		
2P x	2P y	2P z	2P x	2P y	2P z	2P x	2P y	2P z	2P x	2P y	2P z	2P x	2P y	2P z
↑			↑	↑		↑	↑	↑	↑↓	↑	↑	↑↓	↑↓	↑

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

1s **H** **He**
2s2P **Li** **Be** **B** **C** **N** **O** **F** **Ne**
3s3P **Na** **Mg** **Al** **Si** **P** **S** **Cl** **Ar**
4s4P3d **K** **Ca** **Sc** **Ti** **V** **Cr** **Mn** **Fe** **Co** **Ni** **Cu** **Zn** **Ga** **Ge** **As** **Se** **Br** **Kr**
5s5P4d **Rb** **Sr** **Y** **Zr** **Nb** **Mo** **Tc** **Ru** **Rh** **Pd** **Ag** **Cd** **In** **Sn** **Sb** **Te** **I** **Xe**
6s6P5d4f **Cs** **Ba** **57-71*** **Hf** **Ta** **W** **Re** **Os** **Ir** **Pt** **Au** **Hg** **Tl** **Pb** **Bi** **Po** **At** **Rn**
7s7P6d5f **Fr** **Ra** **89-103**** **Rf** **Db** **Sg** **Bh** **Hs** **Mt** **Ds** **Rg** **Cn** **Uut** **Fl** **Uup** **Lv** **Uus** **Uuo**

■ Non-metal

■ Alkali metal

■ Alkaline earth metal

■ Transition metal

■ Metal

■ Metalloid

■ Halogen

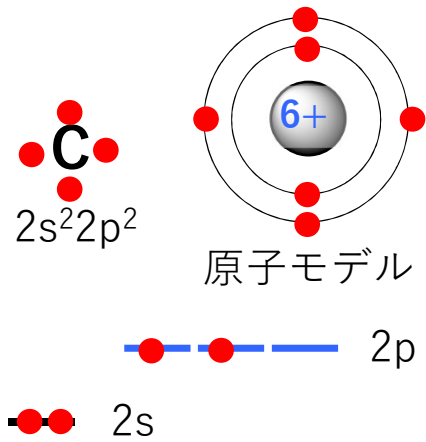
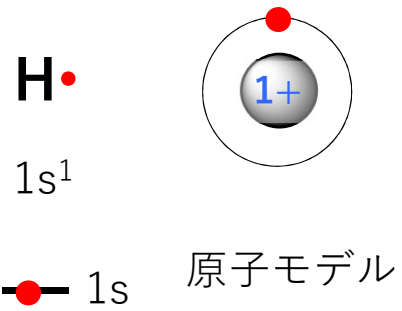
■ Noble gas

■ Lanthanide

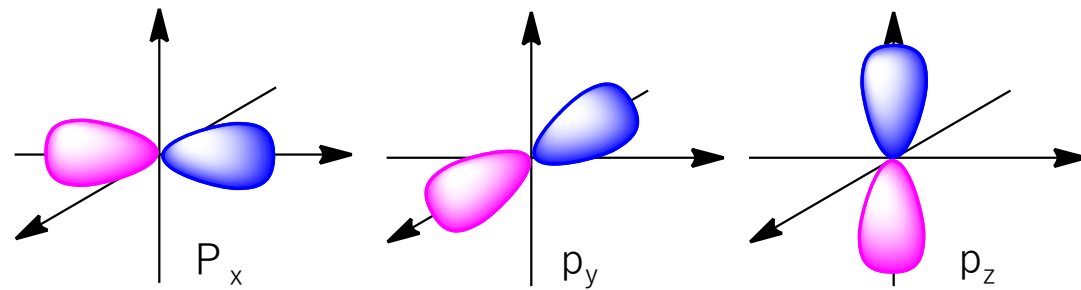
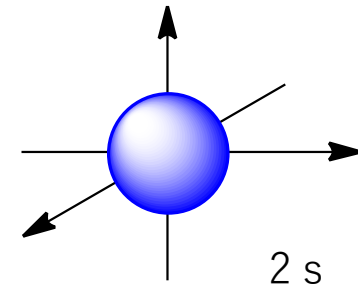
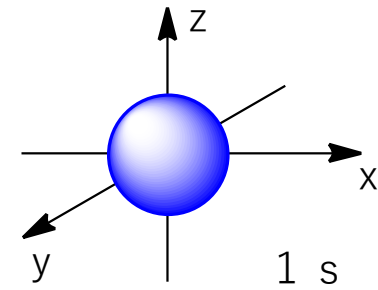
■ Actinide

* 57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La LANTHANUM 138.90	Ce CERUM 140.12	Pr PRASEODYMIUM 140.90	Nd NEODYMIUM 144.24	Pm PROMETHIUM 145	Sm SAMARIUM 150.36	Eu EUROPIUM 151.96	Gd GADOLINIUM 157.25	Tb TERBIUM 158.92	Dy DYSPROSIUM 162.50	Ho HOLMIUM 164.93	Er ERBIUM 167.26	Tm THULIUM 168.93	Yb Ytterbium 173.054	Lu LUTETIUM 174.967
** 89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac ACTINIUM 227	Th THORIUM 232.0377	Pa Protactinium 231.03	U URANIUM 238.02	Np NEPTUNIUM 237	Pu PLUTONIUM 244	Am AMERICIUM 243	Cm CURIUM 247	Bk BERKELIUM 247	Cf CALIFORNIUM 251	Es EINSTEINIUM 252	Fm FERMIUM 257	Md MENDELEVIUM 258	No NOBELIUM 259	Lr LAWRENCIUM 262

原子軌道の形

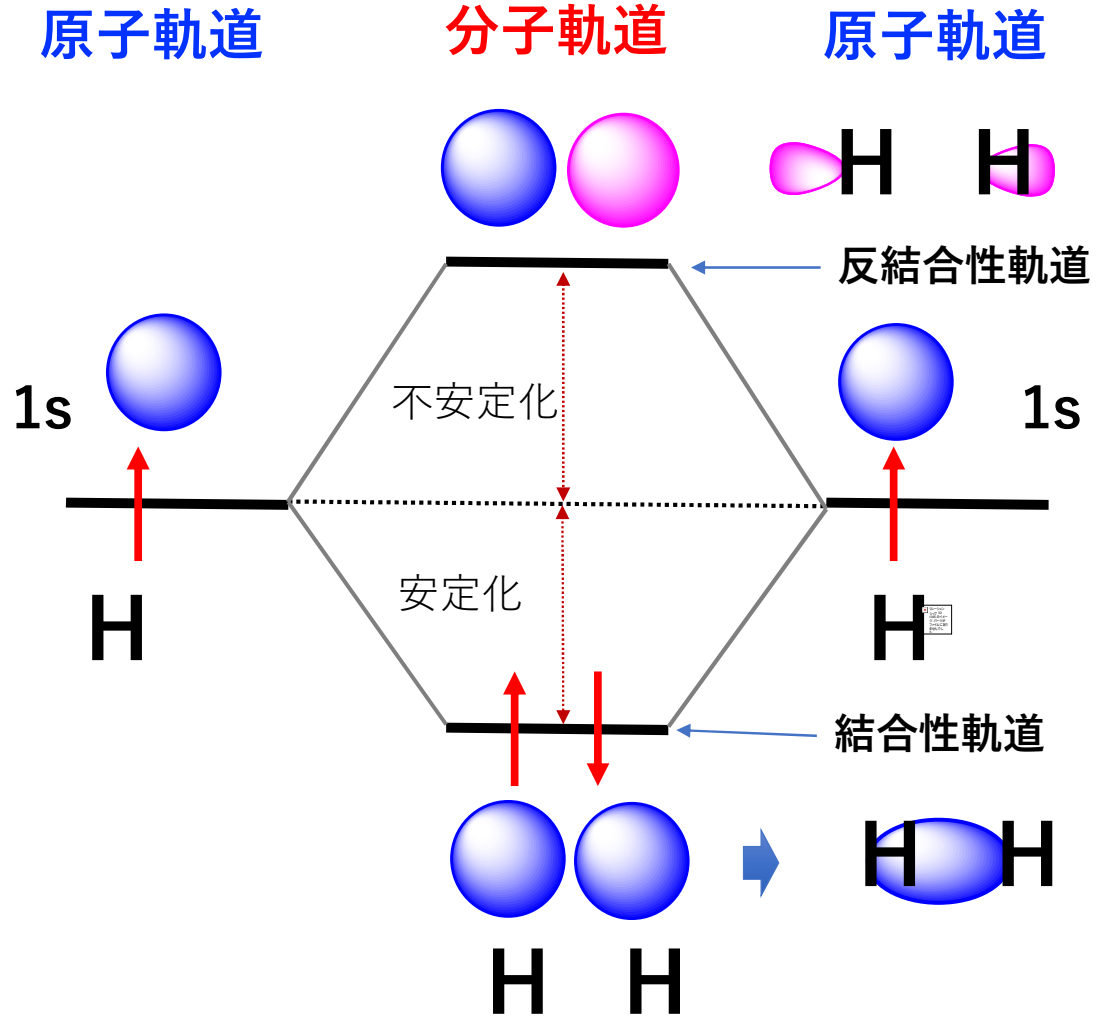
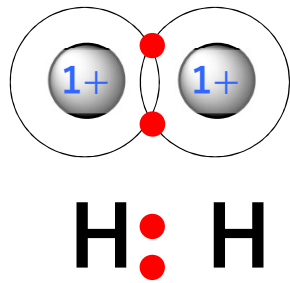


量子論的電子雲

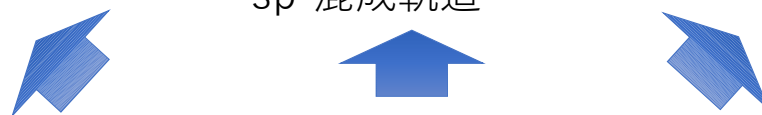
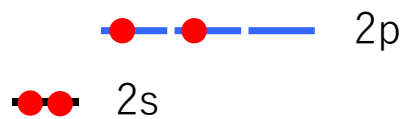
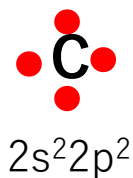
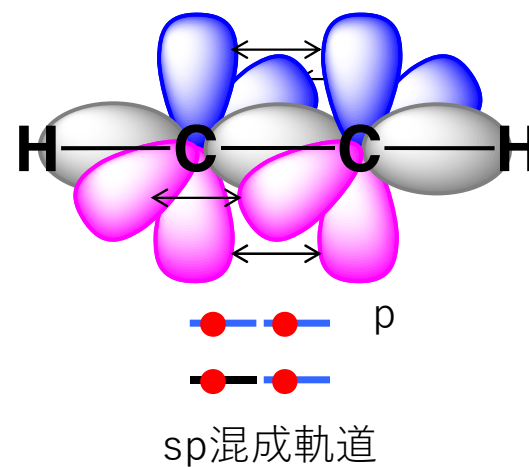
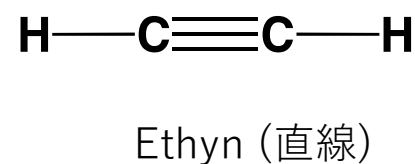
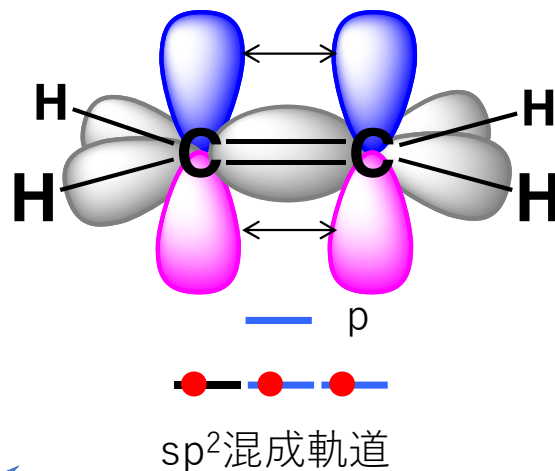
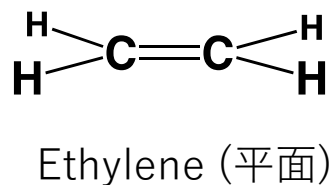
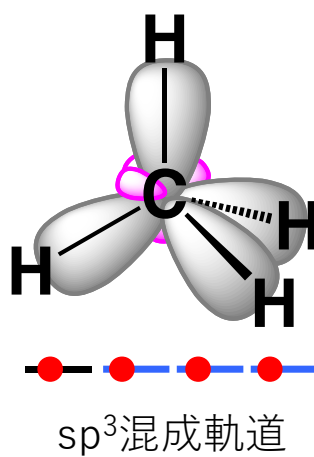
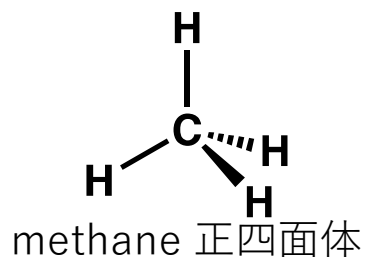


分子軌道法

- 水素分子 (H_2)



混成軌道



化学結合における原則

- Lewisの構造式

考え方

1) 全ての最外殻電子は電子対を作ろうとする。

結合電子対

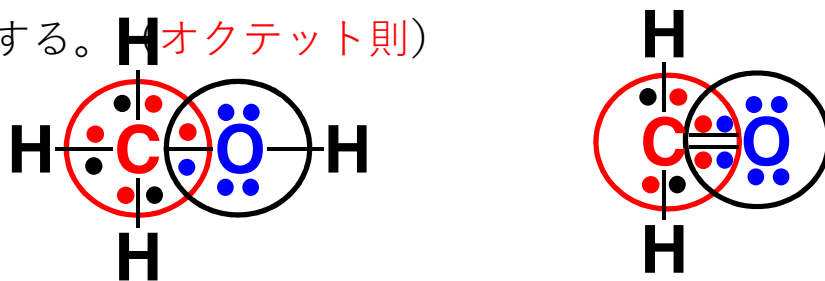


孤立電子対 (非共有電子対、非結合電子対)



2) 各原子がその最外殻電子が計8個 (閉殻) になるように隣合う他の原子と結合電子対を

共有する。(オクテット則)



化学結合論と有機立体化学

- 原子価殻電子反発モデル (Valence-Shell Electron-Pair Repulsion: VSEPR)

考え方:

扱うのは電子対

結合電子対 (BP)

孤立電子対 (LP)

- 1) 中心原子の最外殻にある電子対が互いに反発をさけるためなるべく離れて空間に配向する。
- 2) 反発の大きさは以下の順となる。
 $LP-LP > LP-BP > BP-BP$
- 3) LP-LP, LP-BPの角度はできるだけ 90° 以上とする。
- 4) 多重結合 (二重、三重結合) はまとまった1つの電子対として扱う。
- 5) 不対電子は反発の小さな仮の電子対として扱う。