

有機物質化学

1 : 化学結合論と有機化学



PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

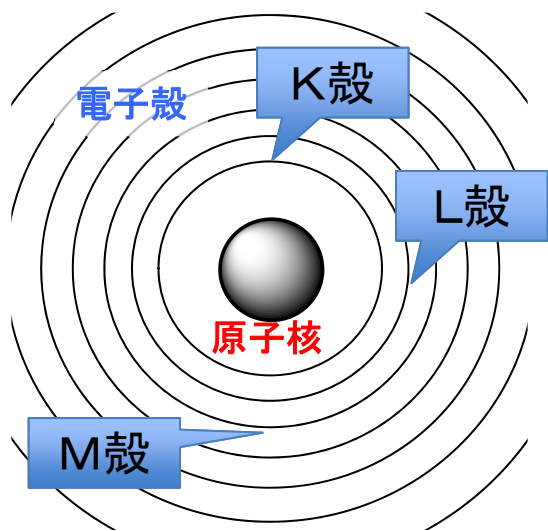
Legend																							
Non-metal	Metal	Noble gas																					
Alkali metal	Metalloid	Lanthanide																					
Alkaline earth metal	Halogen	Actinide																					
Transition metal																							
1 H HYDROGEN 1.0079																		2 He HELIUM 4.0026					
3 Li LITHIUM 6.941	4 Be BERYLLIUM 9.0122																	5 B BORON 10.811	6 C CARBON 12.011	7 N NITROGEN 14.007	8 O OXYGEN 15.999	9 F FLUORINE 18.998	10 Ne NEON 20.1797
11 Na SODIUM 22.989	12 Mg MAGNESIUM 24.305																	13 Al ALUMINIUM 26.981	14 Si SILICON 28.085	15 P PHOSPHORUS 30.974	16 S SULFUR 32.064	17 Cl CHLORINE 35.453	18 Ar ARGON 39.948
19 K POTASSIUM 39.098	20 Ca CALCIUM 40.078	21 Sc SCANDIUM 44.955	22 Ti TITANIUM 47.867	23 V VANADIUM 50.9415	24 Cr CHROMIUM 51.9961	25 Mn MANGANESE 54.938	26 Fe IRON 55.845	27 Co COBALT 58.933	28 Ni NICKEL 58.6934	29 Cu COPPER 63.546	30 Zn ZINC 65.38	31 Ga GALLIUM 69.723	32 Ge GERMANIUM 72.63	33 As ARSENIC 74.921	34 Se SELENIUM 78.971	35 Br BROMINE 79.904	36 Kr KRYPTON 83.798						
37 Rb RUBIDIUM 85.467	38 Sr STRONTIUM 87.62	39 Y YTTORIUM 88.9058	40 Zr ZIRCONIUM 91.224	41 Nb NIOBIUM 92.9063	42 Mo MOLYBDENUM 95.95	43 Tc TECHNETIUM (98)	44 Ru RUTHENIUM 101.07	45 Rh RHODIUM 102.90	46 Pd PALLADIUM 106.42	47 Ag SILVER 107.8682	48 Cd CADMIUM 112.414	49 In INDIUM 114.818	50 Sn TIN 118.710	51 Sb ANTIMONY 121.760	52 Te TELLURIUM 127.60	53 I IODINE 126.90	54 Xe XENON 131.293						
55 Cs CAESIUM 132.905	56 Ba BARIUM 137.327	57-71* Lanthanides	72 Hf HAFNIUM 178.49	73 Ta TANTALUM 180.94	74 W TUNGSTEN 183.84	75 Re RHENIUM 186.207	76 Os OSMIUM 190.23	77 Ir IRIDIUM 192.217	78 Pt PLATINUM 195.084	79 Au GOLD 196.96	80 Hg MERCURY 200.59	81 Tl THALLIUM 204.38	82 Pb LEAD 207.2	83 Bi BISMUTH 208.98	84 Po POLONIUM (209)	85 At ASTATINE (210)	86 Rn RADON (222)						
87 Fr FRANCIUM (223)	88 Ra RADIUM (226)	89-103** Actinides	104 Rf RUFORMIUM (261)	105 Db DUBNIUM (268)	106 Sg SEABORGIUM (271)	107 Bh BOHRIUM (272)	108 Hs HASSIUM (278)	109 Mt MEITNERIUM (276)	110 Ds DARMSTADTIUM (281)	111 Rg ROENTGENIUM (288)	112 Cn COPECIUM (285)	113 Uut UNUNTRIUM (284)	114 Fl FLEROVIUM (289)	115 Uup UNUNPENTIUM (288)	116 Lv LIVERMORIUM (293)	117 Uus UNUNSEPTIUM (294)	118 Uuo UNUNOCTIUM (294)						
* 57 La LANTHANUM 138.90, 58 Ce CERIUM 140.116, 59 Pr PRASEODYMIUM 140.90, 60 Nd NEODYMIUM 144.242, 61 Pm PROMETHIUM (145), 62 Sm SAMARIUM 150.36, 63 Eu EUROPIUM 151.964, 64 Gd GADOLINIUM 157.25, 65 Tb TERBIUM 158.92, 66 Dy DYSPROSIUM 162.500, 67 Ho HOLMIUM 164.93, 68 Er ERBIUM 167.259, 69 Tm THULIUM 168.93, 70 Yb YTTERIUM 173.054, 71 Lu LUTETIUM 174.968																							
** 89 Ac ACTINIUM (227), 90 Th THORIUM 232.0377, 91 Pa PROTACTINIUM 231.03, 92 U URANIUM 238.02, 93 Np NEPTUNIUM (237), 94 Pu PLUTONIUM (244), 95 Am AMERICIUM (243), 96 Cm CURIUM (247), 97 Bk BERKELIUM (247), 98 Cf CALIFORNIUM (251), 99 Es EINSTEINIUM (252), 100 Fm FERMIUM (257), 101 Md MENDELEVIUM (258), 102 No NOBELIUM (259), 103 Lr LAWRENCIUM (262)																							

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)



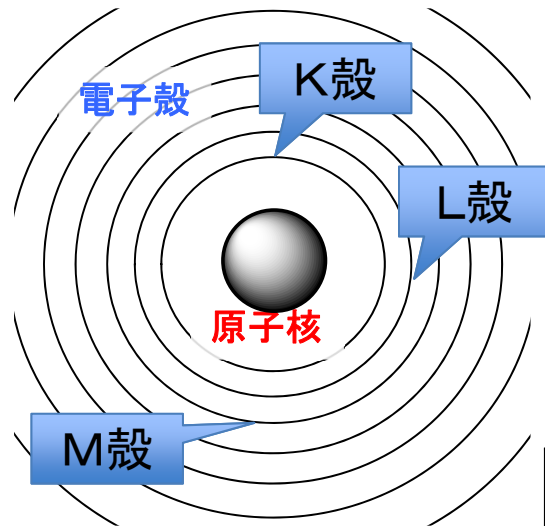
ボーアの原子モデル

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)
 $l = 0 \sim n-1$

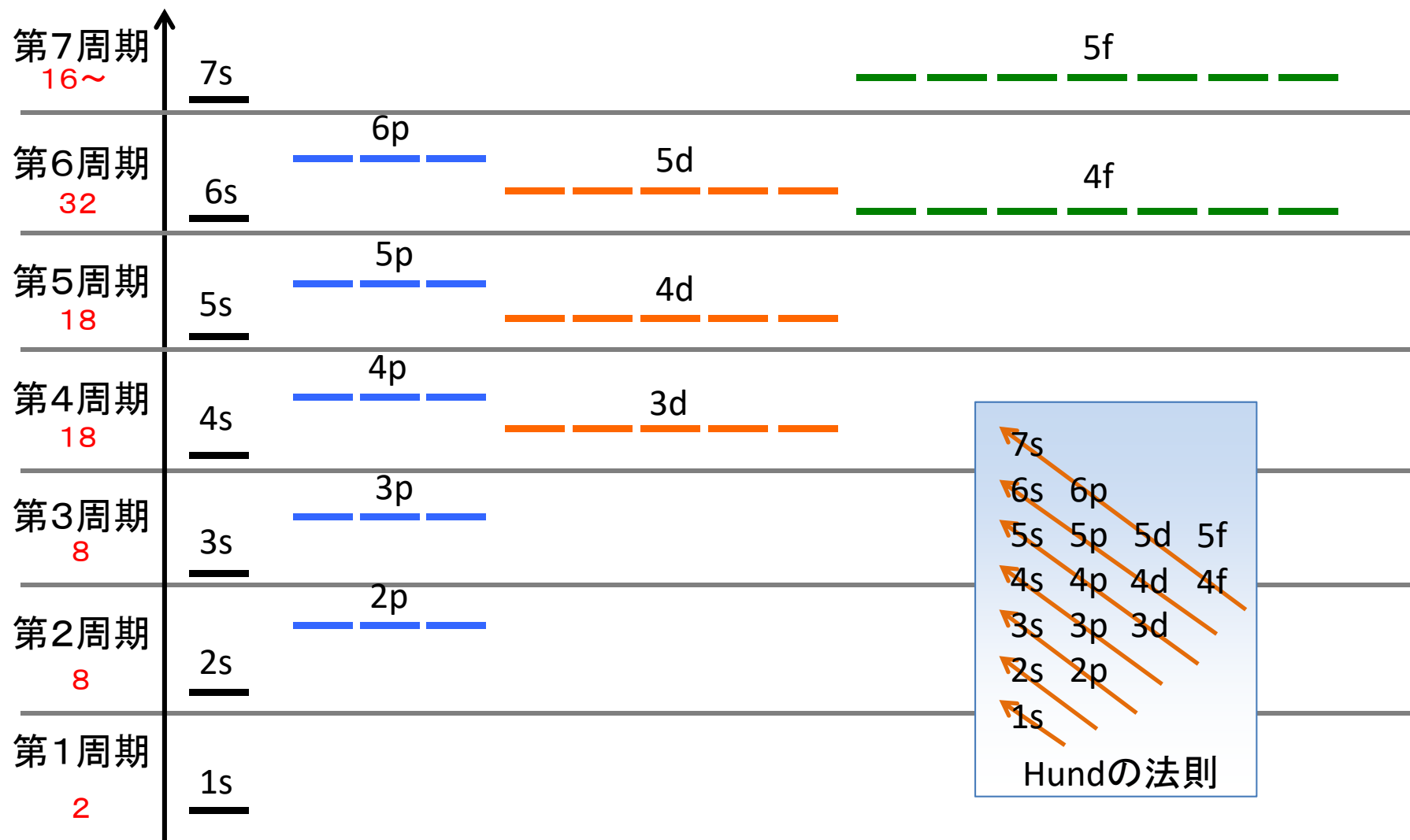
m (磁気量子数: 軌道の方向)
 m ($2l+1$ 個)

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

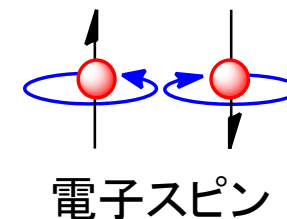
殻名	n	s軌道	p軌道	d軌道	f軌道
		$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
K	1	1s -			
L	2	2s -	2p - - -		
M	3	3s -	3p - - -	3d - - - - -	
N	4	4s -	4p - - -	4d - - - - -	4f (-)x7

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

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

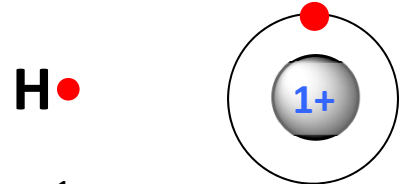
PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

1s	1																	2																																																																																																																								
	H																	He																																																																																																																								
2s2p	3	4											5	6	7	8	9	10																																																																																																																								
	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne																																																																																																																								
3s3p	11	12											13	14	15	16	17	18																																																																																																																								
	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar																																																																																																																								
4s4p3d	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36																																																																																																																								
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																																																																																																																								
5s5p4d	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54																																																																																																																								
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																																																																																																																								
6s6p5d4f	55	56	57-71*	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86																																																																																																																								
	Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																																																																																																																								
7s7p6d5f	87	88	89-103**	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118																																																																																																																								
	Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo																																																																																																																								
	<table border="1"> <tr> <td>* 57</td><td>58</td><td>59</td><td>60</td><td>61</td><td>62</td><td>63</td><td>64</td><td>65</td><td>66</td><td>67</td><td>68</td><td>69</td><td>70</td><td>71</td> </tr> <tr> <td>La</td><td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>LANTHANUM</td><td>CERUM</td><td>PRASEODYMIUM</td><td>NEODYMIUM</td><td>PROMETHIUM</td><td>SAMARUM</td><td>EUROPIUM</td><td>GADOLINIUM</td><td>TERBIUM</td><td>DYSPROSIUM</td><td>HOLMIUM</td><td>ERBIUM</td><td>THULIUM</td><td>YtterBIUM</td><td>LUTETIUM</td> </tr> <tr> <td>138.91</td><td>140.12</td><td>140.91</td><td>144.24</td><td>(145)</td><td>150.36</td><td>151.964</td><td>157.25</td><td>158.92</td><td>162.500</td><td>164.93</td><td>167.259</td><td>168.93</td><td>173.054</td><td>174.967</td> </tr> <tr> <td>** 89</td><td>90</td><td>91</td><td>92</td><td>93</td><td>94</td><td>95</td><td>96</td><td>97</td><td>98</td><td>99</td><td>100</td><td>101</td><td>102</td><td>103</td> </tr> <tr> <td>Ac</td><td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td> </tr> <tr> <td>ACTINIUM</td><td>THORIUM</td><td>PROTACTINIUM</td><td>URANIUM</td><td>NEPTUNIUM</td><td>PLUTONIUM</td><td>AMERICIUM</td><td>CURIUM</td><td>BERKELIUM</td><td>CALIFORNIUM</td><td>EINSTEINIUM</td><td>FERMIDIUM</td><td>MENDELEVIUM</td><td>NOBELIUM</td><td>LAWRENCIUM</td> </tr> <tr> <td>(227)</td><td>232.0377</td><td>231.04</td><td>238.03</td><td>(237)</td><td>(244)</td><td>(243)</td><td>(247)</td><td>(247)</td><td>(251)</td><td>(252)</td><td>(257)</td><td>(258)</td><td>(259)</td><td>(262)</td> </tr> </table>																		* 57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	LANTHANUM	CERUM	PRASEODYMIUM	NEODYMIUM	PROMETHIUM	SAMARUM	EUROPIUM	GADOLINIUM	TERBIUM	DYSPROSIUM	HOLMIUM	ERBIUM	THULIUM	YtterBIUM	LUTETIUM	138.91	140.12	140.91	144.24	(145)	150.36	151.964	157.25	158.92	162.500	164.93	167.259	168.93	173.054	174.967	** 89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	ACTINIUM	THORIUM	PROTACTINIUM	URANIUM	NEPTUNIUM	PLUTONIUM	AMERICIUM	CURIUM	BERKELIUM	CALIFORNIUM	EINSTEINIUM	FERMIDIUM	MENDELEVIUM	NOBELIUM	LAWRENCIUM	(227)	232.0377	231.04	238.03	(237)	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(258)	(259)	(262)
* 57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71																																																																																																																												
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																																																																																																																												
LANTHANUM	CERUM	PRASEODYMIUM	NEODYMIUM	PROMETHIUM	SAMARUM	EUROPIUM	GADOLINIUM	TERBIUM	DYSPROSIUM	HOLMIUM	ERBIUM	THULIUM	YtterBIUM	LUTETIUM																																																																																																																												
138.91	140.12	140.91	144.24	(145)	150.36	151.964	157.25	158.92	162.500	164.93	167.259	168.93	173.054	174.967																																																																																																																												
** 89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103																																																																																																																												
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																																																																																																												
ACTINIUM	THORIUM	PROTACTINIUM	URANIUM	NEPTUNIUM	PLUTONIUM	AMERICIUM	CURIUM	BERKELIUM	CALIFORNIUM	EINSTEINIUM	FERMIDIUM	MENDELEVIUM	NOBELIUM	LAWRENCIUM																																																																																																																												
(227)	232.0377	231.04	238.03	(237)	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(258)	(259)	(262)																																																																																																																												

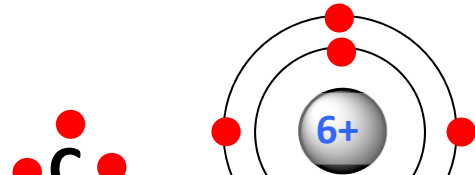
- Non-metal
- Alkali metal
- Alkaline earth metal
- Transition metal
- Metal
- Metalloid
- Halogen
- Noble gas
- Lanthanide
- Actinide

原子軌道の形

量子論的電子雲

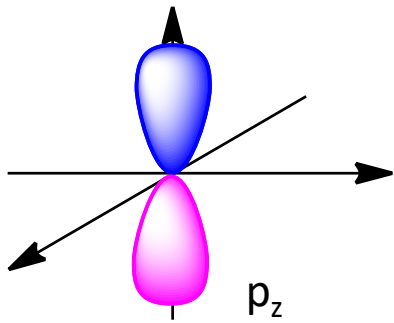
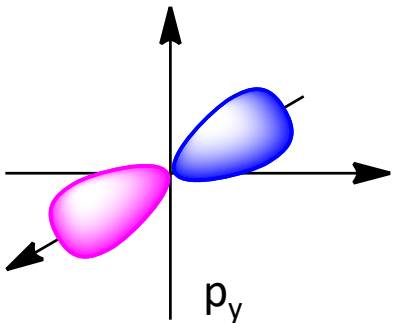
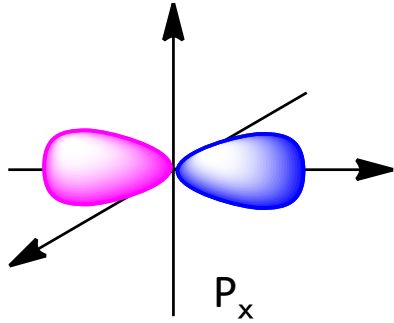
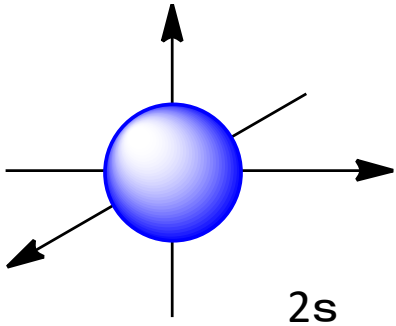
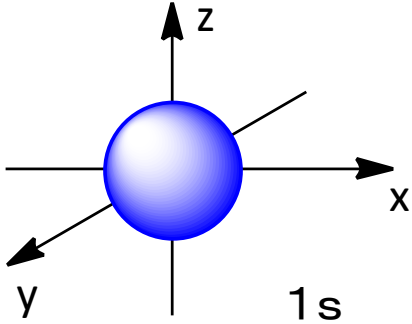


$1s^1$



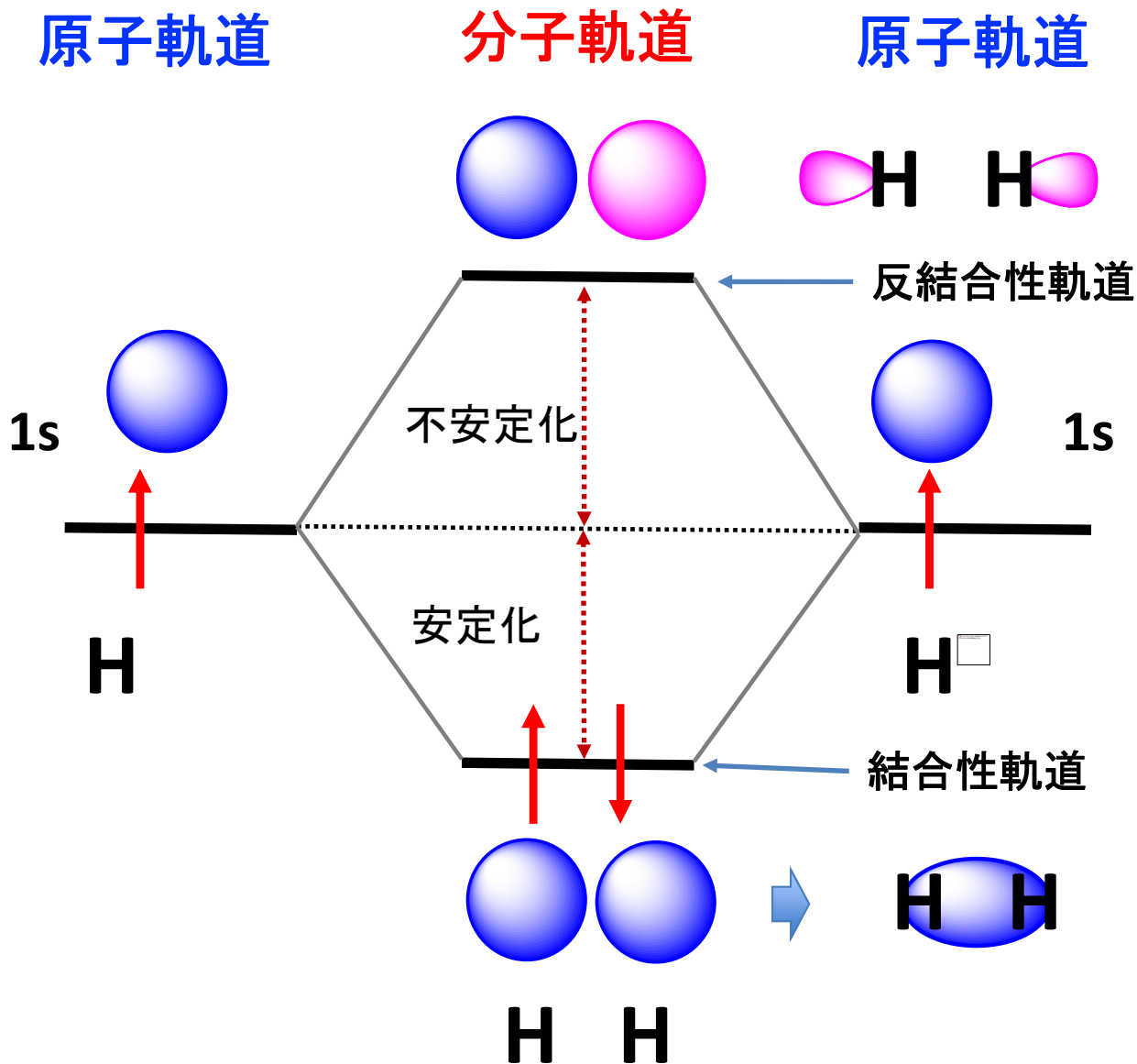
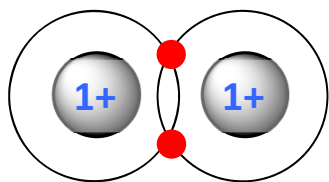
$2s^2 2p^2$

原子モデル

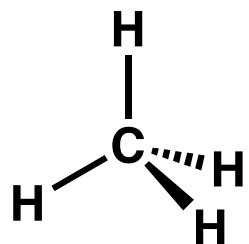


分子軌道法

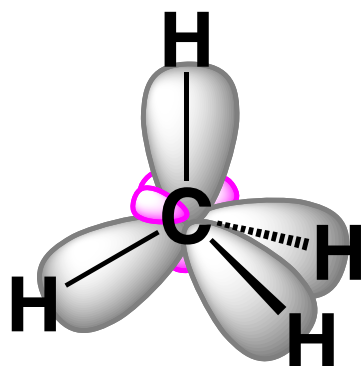
- 水素分子 (H_2)



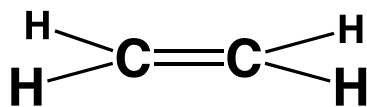
混成軌道



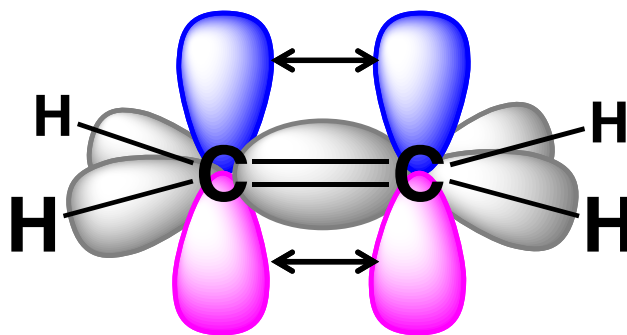
methane 正四面体



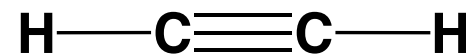
sp^3 混成軌道



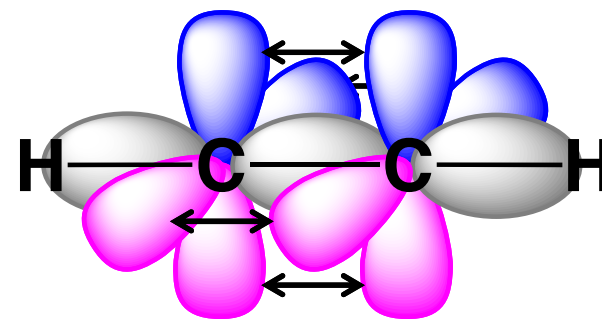
Ethylene (平面)



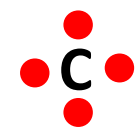
sp^2 混成軌道



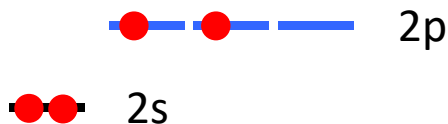
Ethyn (直線)



sp 混成軌道



$2s^2 2p^2$



$2s$

$2p$



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



single bond (単結合)



double bond (二重結合)

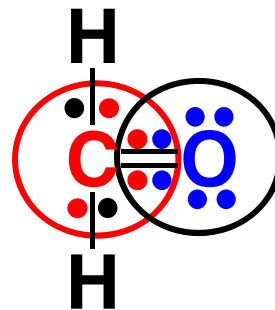
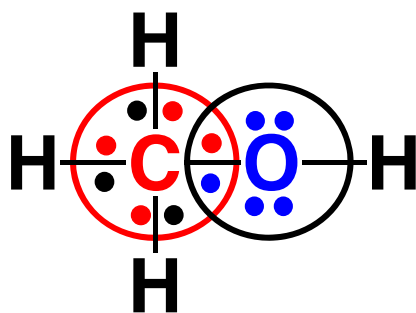


triple bond (三重結合)

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。