

化学基礎論 D

第4回

第4章 分子の形と電子構造

分子の電子構造

3つの手法

VSEPR 法	分子の形を予測するモデル
VB 法	共有結合の量子力学による記述法 ①
MO 法	= = = ②

4-1 VSEPR モデル

Valence Shell Electron Pair Repulsion model

原子価殻電子対反発モデル

「高電子密度領域が互いにできるだけ
離れた構造がもっとも安定である」

「高電子密度領域」

||

または単に「電子ドメイン」

||

- ・ 結合電子対
(共有)
- ・ 孤立電子対
(非共有)

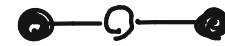
① 基本構造

電子ドメインの数

配置

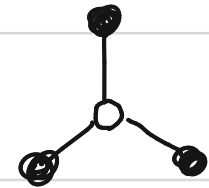
2

直線



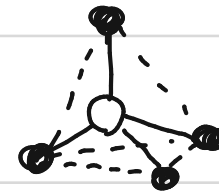
3

平面三角形



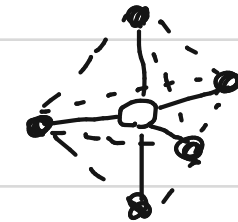
4

四面体形



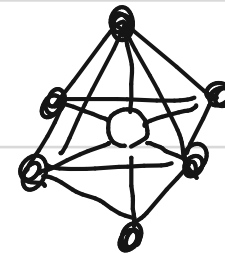
5

三方両錐形



6

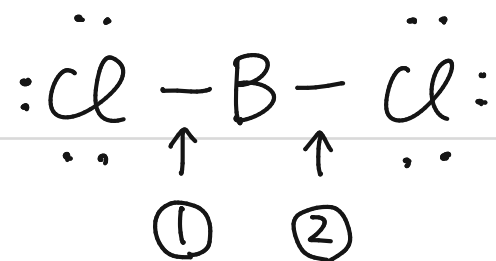
八面体形



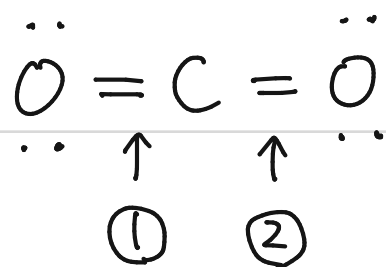
高電子密度領域が互いにできるだけ離れた構造
(電子ドメイン)

(1) BCl_2 CO_2 HCN

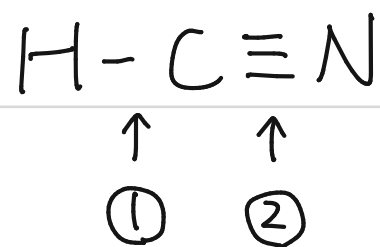
直線 AX_2 717°



2つの電子ドメイン

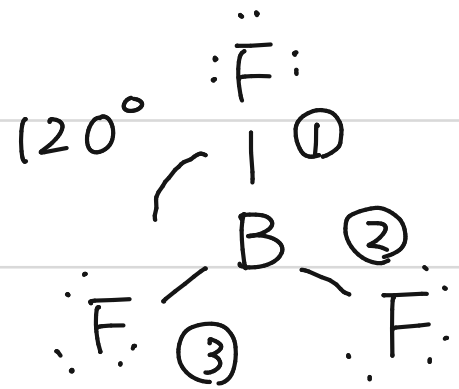


二重結合もまとめて1つの電子ドメインと数える

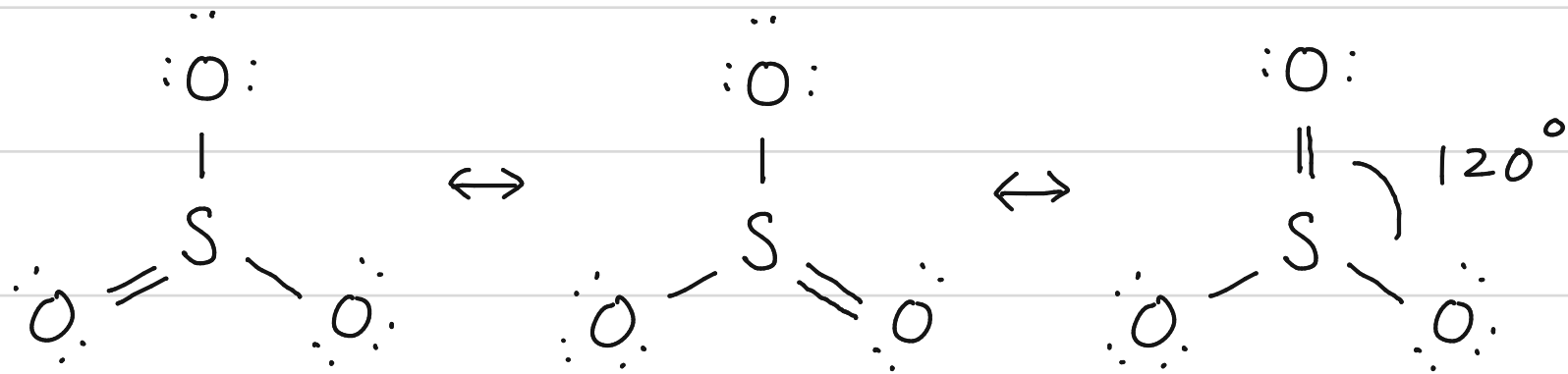


三重 : : : :

(2) BF_3 SO_3 NO_3^- 平面三角形 AX_3 タイプ

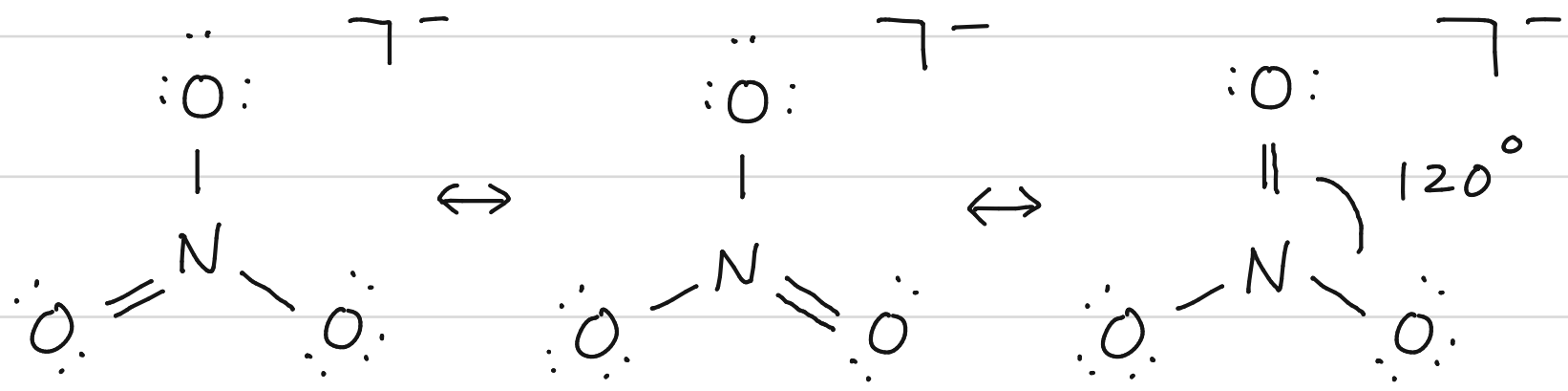


3つのドメイン



$6 \times 4 = 24$ 電子
12対

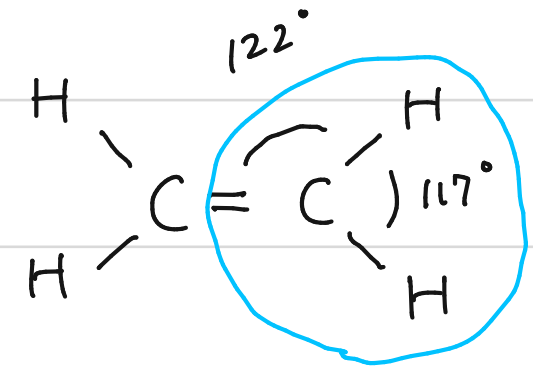
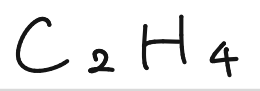
いずれも 3つのドメインをもつ
かつ、等価 \rightarrow 正三角形



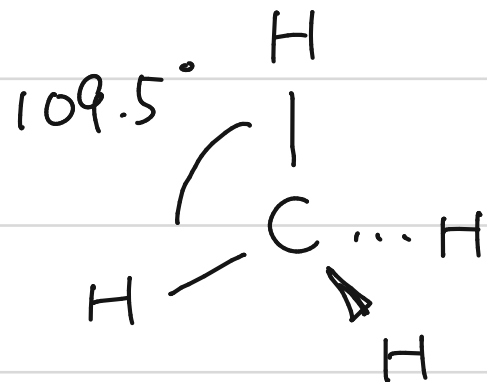
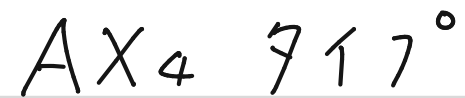
$6 \times 3 + 5 + 1 = 24$ 電子
12 対

SO₃ と 等電子構造

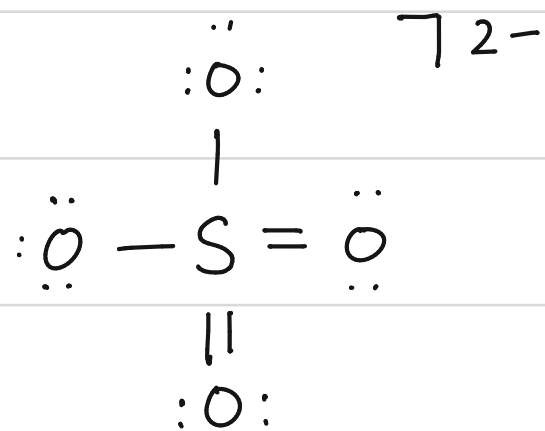
→ 同様に 正三角形



平面三角形



4つの電子ドメイン 正四面体



4つの電子ドメイン

$$6 \times 5 + 2 = 32 \text{ 電子}$$
$$16 \text{ 対}$$

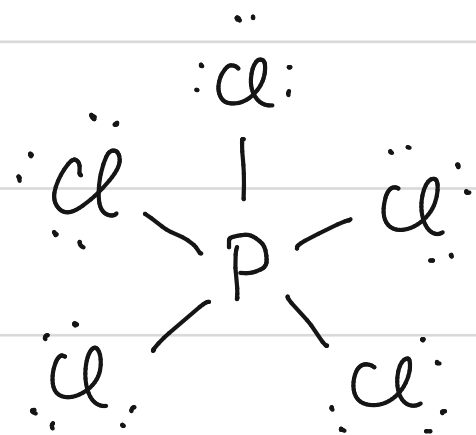
6個のルイス構造からなる共鳴構造

→ 4つの結合は等価

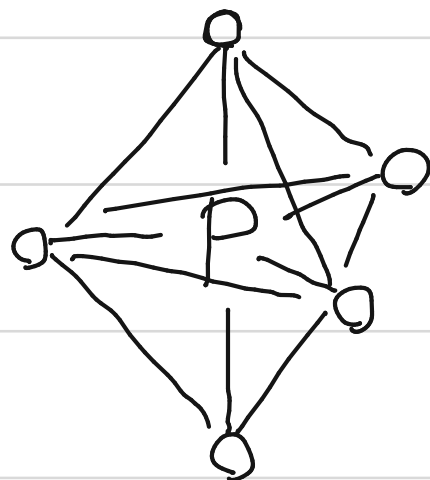
→ 正四面体

(4) $\text{PCl}_5 (\text{g})$

AX_5 717°



=



三方両錐

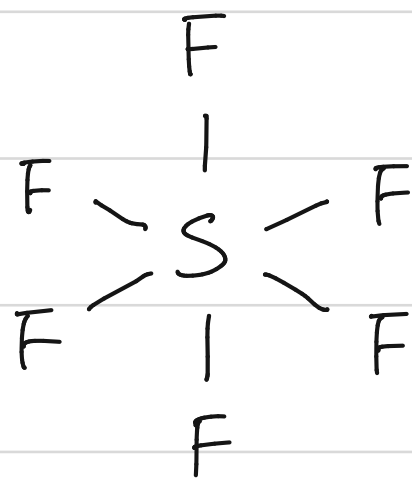
Trigonal bipyramid

P: 価電子 5個

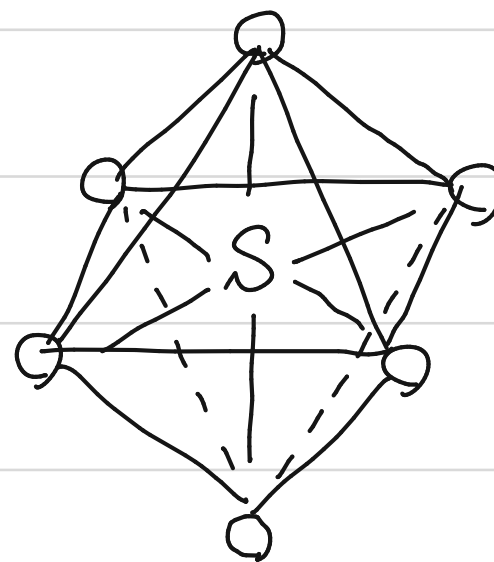
5つの電子ドメイン

(5) SF_6

AX_6 90°



=



八面体

Octahedron

S: 価電子 6個

6個の電子ドメイン

2 孤立電子対の存在

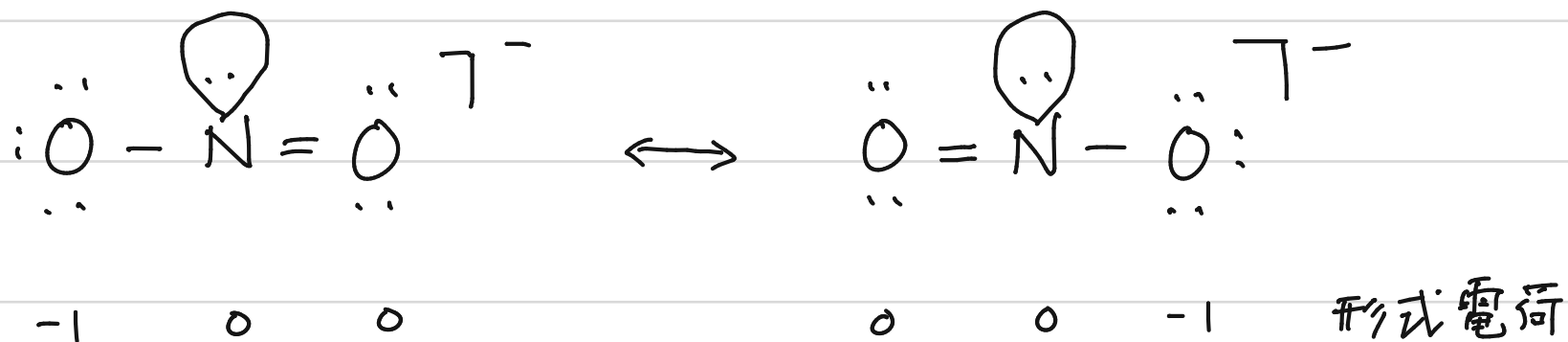
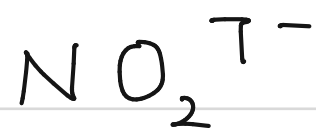
"E"

「孤立電子対は結合電子対より強く他の電子対と反発する」
広がりが多い

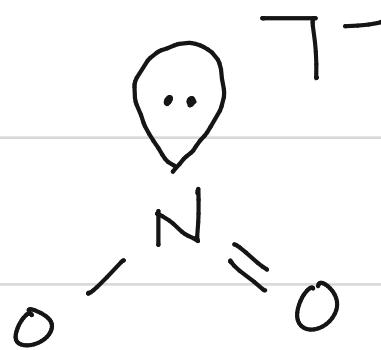
反発の強さ

(孤立 - 孤立) > (孤立 - 結合) > (結合 - 結合)
大 中 小

(1) AX₂E 717°

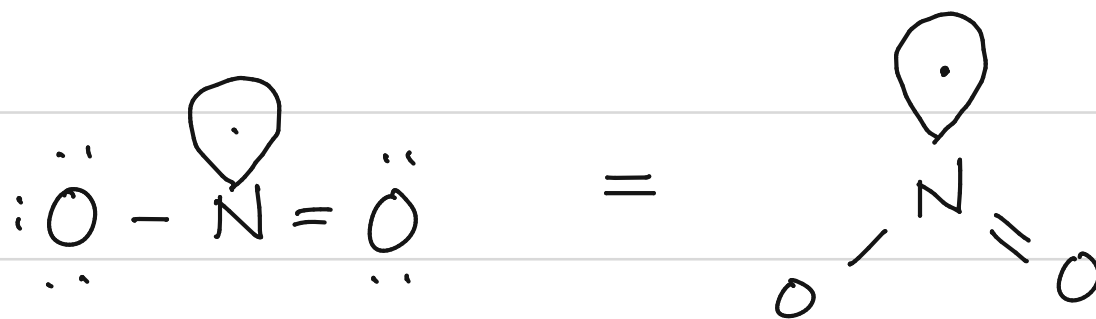


||

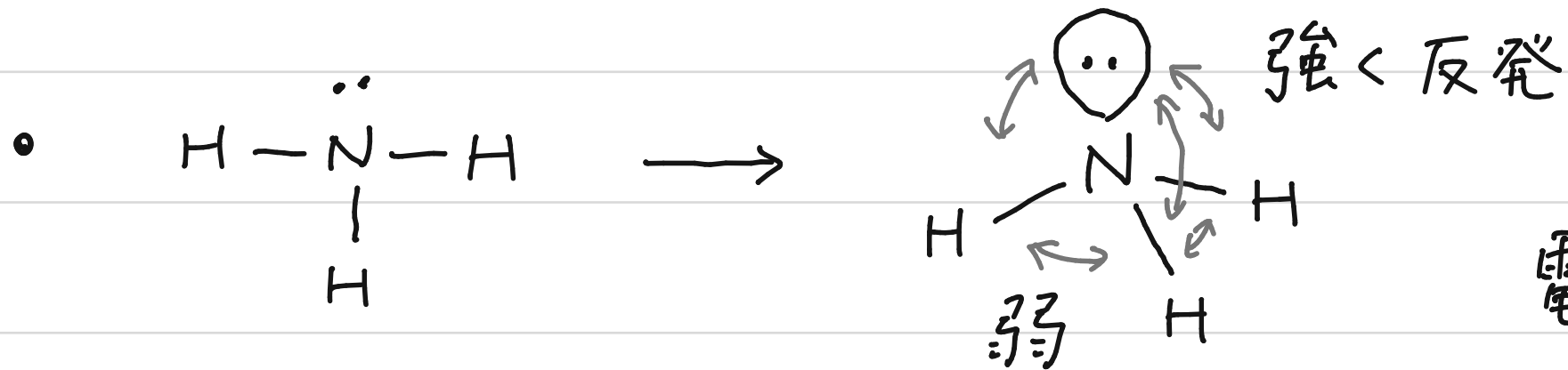


電子ドメインは平面三角形
分子の形は折れ線形

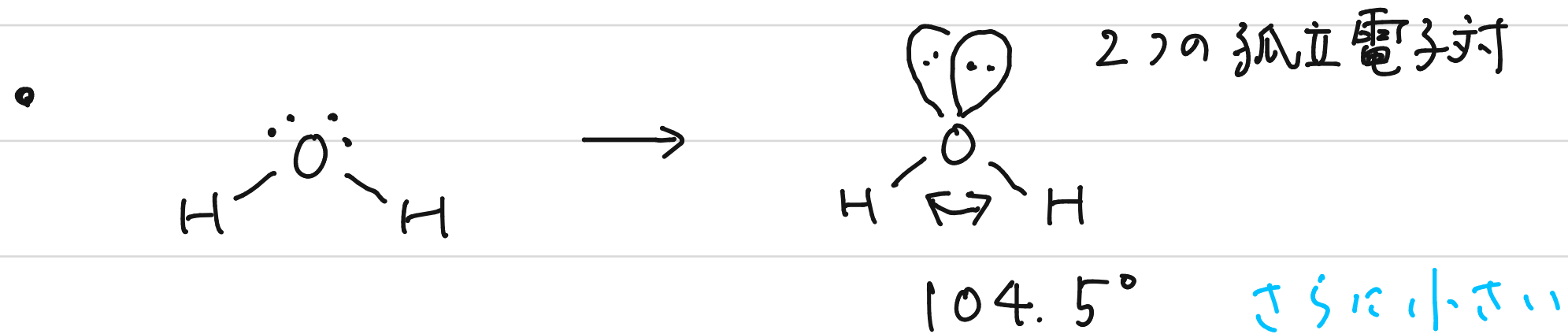
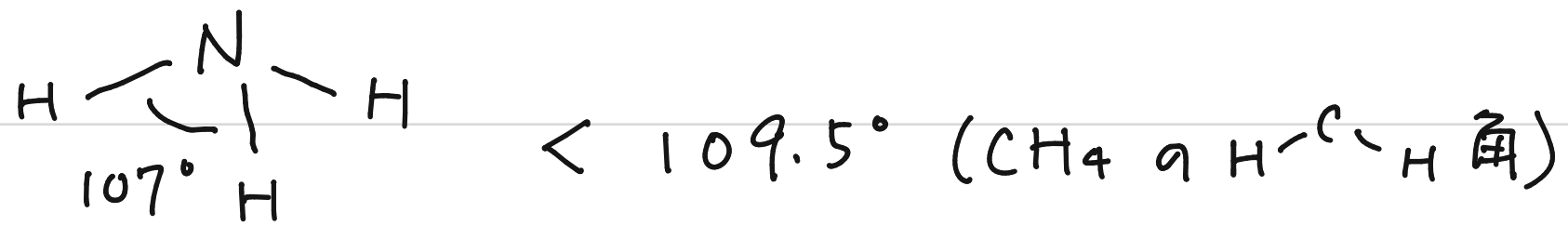
• 不対電子も同じように扱う



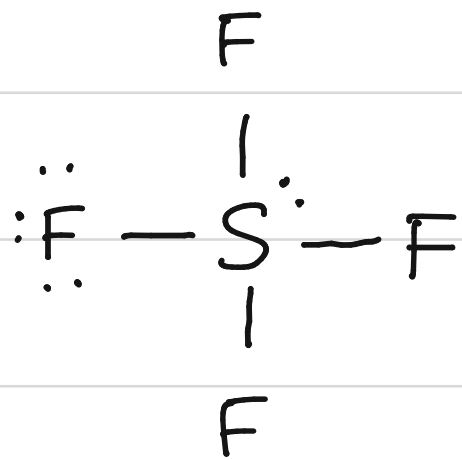
(2) AX_3E 917°



電子ドメインは四面体形
分子の形は三角錐形



(3) AX₄E 717°

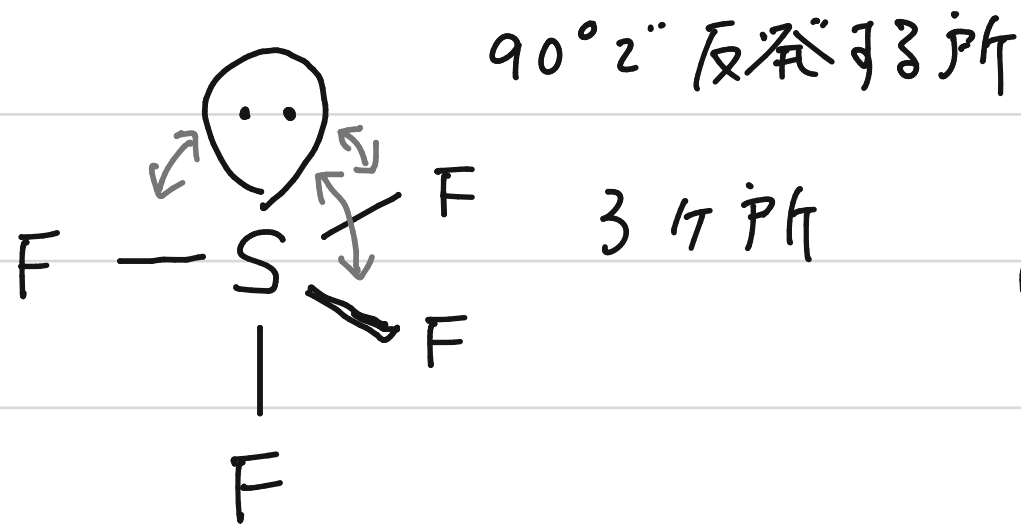


S : V = 6 → 拡張原子価殻

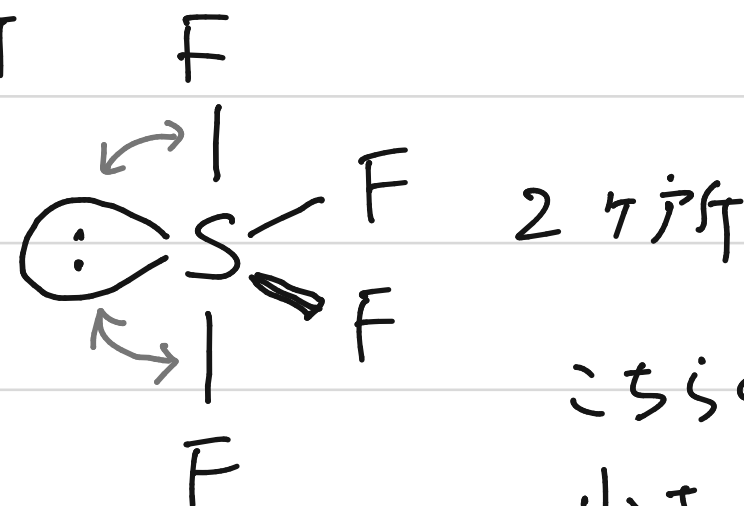
F : V = 7

5つの電子ドメイン → 三角錐形

2つの可能性



三角錐



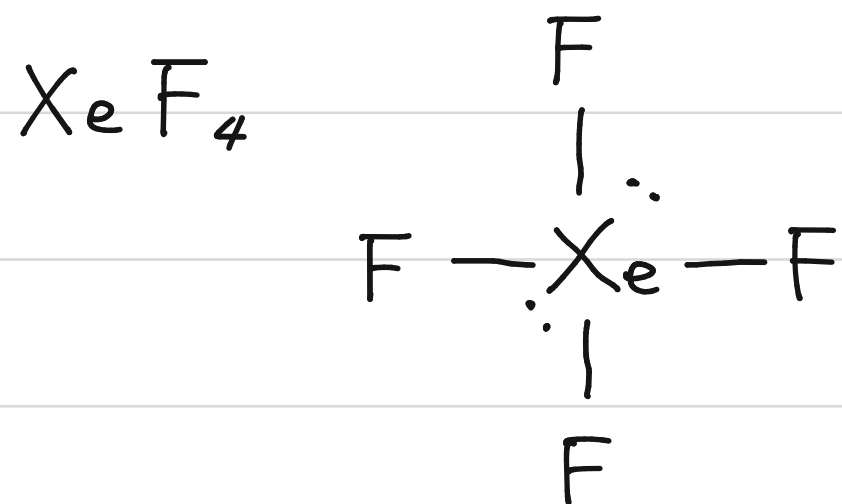
シーソー形

こちらの方が反発が小さいのでより安定

構造の補正



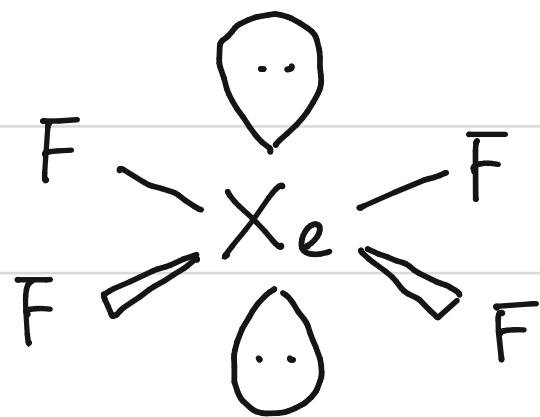
(4) AX_4E_2 717°



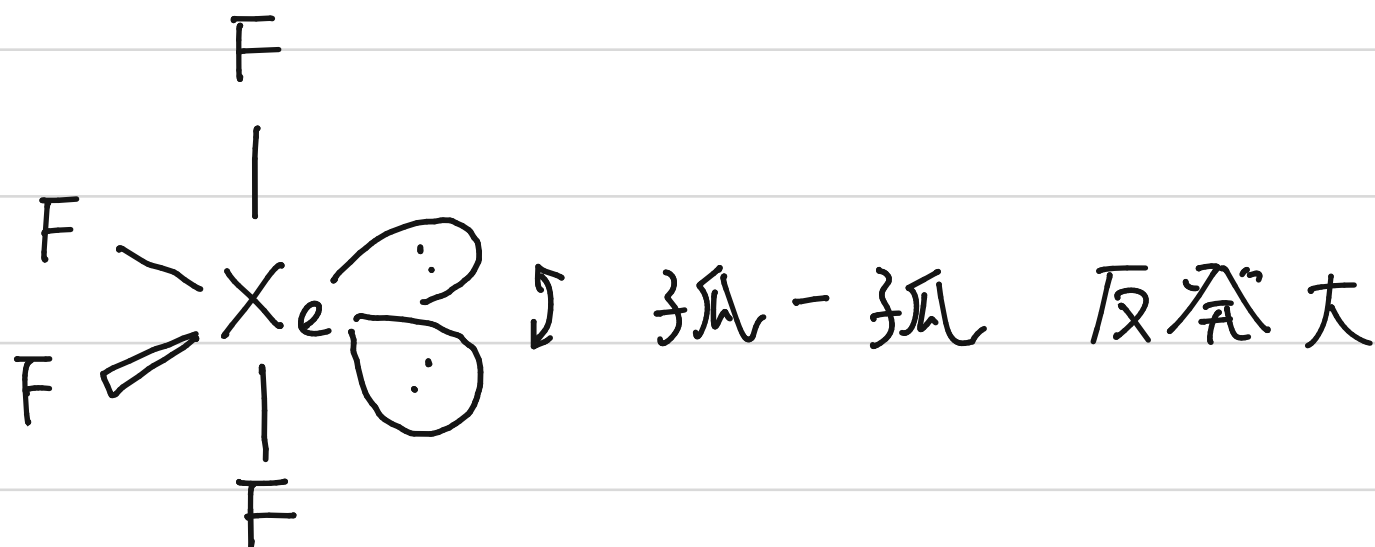
Xe: $V=8$

F: $V=7$

電子ドメイン: 6個 \rightarrow 八面体構造

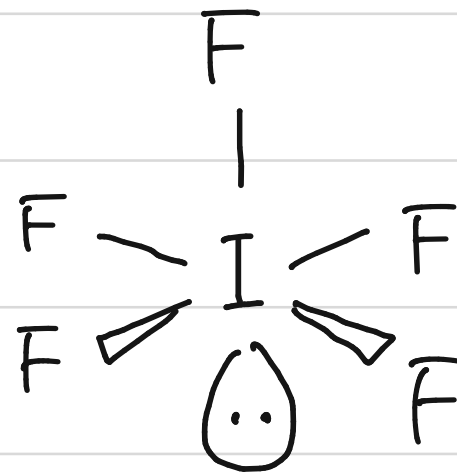
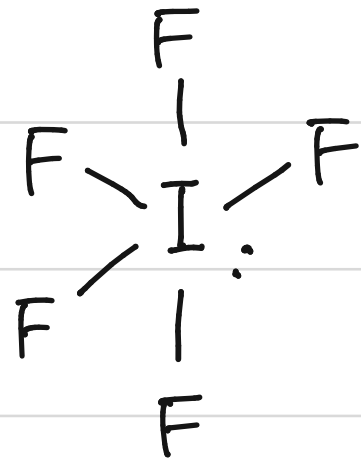


安定構造



(5) AX_5E タイプ

IF_5



電子ドメインは 八面体形

分子の形は 四角錐形

宿題

1 教科書 127 ~ 132 ページ を読む

2 復習問題 4.1B, 4.2B, 4.3B, 4.4B
を解き, CLE から提出せよ.