

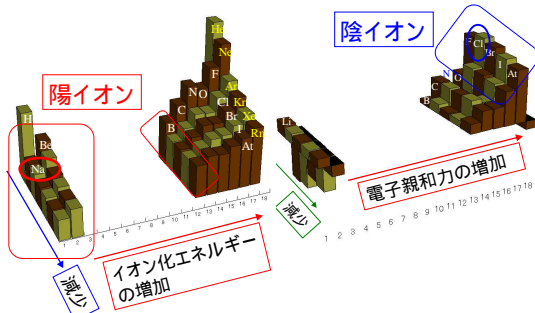
原子の結合 (化学結合) イオン結合、共有結合、金属結合、配位結合

1: イオン結合 (ionic bond)

希ガスは原子単独で安定に存在できる。  
電子配置は  $(ns)^2(np)^6$

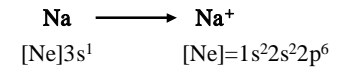
原子の中には容易にイオン化する傾向をもち、  
電子を1つ放出して(\_\_\_\_\_が小さい)  
正に帯電するものと電子を1つ受け取って(\_\_\_\_\_  
が大きい) 負に帯電するものがある。これら帯  
電したイオンの電子配置は、\_\_\_\_\_と同じ。

イオン結合の例: NaCl (食塩)

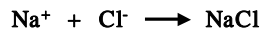
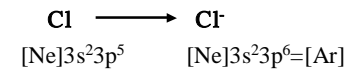


イオン結合の例: NaCl

• Naのイオン化エネルギーは496kJ/molと小さい。  
Naの電子親和力は53kJ/mol。



• Clの電子親和力は348kJ/molと大きい。  
Clのイオン化エネルギーは1250kJ/mol。



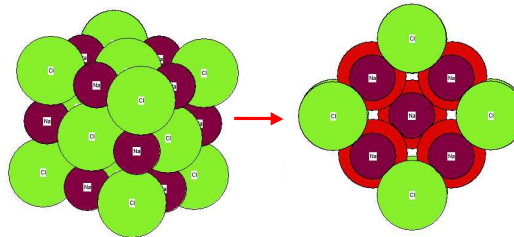
イオン結合は、上記例のように、Naが電子を1つClに提供して両者がイオンとなり(その結果、希ガスの電子配置をとり)、  
+ - の\_\_\_\_\_力により結合したものを言う。

定義: 電子が移動した理想的な結合

\_\_\_\_\_力には配向が無いので、3次元のどの方向でも $\text{Na}^+$ と $\text{Cl}^-$ は多く寄り集まって集合状態を形成し、物質となっている。=> **イオン結晶**

例: NaH, CsCl, LiF, CaO, 金属と非金属との結合  
KI, AgCl はイオン結合が多い。

イオン結晶: イオン結合を形成している  
陽イオンと陰イオンからなる結晶。



$\text{Na}^+$ と $\text{Cl}^-$ はそれぞれ面心立方格子で存在する(6配位)。  
=> **NaClという\_\_\_\_\_は存在しない。**

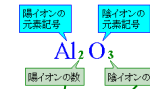
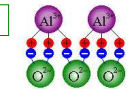
イオン結晶の組成式について

イオン結合した分子は電氣的に中性になる。

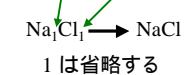
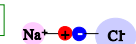
$$+ \text{の電荷量} = - \text{の電荷量}$$

陽イオンの価数 × 陽イオンの数 = 陰イオンの価数 × 陰イオンの数

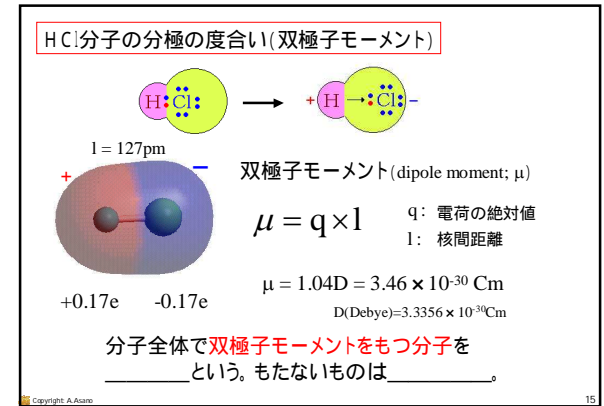
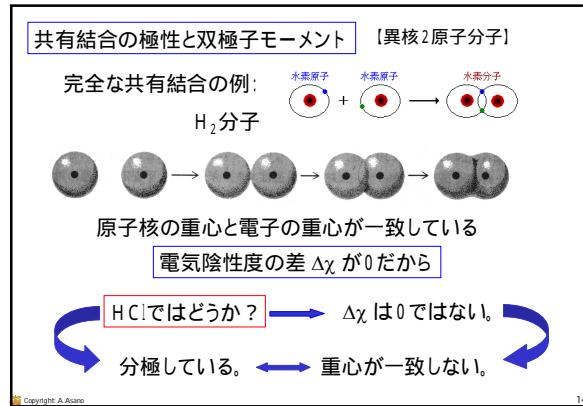
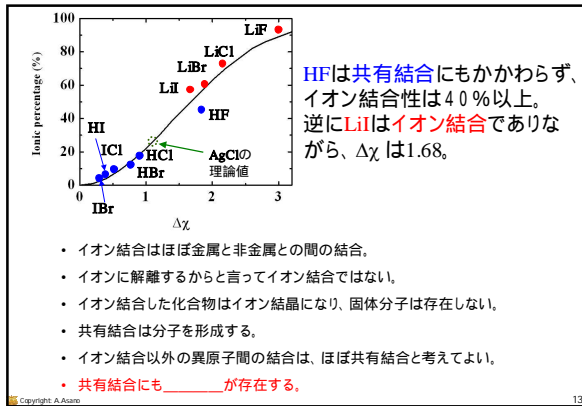
$\text{Al}_2\text{O}_3$ の場合



NaClの場合







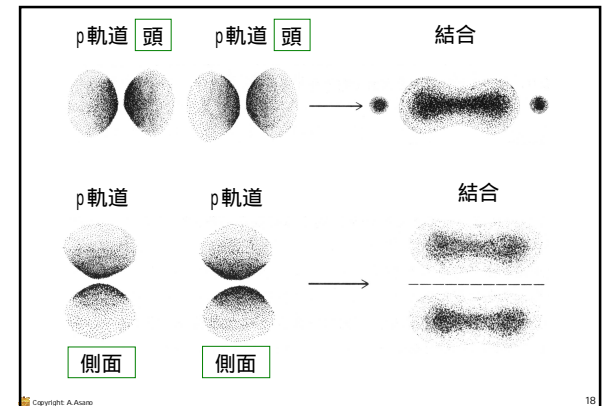
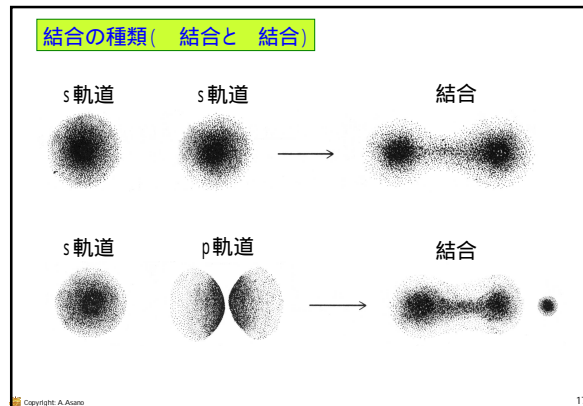
### 共有結合の量子論的な考察

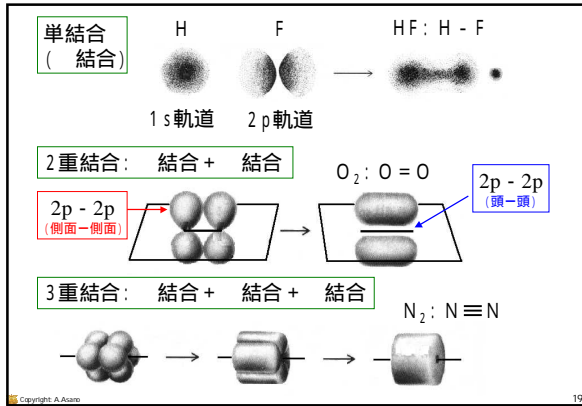
1: 原子価結合理論 (valence-bond method, V B法)

化学結合は、分子になっても各原子に電子が所属していると考ええる。

共有電子対が結合をつくり、この電子対は結合している原子対に属しているとする。

原子軌道の重なりが最大の時、結合を形成。





**2: 分子軌道理論 (molecular-orbital method, MO法)**

**VB法:** 原子が近づいてきて相互作用し、電子雲の最も重なり大きいところで結合ができる。  
 原子核どうしの反応により分子ができるという直感的な描像を与える。

**MO法:** 分子を最初を考えて、原子を配置する。電子は複数の原子がつくるポテンシャルエネルギーの中で一定のエネルギーをもつ分子軌道に入る。

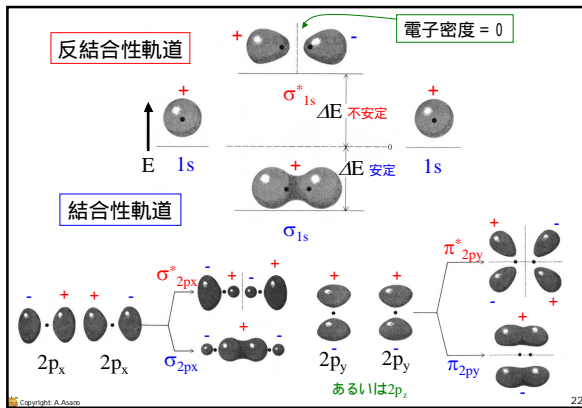
原子軌道で考えたsやp軌道などと同様に、分子軌道というものを考える。直感的な描像は失われるが、分子のイオン化エネルギーや電子親和力などを計算するのに好都合。

**分子軌道** 結合性軌道 (bonding molecular orbital) と 反結合性軌道 (antibonding molecular orbital)

2個の電子で満たされている原子軌道 (s軌道とかp軌道)  $\psi_A$  と  $\psi_B$  がつくる分子軌道は  $\psi_{A+B}$  と  $\psi_{A-B}$  の2種類が存在する。  
 (原子結合の線形結合近似, Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO)近似)

**反結合性軌道**  $\psi_{A-B}$   
 $\psi_A - \psi_B$   $(\psi_A - \psi_B)^2$

**結合性軌道**  $\psi_{A+B}$   
 $\psi_A + \psi_B$   $(\psi_A + \psi_B)^2$



結合ができる = 結合性結合に電子が 2 個入る。  
 結合ができない = 結合性結合と反結合性結合の数がつりあっている。

**O<sub>2</sub> の分子軌道**

結合と結合  $\sigma_{2p}^*$   $\pi_{2py}^*$   $\pi_{2pz}^*$   $\sigma_{2p}$   $\pi_{2py}$   $\pi_{2pz}$

結合に寄与しない、  $\sigma_{2s}^*$   $\sigma_{2s}$   $\sigma_{1s}^*$   $\sigma_{1s}$

核種によりエネルギー順位の逆転がある

0の原子軌道

**混成軌道 (炭素原子、有機化合物)**

<sup>12</sup><sub>6</sub>C (炭素) → 炭素は2価である。でも実際は、共有結合は4個!!

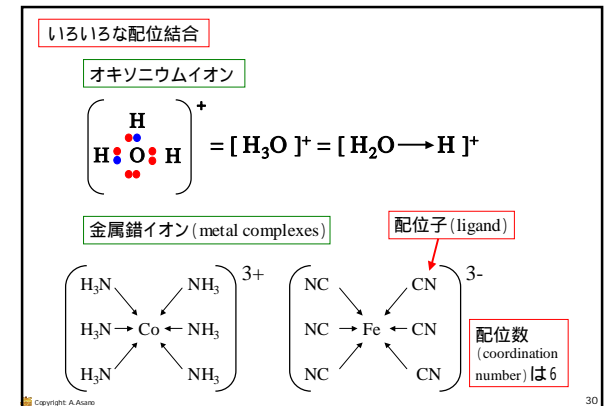
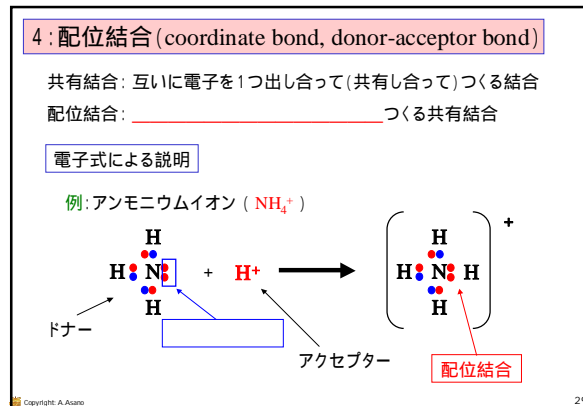
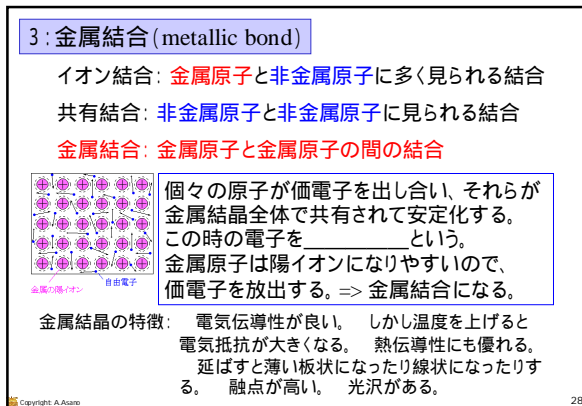
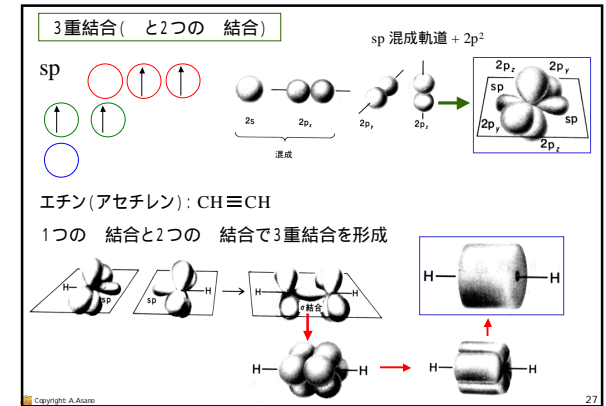
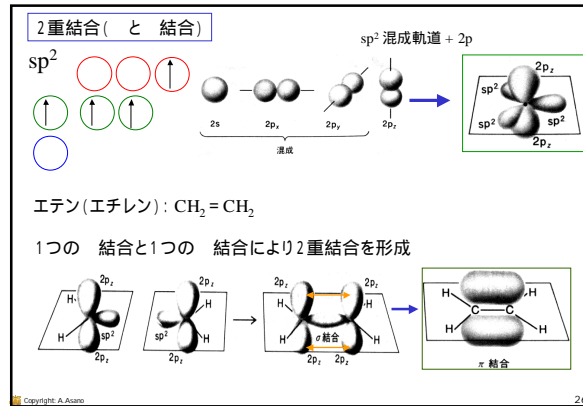
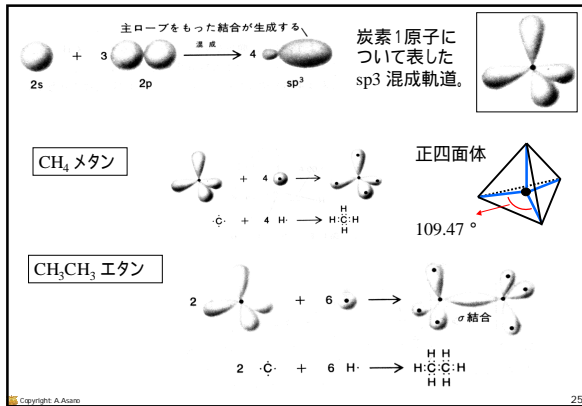
2s  $\uparrow\downarrow$  2p<sub>x</sub>  $\uparrow$  2p<sub>y</sub>  $\uparrow$  2p<sub>z</sub>  $\uparrow$  2p<sup>2</sup>

1s  $\uparrow\downarrow$  2s<sup>2</sup>  $\uparrow\downarrow$  昇位

混成 (hybridization) ( ) 混成軌道

等価な4本の結合 (結合)

主ローブをもった結合が生成する



## 原子の結合(化学結合)まとめ

例: 塩化アンモニウム(NH<sub>4</sub>Cl)

NH<sub>4</sub><sup>+</sup> イオン結合 Cl<sup>-</sup>

陽、陰イオンで安定なものがつくる結合。  
金属-非金属で特に多い、電子対は陰イオンにある。

NH<sub>3</sub> 配位結合 H<sup>+</sup>

片方の原子が電子を2個供給する共有結合。  
遷移金属が作る錯イオンに多い。

NH<sub>2</sub> 共有結合 H

結合をつくる原子が1個づつ電子を出し合い、共有  
電子対をつくる結合形態。非金属-非金属で多い。

金属結合 金属元素どうしが作る結合。無数の正に荷電した金属原子間を  
価電子が自由に動ける。電子は全ての原子に共有されている。  
これを自由電子という。

Copyright A.Azawa

31

## 補遺: 多原子イオン類

複数個の原子で構成されたイオンのこと。多原子イオン中の  
原子間は通常、共有結合であるので、強固であるため分子と  
同様に1つの単位(原子団)として挙動する。

多原子イオンの価数は単原子の価電子を全部加えて、最も近い  
8の倍数になるように電子を加減すれば、だいたいわかる。

OH <sup>-</sup> (水酸化物イオン)	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (硝酸イオン)	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> (炭酸イオン)
6+1=7, 1個+。	5+18=23, 1個+。	4+18=22, 2個+。
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> (硫酸イオン)	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup> (リン酸イオン)	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> (アンモニウムイオン)
6+24=30, 2個+。	5+24=29, 3個+。	5+4=9, 1個-。

Copyright A.Azawa

32