

原子中の電子

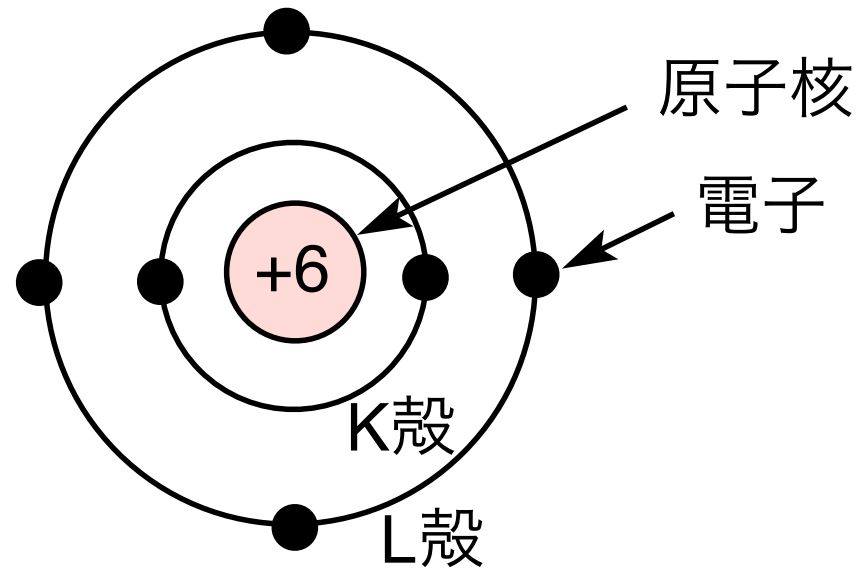
量子力学

原子軌道

殻（電子殻）



原子中の電子の状態



「惑星モデル」には無理があるのでは？

「原子核の周りを電子が回っている」

(Perrin 1901, 長岡 1903, Rutherford 1911)

→ 電磁気学の法則に合わない

「電子は特定の軌道上のみで円運動できる」

(Bohr 1913)

→ スペクトル線などの実験結果は説明できた
しかし物理的根拠は不明



電子は「量子力学」の法則に従う

量子力学 (quantum mechanics)

(Heisenberg 1925, Schrödinger 1926)



Werner K.
Heisenberg*
(1901–1976)



Erwin
Schrödinger**
(1887–1961)

* Photo: Bundesarchiv, Bild
183-R57262, CC-BY-SA 3.0

** Photo: public domain

- 物体は粒子の性質と波の性質を合わせ持つ

- 物体の位置は確率分布で表される

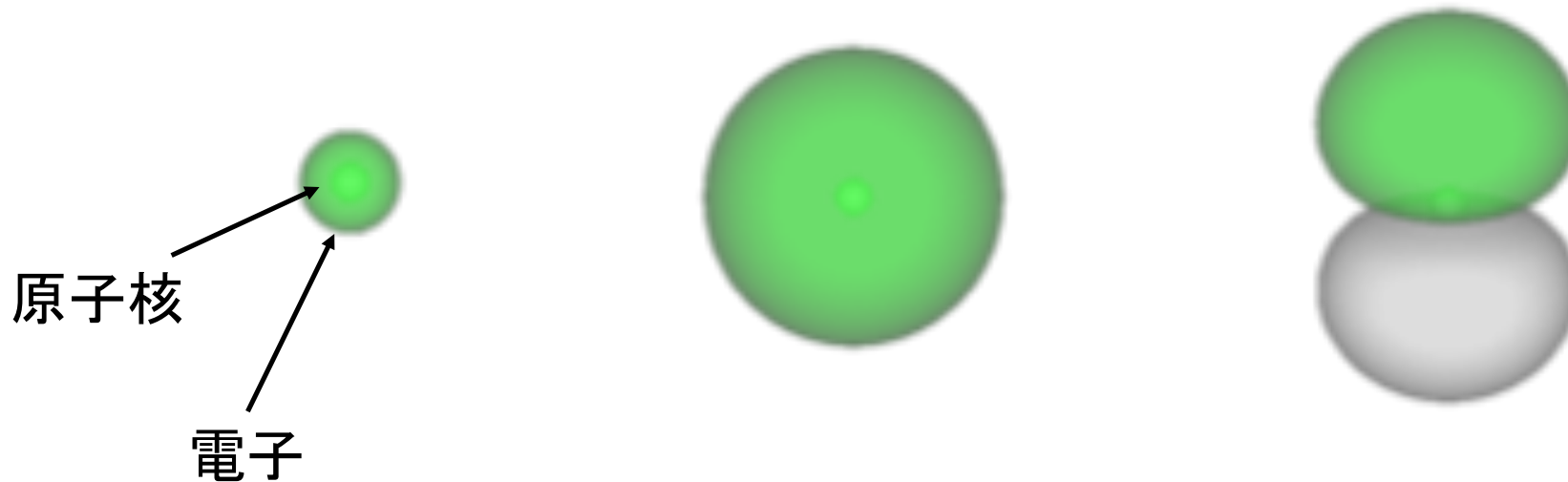
量子力学の理論に基づいて、原子・分子の挙動が合理的に理解できるようになった

(詳しくは「量子化学」で学ぶ)



原子中の電子と原子軌道

- ・ 原子中のそれぞれの電子は、原子核のまわりに、ある決まった空間分布で広がる



「原子軌道」



原子軌道の名前と数

原子軌道は「原子核からの距離」「形」「向き」で分類される

殻	原子軌道
K殻	1s軌道（1個）
L殻	2s軌道（1個）、2p軌道（3個）
M殻	3s軌道（1個）、3p軌道（3個）、 3d軌道（5個）



分子の中の電子を数える

最外殻電子・価電子

共有結合

オクテット則



最外殻電子・価電子

最も外側の殻に入っている電子＝最外殻電子

（原子の場合は「価電子」と「最外殻電子」は同じ）

価電子数	1	3	4	5	6	7
元素の例	H	B	C	N, P	O, S	F, Cl, Br, I

価電子の数が原子の化学的性質を決める（周期律）



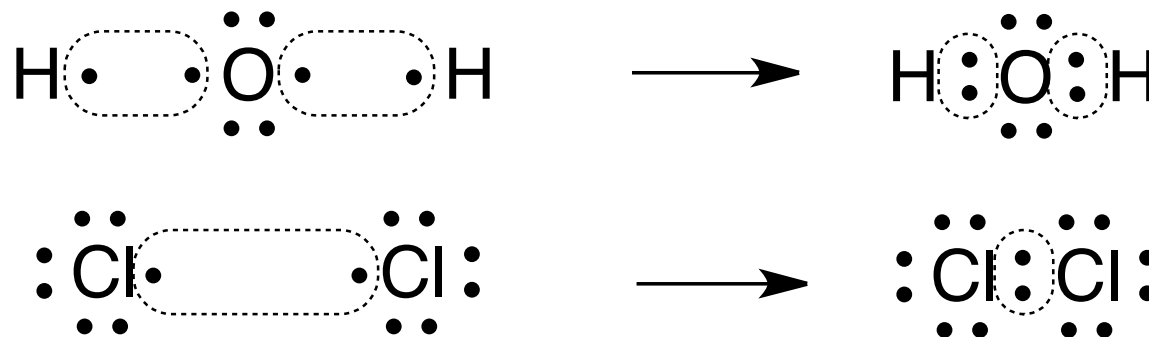
共有結合

二つの原子が価電子を 1 個ずつ出し合って共有する

||

結合ができる

共有結合



なぜ「結合ができる」のか？→原子軌道で説明できる（次回）



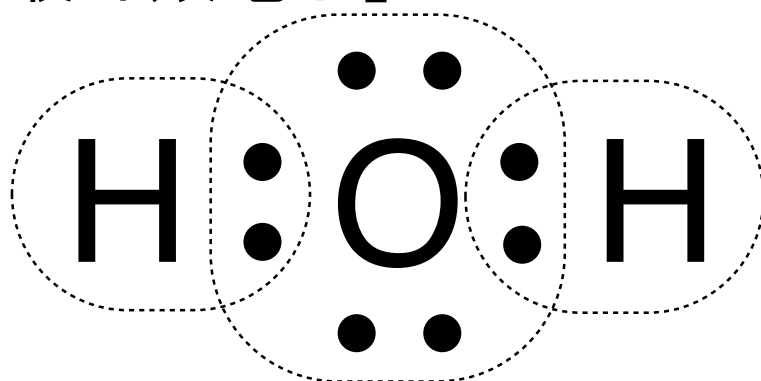
分子中の原子の「最外殻電子」と「価電子」

分子中の原子について、次のように約束する。

「最外殻電子」：共有している電子を「2個」と数える

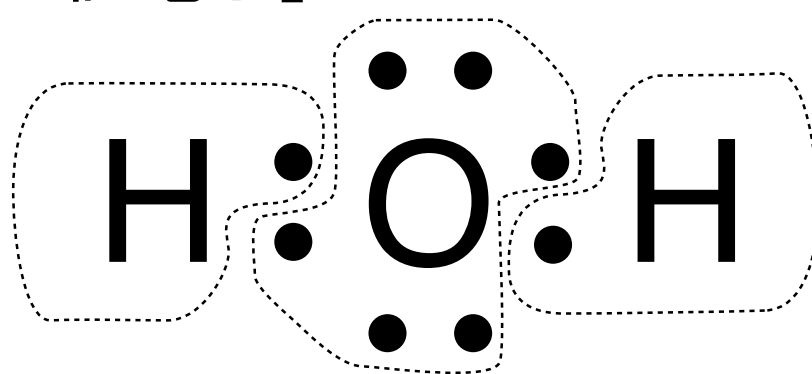
「価電子」：共有している電子を「1個」と数える

「最外殻電子」



2個 8個 2個

「価電子」



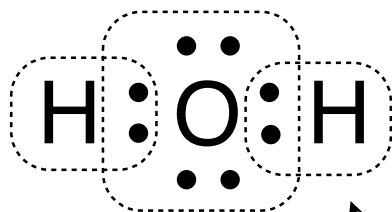
1個 6個 1個

注意：分子の中の原子の価電子の数は、単独原子の価電子の数と一致するとは限らない（後で説明します）

オクテット則

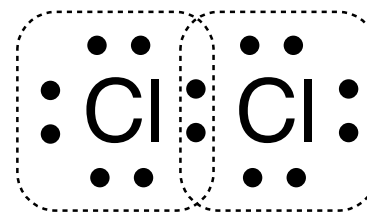
多くの分子について、各原子の「最外殻電子」数は
8 個になる＝オクテット則

(※ 水素原子は 2 個)



「Oの最外殻電子」= 8 個

「Hの最外殻電子」= 2 個



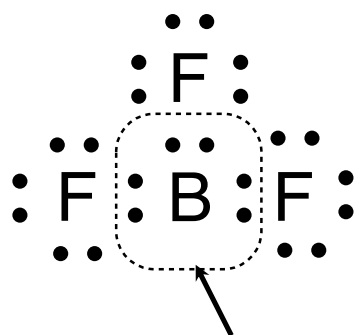
「Clの最外殻電子」= 8 個

なぜ「8 個になる」のか？→原子軌道で説明できる（次回）

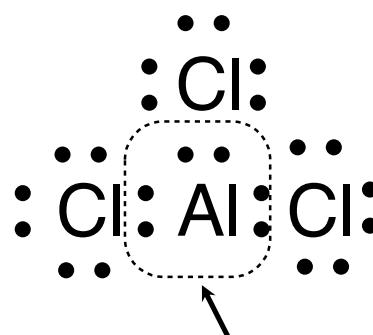


オクテット則の例外 (1)

- 最外殻電子が6個、4個の場合
(価電子の少ない元素で起きる)

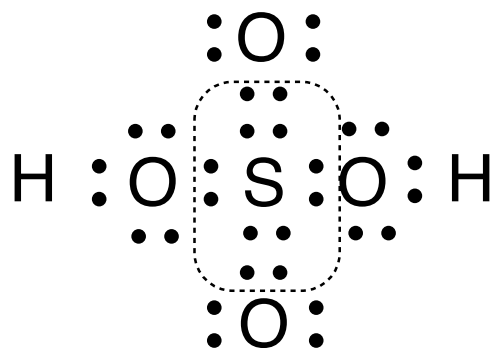


「Bの最外殻電子」 = 6 個

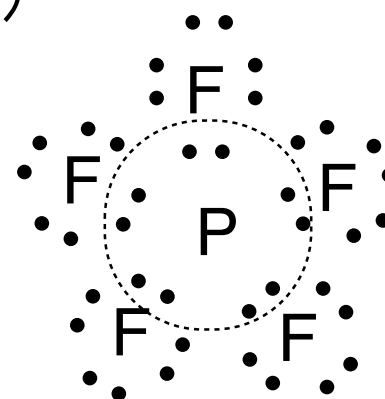


「Alの最外殻電子」 = 6 個

- 最外殻電子が10個、12個の場合
(第3周期以降の元素で起きる)



「Sの最外殻電子」 = 12 個

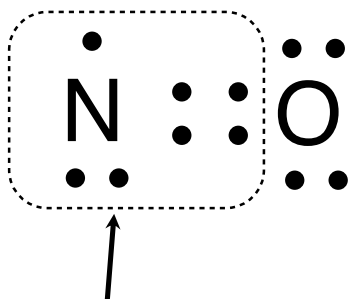


「Pの最外殻電子」 = 10 個

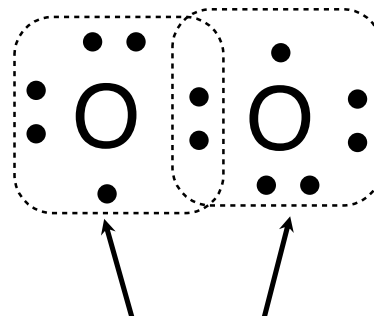


オクテット則の例外 (2)

- ・ 不対電子（対を作っていない電子）がある場合

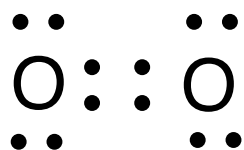


「Nの最外殻電子」 = 7 個



「Oの最外殻電子」 = 7 個

O₂ は「特別な例外」！



←こうはならない
(理由は「量子化学」で学ぶ)

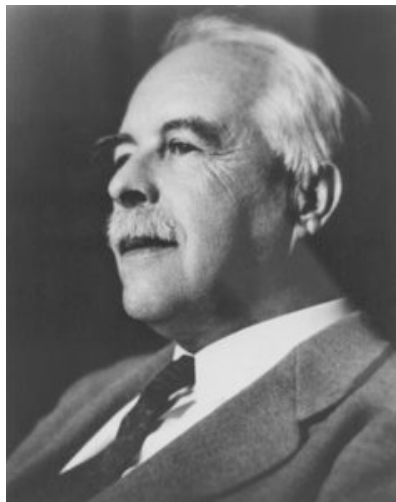
参考：酸素が不対電子を持つことを示す実験

<https://site.ngk.co.jp/lab/no266/> (日本ガイシ サイエンスサイト) 

ルイス構造

ルイス構造の作り方

形式電荷



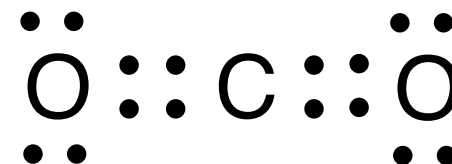
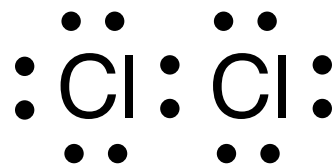
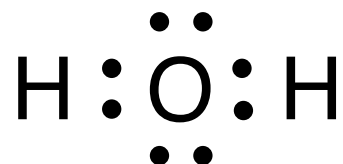
Gilbert N. Lewis
(1875–1946)

Photo:
<https://foundation.alphachisigma.org/page.aspx?pid=1452>
(fair use)



ルイス構造

- 高校化学の「電子式」と同じ

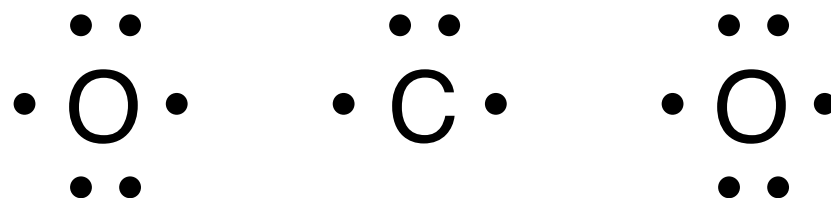


- 価電子を点で表す
- 共有結合の電子は二つの原子の間に書く
- 「対」（つい）を作っている電子は二つ並べて書く

※ 電子が「対を作る」とは、「スピンを逆向きにして同じ軌道に入る」こと（次回に学びます）



ルイス構造の作り方



価電子数

O 6個

C 4個

O 6個

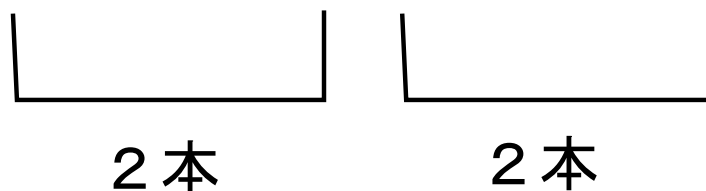
オクテットに足りない数

O 2個

C 4個

O 2個

共有結合を作る

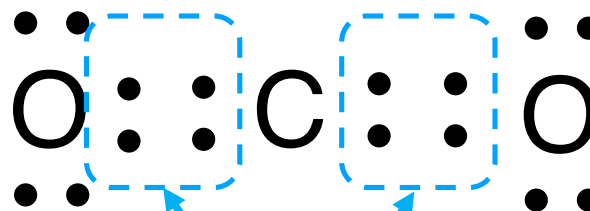


最外殻電子数

O 8個

C 8個

O 8個



二重結合

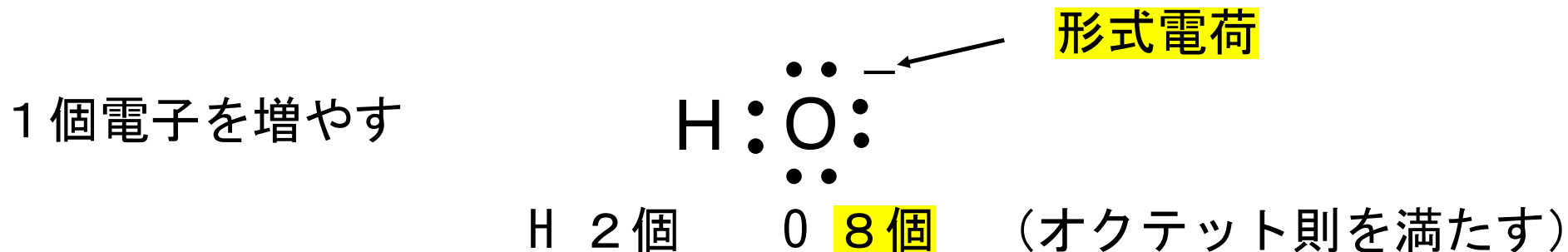
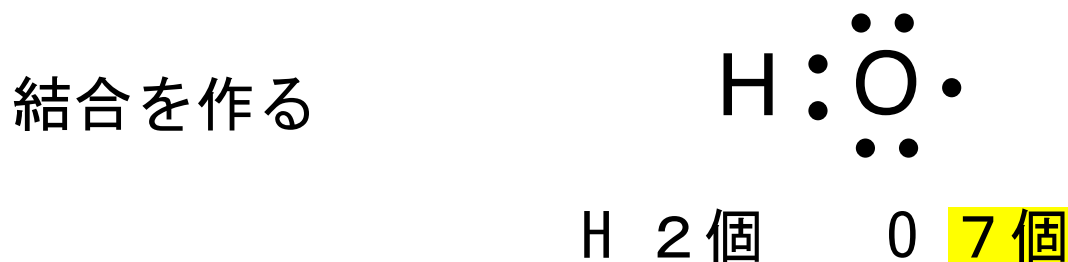
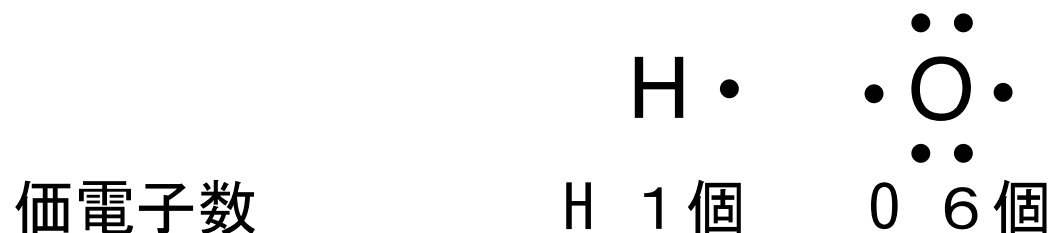


形式電荷：水酸化物イオン

- 「電荷を持つ分子」（分子イオン）のルイス構造は？

例：HO⁻（水酸化物イオン）

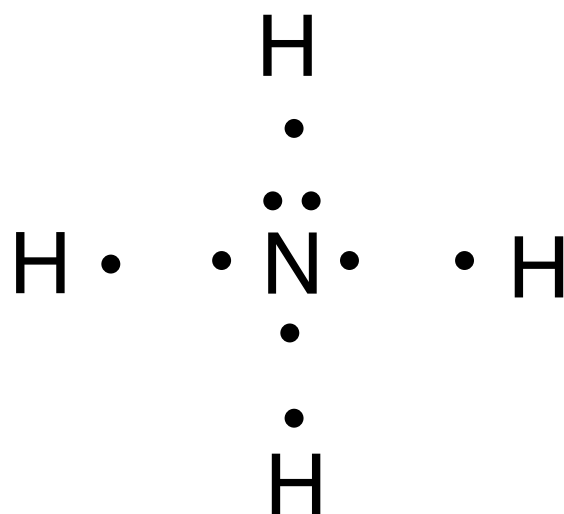
「-1」の電荷を持つ → 電子が1つ多い



形式電荷：アンモニウムイオン

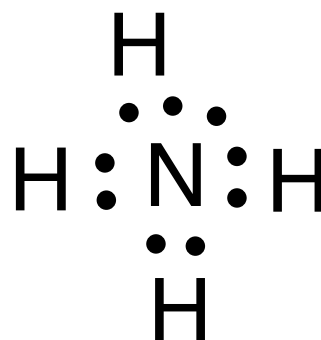
例：NH₄⁺（アンモニウムイオン）

「+1」の電荷を持つ → 電子が1つ少ない



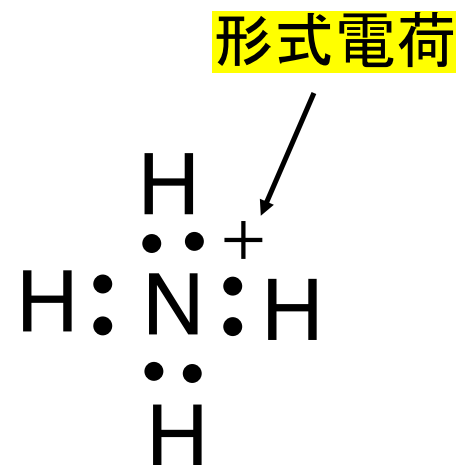
価電子数

H 1個 N 5個



結合を作る

H 2個 N 9個



電子を1個減らす

H 2個 N 8個

(オクテット則を満たす)

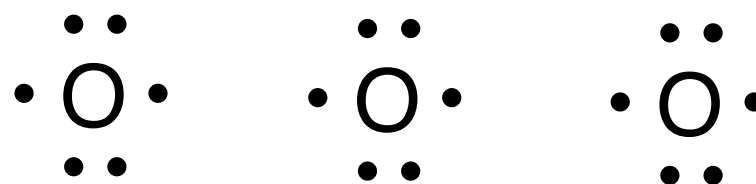
分子内で電子を「貸し借り」するケース

分子内の原子間で、電子を「貸し借り」する場合がある

例：O₃（オゾン） O-O-O の鎖状構造（環状構造ではない）

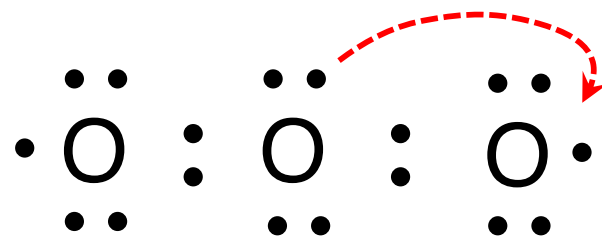
価電子数

6, 6, 6



結合を作る

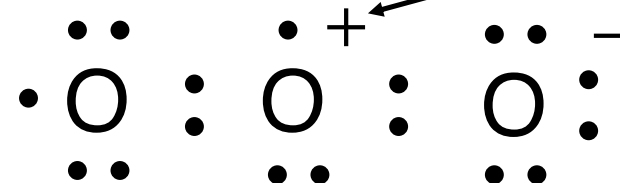
7, 8, 7



形式電荷

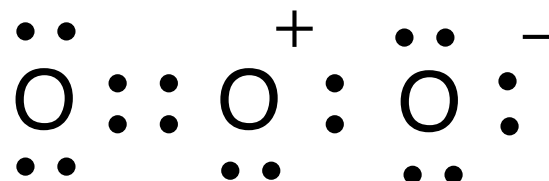
電子の貸し借り

7, 7, 8



結合を作る

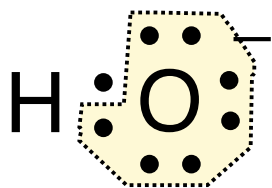
8, 8, 8



形式電荷とは何か？

形式電荷：「分子中の原子の価電子数と、その原子が単独で存在するときの価電子数の差」

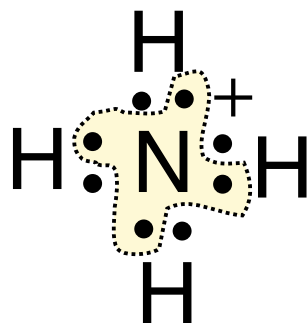
（分子中の原子の方が電子が多ければマイナス、少なければプラス）



Oの価電子数 = 7 個

中性原子のOの価電子数 = 6 個

形式電荷 = - 1



Nの価電子数 = 4 個

中性原子のNの価電子数 = 5 個

形式電荷 = + 1

【練習問題】 次の物質のルイス構造を書きなさい。

1. CH_2O (ホルムアルデヒド)

※ O, 2つの H がそれぞれ C に結合



【練習問題】 次の物質のルイス構造を書きなさい。

2. CH_3O^- (メトキシドイオン)

※ O, 3つの H がそれぞれ C に結合

【練習問題】 次の物質のルイス構造を書きなさい。

3. HNO_3 (硝酸)

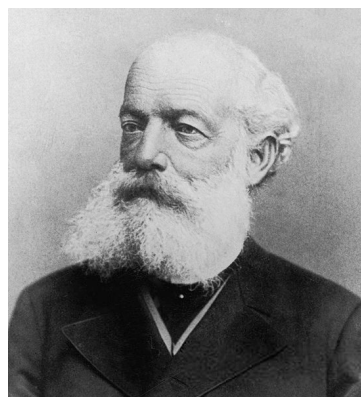
※ Oは3つともNに結合、HはOに結合

有機分子の構造の表記

ケクレ構造

ローンペア

簡略構造



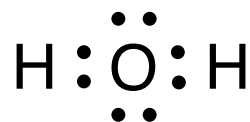
Friedrich A. Kekulé
(1875–1946)

Photo: public domain



ケクレ構造（ケクレ式）

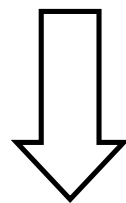
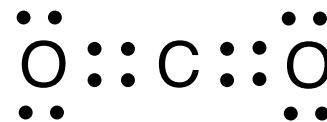
水



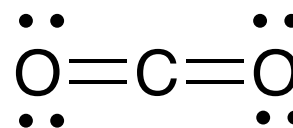
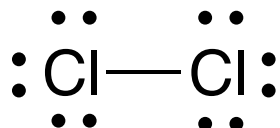
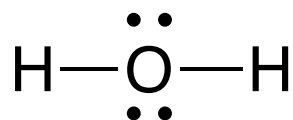
塩素



二酸化炭素



共有結合を作る 2 個の電子を
1 本の線で表す



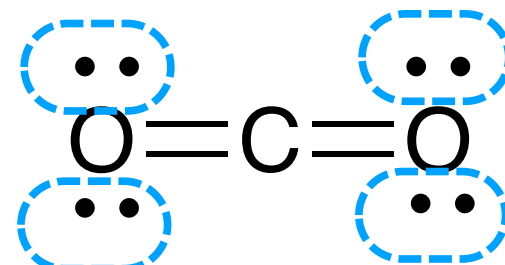
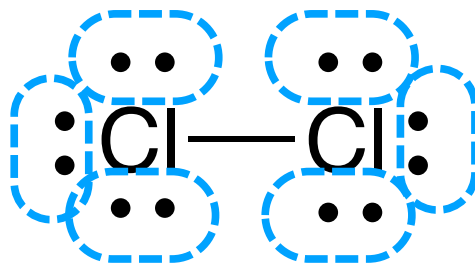
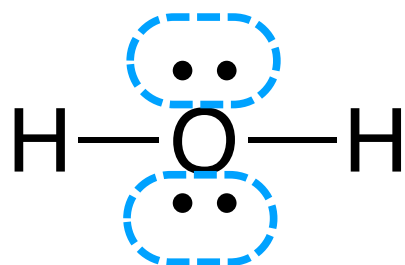
ケクレ構造

※ ブルースの教科書では、これらの構造式も「ルイス構造」と呼ぶ

※ 「結合線を見たら共有電子 2 個と思え」 ← 重要！



ローンペア



最外殻電子の中で、他の原子と共有されずに、一つの原子上で対を作っているもの＝ローンペア

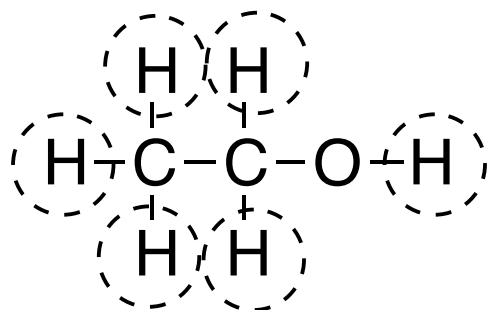
- ※ 「ローンペア」＝「非共有電子対」＝「孤立電子対」
すべて同じ意味。本講義では「ローンペア」に統一する
- ※ ローンペアの電子は「エネルギーが高い」
→化学反応に関与しやすい



簡略構造

有機化合物の構造を簡便に書く方法の一つ

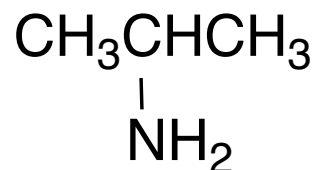
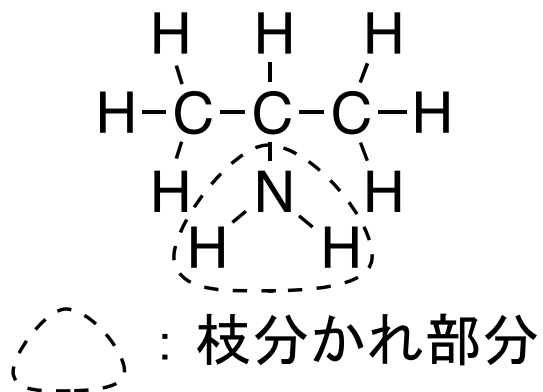
「1個の原子とだけ結合している」原子を、その相手の原子とまとめて書く



 1個の原子とだけ
結合している原子



簡略構造（枝分かれがある場合）



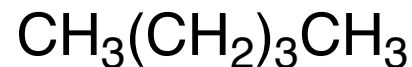
結合線を出す



枝分かれ部分を「1つの原子」のように扱う

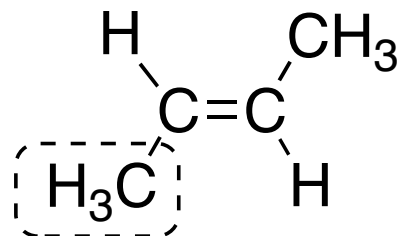
カッコの使い方①：
「1つの原子」と見なす

カッコの使い方②：繰り返し構造を表す

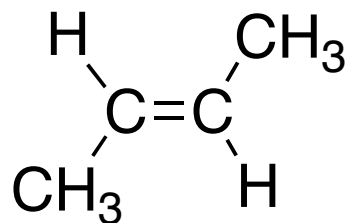


簡略構造（グループが左端にあるとき）

メチル基が左端にある場合

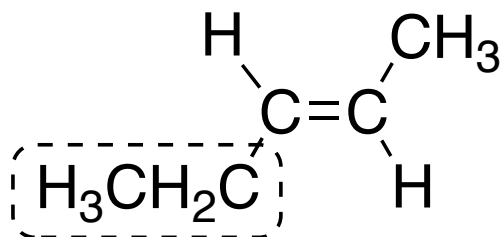


末端原子を先に書く

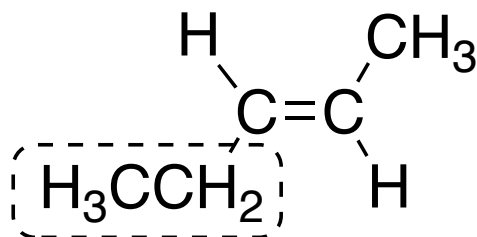


これでも間違いではない

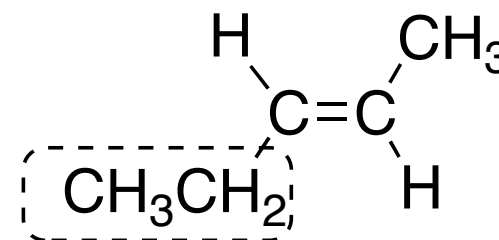
エチル基だとうか？



よろしくない



間違っていないが
美しくない



これがベスト

