

宿題 1 1

1. エタン、エチレン、アセチレンおよびベンゼンの分子構造について、次の間に答えなさい。

(1) C-C結合の長さの大小関係について、理由をつけて説明しなさい。

エタンの二つの炭素は sp^3 混成軌道をとる。C-C間の単結合は、 $C_{sp^3} - C_{sp^3}$ による結合である。エチレンの二つの炭素は sp^2 混成軌道をとる。C-C間の結合は、 $C_{sp^2} - C_{sp^2}$ による結合と $C_{p_z} - C_{p_z}$ (但し、各炭素が持つ3つの sp^2 混成軌道が xy 平面上にあるとした場合) による結合の二重結合である。アセチレンの二つの炭素は、 sp 混成軌道をとる。C-C間の結合は、 $C_{sp} - C_{sp}$ による結合と $C_{p_y} - C_{p_y}$ および $C_{p_z} - C_{p_z}$ (但し、各炭素の二つの sp 混成軌道が x 軸方向にあるとした場合) による二つの結合からなる三重結合である。従って、C-C間の結合距離はエタン > エチレン > アセチレンの大小関係があることがわかる。

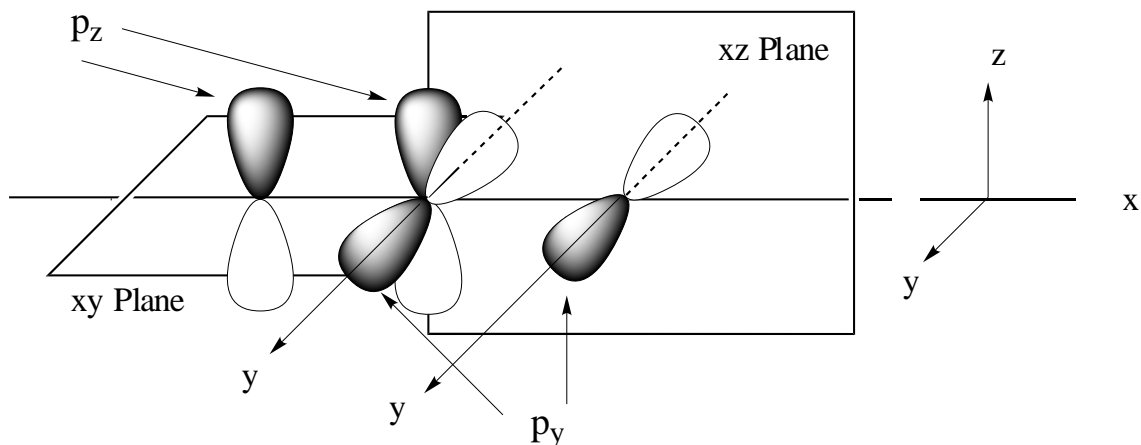
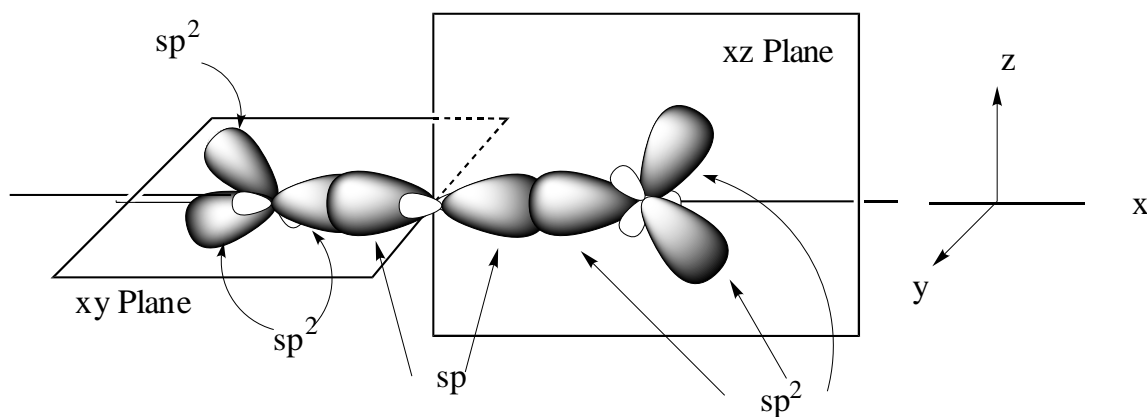
一方、ベンゼンでは各炭素は sp^2 混成軌道をとる、エチレンと同様の $C_{sp^2} - C_{sp^2}$ による結合が6つのC-C間に存在する。ベンゼン環平面を xy 平面上にとると、残った6つの p_z 軌道は環平面に垂直方向 (z 軸方向) に並ぶことになる。この6つの p_z 軌道は、両隣の p_z 軌道と均等に重なり合い結合を生じる。その結果、6つの電子 (結合にある電子) はベンゼン環の上下に均等に広がった電子雲を形成する。これを共鳴しているという。従って、6つのC-C結合は全て等価となり、結合距離は2重結合と単結合の中間の値をとるものと予測できる (1.5重結合と称するような結合)。

従って、全ての4つの分子のC-C間結合距離の大小関係は、エタン > ベンゼン > エチレン > アセチレンとなる。

(2) C-C-H結合角の大きさを、混成軌道の考えを用いてそれぞれの分子について推定しなさい。

混成軌道の概念から、エタンのC-C-Hの結合角は sp^3 混成軌道間の角度に等しいと推測でき、 109.28° である。エチレンおよびベンゼンのC-C-Hの結合角は、 sp^2 混成軌道間の角度と見なすことができ、 120° と推定できる。同様に、アセチレンのC-C-Hの結合角は、 sp 混成軌道間の角度 180° と推定できる。

2. アレン ($\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$) の電子構造を示し、その分子構造を説明しなさい。
 ヒント：アレンの両末端の炭素は sp^2 混成軌道をとるとして考えなさい。また $\text{C}-\text{C}-\text{C}$ は直線である。



電子構造の概略図は上のようである。

上の図には、結合部分のみを、下には結合部分のみを記している。

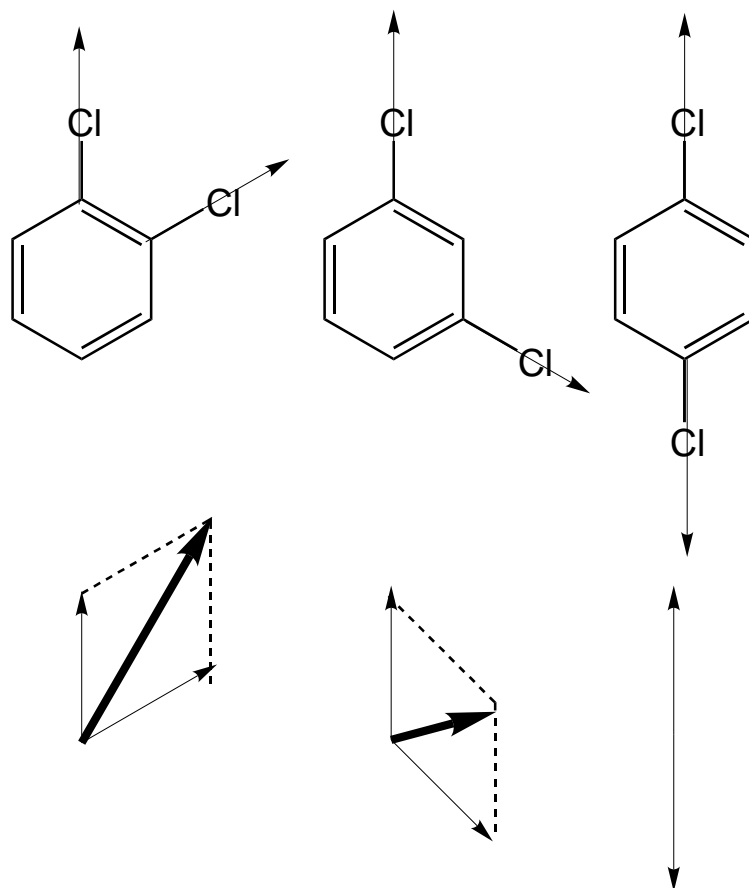
末端の炭素は sp^2 混成軌道、中央の炭素は sp 混成軌道をとっている。

アレンの左側の $\text{C}-\text{C}$ 2重結合は、 $C_{sp^2}-C_{sp}$ による結合と $C_{p_z}-C_{p_z}$ による結合からなり、右側の $\text{C}-\text{C}$ 2重結合は $C_{sp^2}-C_{sp}$ による結合と $C_{p_y}-C_{p_y}$ による結合からなっている。

図からわかるように、二つの $\text{H}_2\text{C}=\text{C}$ 面は互いに直交している。

3. モノクロロベンゼンの双極子モーメントは、 $5.7 \times 10^{-30} \text{ Cm}$ である。
 オルト、メタおよびパラジクロロベンゼンの双極子モーメントを推定しなさい。
 但し、C - Cl結合の極性が双極子モーメントの主な原因であるとする。つまり、C - H結合の極性を無視しなさいということです。双極子モーメントは、C - Cl結合の極性だけによるものと仮定して考えなさいということです。

分子の双極子モーメントがベクトルであり、C - Cl結合の極性にだけよるものと仮定すると、次のように予測できる。



即ち、C - Clの極性に起因する双極子モーメントのベクトルを合成することにより、それぞれの分子の持つ双極子モーメントを推定できる。

オルト : $\sqrt{3} \times (\text{mono}) = 9.9 \times 10^{-30} \text{ Cm}$
 メタ : $= (\text{mono}) = 5.7 \times 10^{-30} \text{ Cm}$
 パラ : $= 0$