

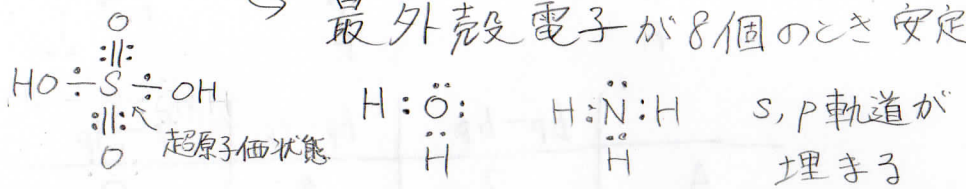
超原子価化合物の立体構造

★ 超原子価化合物とは?

形式的に原子価殻に9個以上の電子を持つ典型原素を含む化合物

→ オクテット則に反して、もっと多くの電子をもつ

→ 最外殻電子が8個のとき安定



★ 超原子価化合物の例

$\text{PCl}_5, \text{SF}_4, \text{SF}_6, \text{ClF}_3, \text{H}_3\text{PO}_4, \text{H}_2\text{SO}_4$

これらの立体構造は??

混成軌道 → sp^3 (4方向)まで

★ VS EPR 則

(Valence Shell Electron Pair Repulsion)
原子価殻電子対間反発

電子対間の反発は、その電子対の属性(共有か孤立か)の組み合わせで変わり、化合物は最も反発が小さい立体構造をとる。

電子対間反発

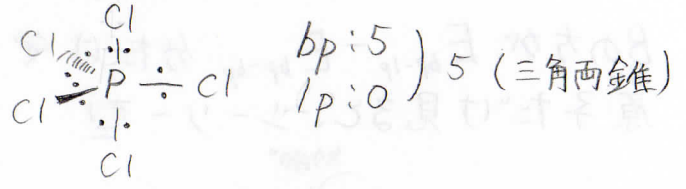
$bp - bp < bp - lp < lp - lp$
 lp: lone pair
 bp: bonding pair

★ 反発が小さい立体構造

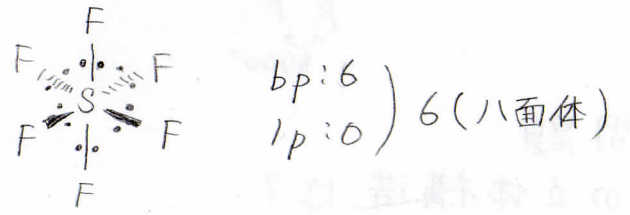
n: 電子対数

- n=2 直線
- n=3 平面
- n=4 四面体
- n=5 三角両錐
- n=6 八面体
- n=7 五角両錐

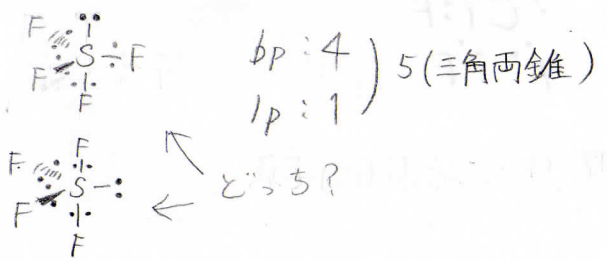
例) PCl_5

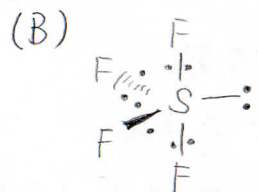
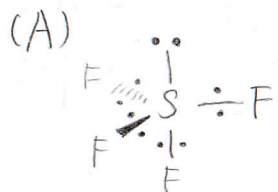


• SF_6



• SF_4





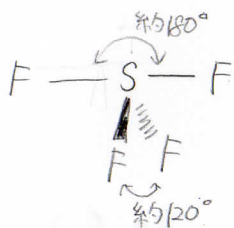
答え

bp: 3
lp: 2) 5 (三角両錐)

角度が 120°, 180° のものは反発小さいとして無視
90° のものだけ数える

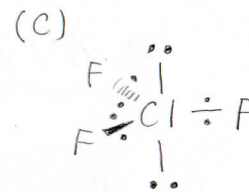
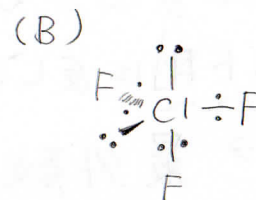
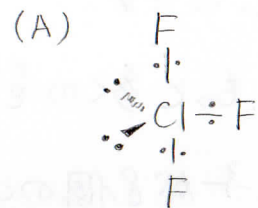
反発 小 ← → 大	bp-bp	bp-lp	lp-lp
A	3	3	0
B	4	2	0

Bの方が $E_{bp-lp} - E_{bp-bp}$ 分だけ安定
原子だけ見ると、ソーソー型



練習問題

ClF₃ の立体構造は?



	bp-bp	bp-lp	lp-lp
A	2	4	0
B	2	3	1
C	0	6	0

AはBより $E_{lp-lp} - E_{bp-lp}$ だけ安定

AはCより $2(E_{bp-lp} - E_{bp-bp})$ だけ安定

したがって A が 最安定

原子だけ見ると T字型

