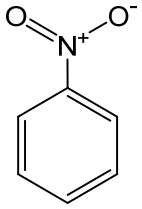
典型元素化合物の構造推定法

（１）形式的な原子価結合構造を描く。

① オクテット則に従った構造を描く。原子価電子(酸素なら 6)を結合に割り当てて、残りは非共有電子対(Lone pair)。

② 本来の手の数よりも結合が多い原子は＋、少ない原子は－。(N は本来 3、O は本来 2。)



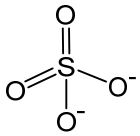
共鳴構造によって N－O は等価。全体では電荷ゼロ。

③ 3p 以上の原子ではハイパーバレント(超原子価)の場合がある。(S は手 2 本に加えて 4 本、6 本もあり。原子価電子を全部結合に使うことができる。(④参照)

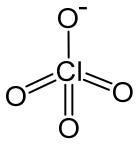
(2) VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion)で構造を推定。

④ 結合と非共有電子対を区別せずに空間的に均等配置。2→直線、3→平面三角形、4→正四面体、5→三方両錐（or 四方錐)、6→正八面体

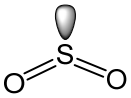
平面三角形
(非共有電子対なし)



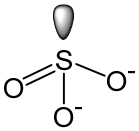
正四面体
(共鳴により等価)



正四面体

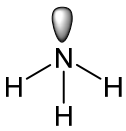


屈曲



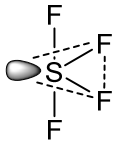
正四面体→三方錐

⑤ 結合間の反発は､非共有電子対＞三重結合＞二重結合＞一重結合（原子に付いている電子数の多い順に大きい。)

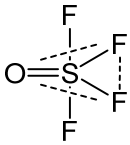


正四面体→三方錐
∠H－N－H＝107.8°
＜109.5°

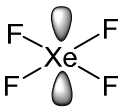
三方両錐ではアキシャルよりもエクアトリアルの方が空いている。
非共有電子対はなるべく離して配置する。



三方両錐



三方両錐



正八面体→平面四角形　(Xe は原子価電子 8)

非共有電子対も含めた「目に見えない構造」をいったん考えることによって、屈曲したり非平面になったりすることが予測できる。