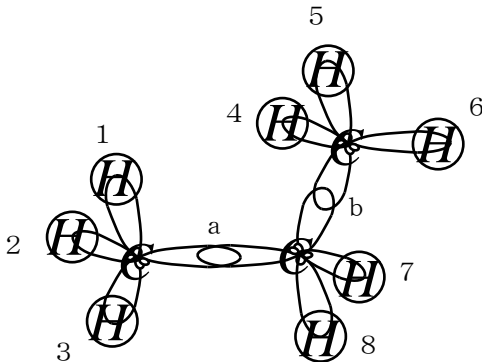
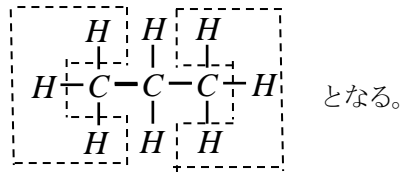


分子の構造を考える①

プロパン C_3H_8



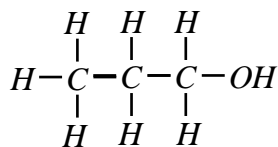
プロパンの構造を考えると、すべて単結合で分子が構成されているので、3つの炭素原子は sp^3 混成軌道であることがわかる。立体的に考えると上の図のような構造となる。ここで、構造式も表してみると



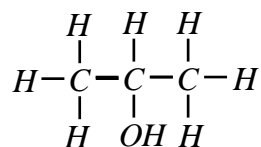
構造式において、左の点線で囲まれた3つの水素原子について考える。これは始めの立体的な構造の図では1～3の水素となる。これはエタンのときと同様にaの σ 結合が回転するために区別することができない。また、右の点線で囲まれた3つの水素原子(4～6)についてもbの σ 結合が回転するために区別することができない。さらに分子が左右対称であるために1～3と4～6の区別はできず、6つの水素原子は全て同じ立場であることがわかる。

次に、点線で囲まれていない2つの水素原子(7、8)について考える。この2原子も左右対称であることを考慮すると区別することができないが、明らかに1～6の水素原子とは立場が異なることがわかる。

つまりプロパンの水素原子には2つの立場があることになる。ここでそれぞれの立場の水素をヒドロキシ基($-OH$)に置き換えてアルコールとすると、2種類のアルコールが存在することになる。



1-プロパノール



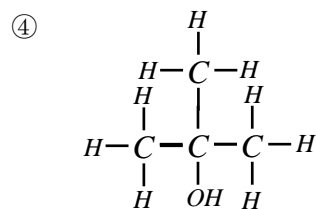
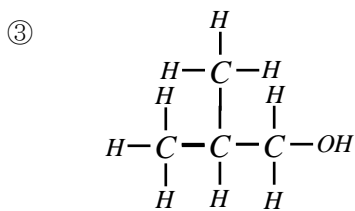
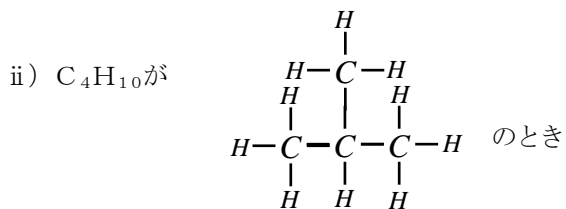
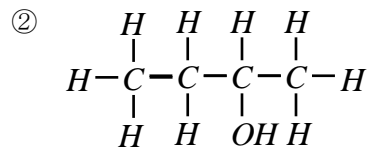
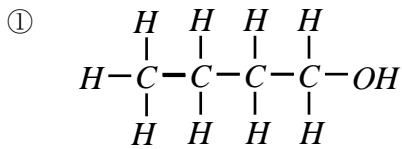
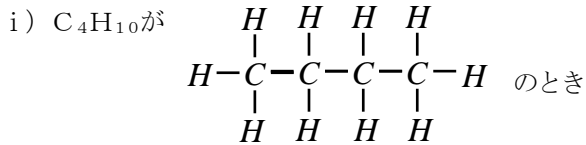
2-プロパノール

練習問題

C_4H_9OH の構造は何種類か

基本方針… C_4H_{10} のHの立場が何種類あるか考える。

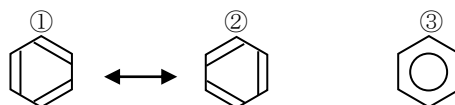
注意点… C_4H_{10} の構造は1種類ではない



分子の構造を考える②

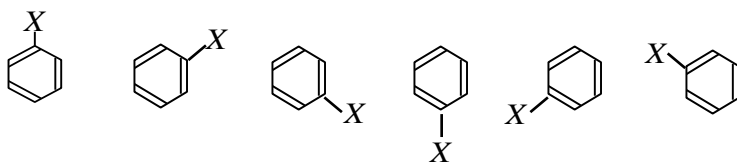
ベンゼン C_6H_6

ベンゼン環は①、②のように表されることが多いことは述



べた通りである。ここでのポイントは①と②の構造は同じであり、区別できないということである。一般的には炭素原子間の結合は $C \equiv C < C = C < C - C$ と結合が多くなるにつれて強く結合するために原子間距離は小さくなっていく。従って①や②のような表現をすると六角形の辺で長さの違いが生じるように感じるかもしれない。ところが混成軌道の項目でも述べたように二重結合の位置は固定されておらず、6個の軌道のつながりに6個の電子（結合3個分）が存在している。このように非局在化することによってベンゼン環は安定化している。つまり六角形の6つの辺は全く同じ結合であり、区別することはできない。そこで次のようなベンゼンの置換体（ベンゼンの水素原子を他の原子に置き換えた分子）に次に考えてみよう。

i) 一置換体

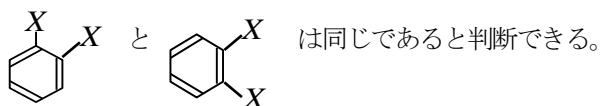


この6つの構造が考えられるが、すべての辺が区別できないことを考慮すると、回転させることによって全く同じ構造であることがわかる。

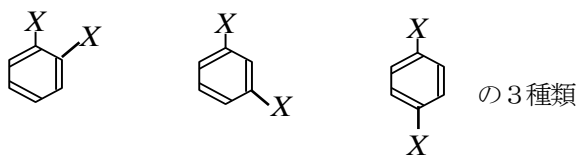
→ 一置換体は1種類

ii) 二置換体

先ほどと同様に辺が区別できないことと回転させることを考慮すると



よって二置換体は



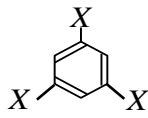
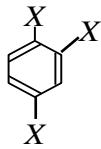
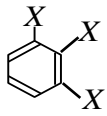
(オルト)

(メタ)

(パラ)

練習問題

ベンゼンの三置換体は何種類か



の3種類