

分子間力と分子間相互作用 その3 誘起双極子モーメント

分子間相互作用を理解するために、もうちょっとだけ知識を入れます。双極子モーメントと似たもので“誘起双極子モーメント induced dipole moment”というものがあります。数式を使った細かい議論は抜きにして誘起双極子モーメントを直観的に考えてみましょう。

その2の講義でもふれましたが、“永久双極子モーメント”（高校化学では単に双極子モーメントと書かれています）を持つアンモニア“ NH_3 ”は極性分子です。さて、想像してください。 NH_3 が固定された正電荷“+”にフラフラと近づいていくことを考えてみます。当然何も考えていない NH_3 はとりあえず+に近づいています。しかしながら、 NH_3 は途中で何となく引っ張られていることに気づきます。知らないうちに NH_3 は回転していることに気づきます。+に対し NH_3 の永久双極子モーメントの“ δ^- ”を向いて引っ張られて近づいていることに気づきます。想像できましたか（笑）。それでは CH_4 ではどうでしょう。 CH_4 は永久双極子モーメントを持たない無極性分子です。 NH_3 と同じように特に何も考えないで+にフラフラと近づいていくとします。でも途中から CH_4 は気づきはじめます。なんだか、体の一部が δ^- と δ^+ に分極していることに。無極性分子である CH_4 がフラフラと+に近づいていき、+が CH_4 を誘ったら CH_4 はその気になってしまったといった感じです（笑）。つまり、 CH_4 が誘惑されてしまった結果、双極子モーメントを生じてしまったということです。化学では誘惑されたとは言わず“誘起された”と言います。このように誘起された双極子モーメントは“誘起双極子モーメント”と言います。したがって、+に引き寄せられていくうちに、無極性分子である CH_4 は誘起双極子モーメントを持ってしまったということです。

分子が電荷に近づいていくと、たとえそれが無極性分子であっても分極してしまった、双極子モーメントを生じてしまったということですが、実は永久双極子モーメントの影響でも誘起双極子モーメントは生じます。極性分子である NH_3 に無極性分子 CH_4 が近づいて行くことを想像してください。何となくはわかりますよね。 NH_3 の双極子モーメントの δ^- 側でも δ^+ 側でもどちら側からでも構いませんが、 CH_4 がフラフラと近づいていくとします。やっぱり CH_4 に誘起双極子モーメントが生じてしまいました。誘起双極子モーメントは電荷だけでなく、永久双極子モーメントの偏った電荷によっても生じるということです。さらにもう1つ。 CH_4 がたまたま電荷の近くにいたため CH_4 に誘起双極子モーメントが生じたとします。誘起双極子モーメントが生じた CH_4 に、たまたま水素“ H_2 ”が近づいていくとします。今度は H_2 に誘起双極子モーメントが生じてしまいました。極端な話、永久双極子モーメントを持つ分子が電荷に近づいて行っても、その永久双極子モーメントを持つ分

子にはさらに誘起双極子モーメントが生じてしまいます。

電荷は自身の周りに自分の力を誇示するような電氣的な勢力場のようなものを持っています。その勢力場は“電場 electric field”と言い、電場に他の電荷が近づいてくるとその電荷は力を受けます。この電場というのが誘起双極子モーメントを生じさせる原因です。電子は電荷を持つので電場を持っています。電荷に無極性分子が近づくと、極性の無い分子とはいえ電子は持っているのです、その電子が力を受けて、無極性分子の電子雲に偏りが生じる、つまり分極してしまうということです。それは勿論、貴ガス原子も例外ではありません。貴ガス原子も永久双極子モーメントはゼロですが、当然ながら電子を持っています。ということは貴ガスが電荷に近づくと、貴ガスの電子雲が力を受けて分極し、誘起双極子モーメントが生じてしまうということです。結局、原子や分子の体積の起源は電子です。原子・分子が電荷に近づくと、その電場による力を受けた結果、綺麗な真ん丸のサッカーボールのような貴ガス原子でも、歪んだラグビーボールのような楕円球になるということです。

どうでしょうか。結構難しかったかな。これで分子間相互作用を考えるための準備できました。最後に、なんで双極子モーメントじゃなくて、なんで“永久”双極子モーメントなのか、その意味は分かりましたよね（笑）。