

## 分子間力と分子間相互作用 その2 分極と双極子モーメント

その1の講義で分子間力とは、分子間相互作用の結果として生じる分子間の力であることがわかりましたか。分子間相互作用を考えるための重要な内容として、分子の“分極 polarization と双極子モーメント dipole moment”があります。高校の教科書や資料では必ず取り扱われている内容なのでわかっていると思いますが、今回ちょっとだけプラスして講義します。

分子は全体として電氣的に中性です。分子を構成する原子には“電気陰性度”という性質がありました。同じ種類の原子からなる2原子分子は電気陰性度に差はないので分極することはありません。種類の異なる2原子分子では電気陰性度が異なるため分極します。そのような分子の分極した状態を表すために双極子モーメントが使われます。双極子モーメントを使うと分子間相互作用を議論するのに便利なので、大学では当たり前のように使われます。

電気陰性度の異なる2つの原子が共有結合すると、結合部分の電子雲が電気陰性度の大きな原子に引き付けられ、分子全体の電子雲にかたよりが生じ、分極した状態になります。例えば、塩化水素“HCl”を構成しているH原子とCl原子の電気陰性度はそれぞれ、2.2と3.2という値です。その結果として、図1に示したように、“電子雲”にかたよりが生じ分極した状態になります。H原子とCl原子の電気陰性度を比べると、H原子はその値が小さ

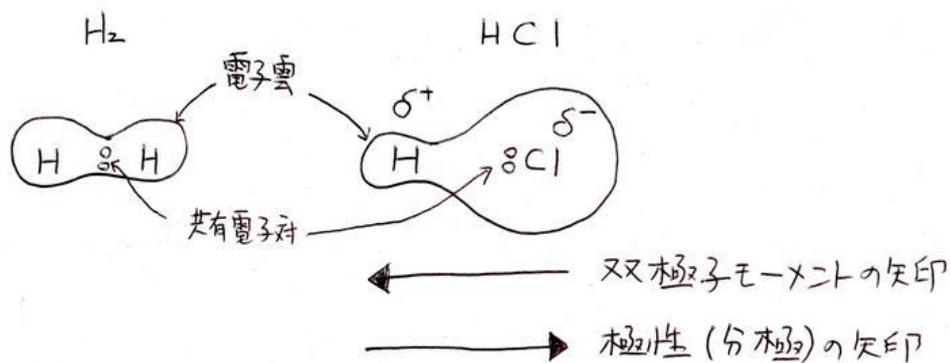


図1

いためちょっとだけ正に帯電“ $\delta^+$ ”し、Cl原子はちょっとだけ負に帯電“ $\delta^-$ ”します。その分子内の電荷のかたよりによって“永久双極子モーメント permanent dipole moment”（高校の教科書や資料では単に双極子モーメントと書かれているのでそのように呼ぶことにします）を持ち、そのような双極子モーメントを持つ分子を“極性分子 polar molecule”と言いました。HClは双極子モーメントを持つので極性分子です。図1に示したように、一般的に双極子モーメントは矢印（ベクトル）を使って表現します。双極子モーメントの方向は、

ーから＋への方向を正にとります。HClの双極子モーメントは図1のように表現します。この向きの矢印を双極子モーメントとして表現する機会が多いのでこれで覚えてくれれば一番無難ですね。しかしながら、分極した状態、つまり“極性”の向きで表すこともあるので、その場合は図1に示したように、双極子モーメントの逆になります。双極子モーメントで書くか極性で書くかは、教科書や論文によって様々なので、どちらの表現を使うかで符号が逆になるところには注意してください。

ここでちょっと悩んでもらいます。高校化学の教科書や資料には、同じ原子からなる2原子分子は、分極していないために双極子モーメントを持たないと書かれています。全ての原子ではありませんが、多くの原子には同位体がありましたね。したがって、同じ種類の2原子分子とはいえ同位体を考えると同じ種類の原子とは何？という疑問が生じませんか？同じ種類の原子であっても同位体どうしであれば、電気陰性度の値は当然変わります。それを解決するために新たに原子核で原子の種類を区別する方法を教えたいと思います。

水素原子の天然に存在する同位体には水素“H”原子と重水素“D”原子があります。それらは何が異なるのかというと、電子数は同じ、陽子数も同じなので、中性子数が異なるだけです。つまり原子構造を考えたとき、原子核（の質量）が異なるということです。そこで、原子を原子核で区別する方法として、“等核 homonuclear”と“異核 heteronuclear”という言葉を使います。例えば、同位体を考えたとき、水素原子における“等核2原子分子”は2つあります。わかりますか？答えはH<sub>2</sub>とD<sub>2</sub>です。それでは水素原子における“異核2原子分子”はわかりますか？HDですね。H原子とD原子の電気陰性度はそれぞれ2.2および2.26になります。勿論、水素原子の場合にはH原子とD原子の原子核の質量は2倍異なるので、同位体効果が大きくなるのも直観的にわかりますね。原子番号の大きな原子であれば同位体どうしの原子核の質量差はそこまでではないため、同位体どうしても電気陰性度の差は小さくなります。しかし、わずかであっても電気陰性度が異なる値になるということは、すべての“異核2原子分子”は原子間で電気陰性度の差があるため分極します。だからHDは極性分子です。“等核2原子分子”であれば双極子モーメントを持ちません。等核2原子分子であるH<sub>2</sub>やD<sub>2</sub>は双極子モーメントを持たないので“無極性分子 nonpolar molecule”です。

なんか、思ったより化学は厄介ですね(苦笑)。でも、学問ってこんなもんですよ。また、ここでは触れていませんが、3原子以上の分子では構造を考えて双極子モーメントを決めなければならないことを忘れないようにしてください。メタン“CH<sub>4</sub>”の様な対称性の高い分子であれば、C原子とH原子の結合では分極が生じ部分的に双極子モーメントが形成されますが、分子全体としては永久双極子モーメントは持ちませんね。