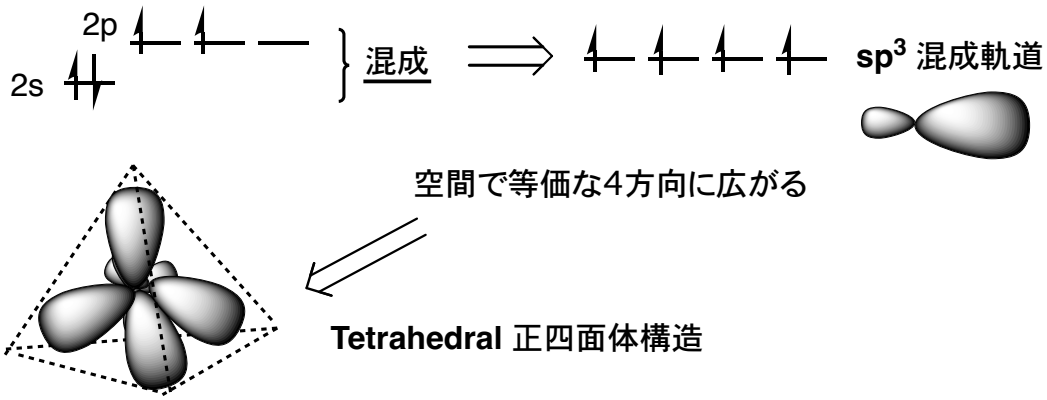
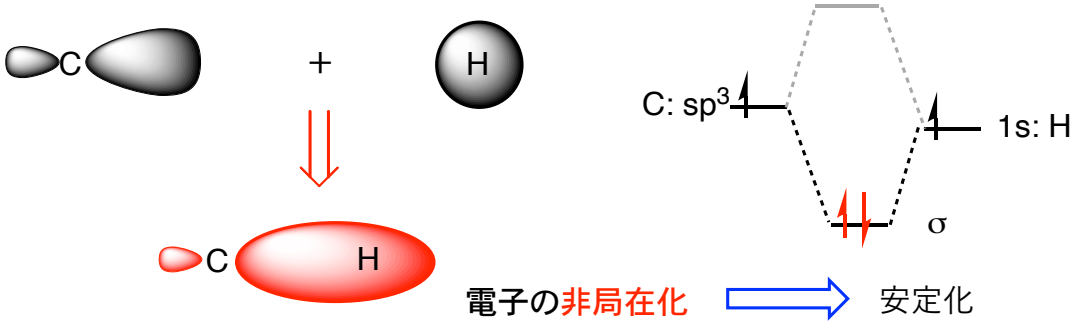
3.飽和炭化水素と分子構造の表示

Saturated Hydrocarbon, Representation of Molecular Structure

3.1. 混成軌道 Hybrid Orbitals

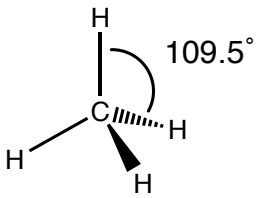


1) C--H 結合

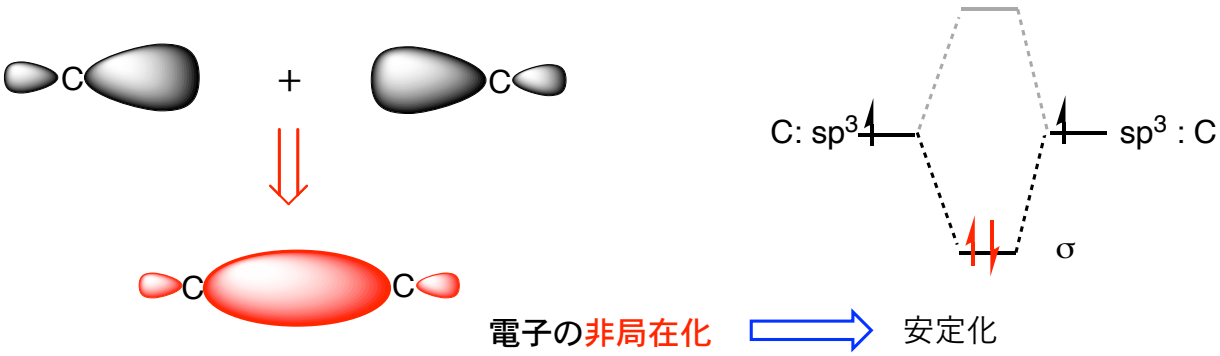


電子の非局在化 ⇒ 安定化

CH_4



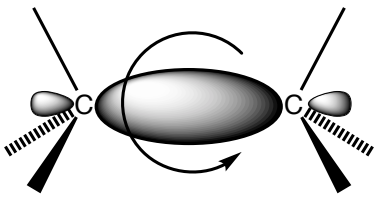
2) C--C 結合



電子の非局在化 ⇒ 安定化

エタン ethane

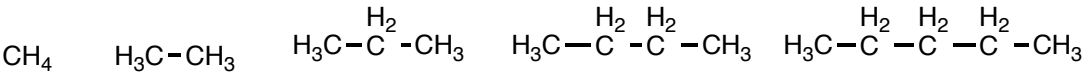
$H_3C—CH_3$



回転容易!

3.2. 飽和炭化水素ー構造異性体 Saturated Hydrocarbon--Structural Isomers

直鎖

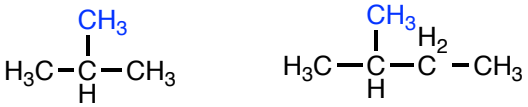


CH_4 H_3C-CH_3 $H_3C-CH_2-CH_3$ $H_3C-CH_2-CH_2-CH_3$ $H_3C-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$

C_2H_6 C_3H_8 C_4H_{10} C_5H_{12}

methane ethane propane butane pentane

枝分れ



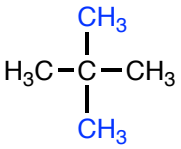
2-methylpropane (isobutane)

2-methylbutane (isopentane)

アルカン alk**ane**

一般式：C_nH_{2n+2}

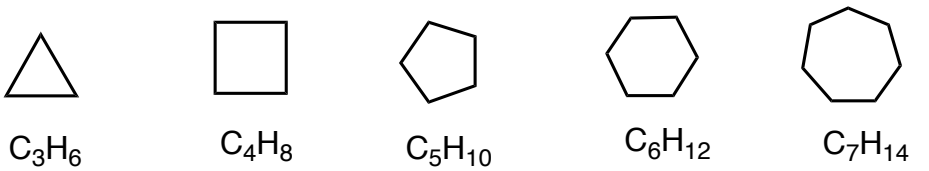
異性体 Isomer



2,2-dimethylpropane (neopentane)

3.3. 環状飽和炭化水素ー水素不足指数

Cycloalkanes--Index of Hydrogen Defficiency (IHD)



C_3H_6 C_4H_8 C_5H_{10} C_6H_{12} C_7H_{14}

cyclopropane cyclobutane cyclopentane cyclohexane cycloheptane

炭素原子あたりのひずみエネルギー /kJ mol-Carbon^{-1}

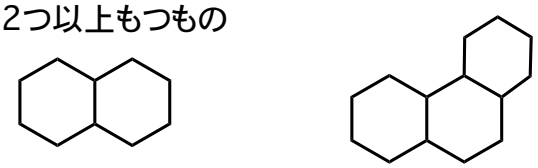
44 27 5 0 9

平面 ほぼ平面 非平面

シクロアルカン cycloalkane

一般式：C_nH_{2n}

環を2つ以上もつもの



$C_{10}H_{18}$ $C_{14}H_{24}$

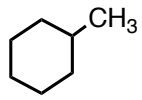
水素不足指数（不飽和度、IHD）(1)

一般式	環の数
C_nH_{2n+2}	0
C_nH_{2n}	1
C_nH_{2n-2}	2
C_nH_{2n-4}	3

$$IHD = \frac{2\times(\text{炭素数})-(\text{水素数})+2}{2}$$

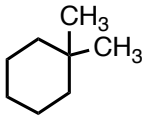
置換シクロアルカン類の異性体と命名法

(1) 一置換体の場合：位置番号の1-は省略する（位置異性体がないので）

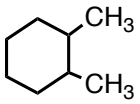


methylcyclohexane

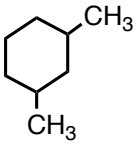
(2) 二置換体（以上）の場合：位置異性体がある



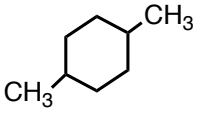
1,1-dimethylcyclohexane



1,2-dimethyl~



1,3-dimethyl~

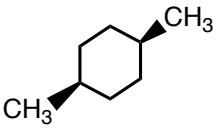


1,4-dimethyl~

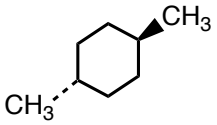
（注意：ベンゼン環と違い、*ortho*-, *meta*-, *para*-とは言わない）

(3) 二置換体の場合：1,1- 体 以外にはシス-トランス異性体（立体異性体）がある

同じ側：*cis*　　反対側：*trans*



cis-1,4-dimethyl~



trans-1,4-dimethyl~

分子模型を作って考えてみよう。