

## 不飽和度

多重結合の数（二重結合なら1、三重結合なら2） + 環の構造 を与える数。

## 求め方の基本

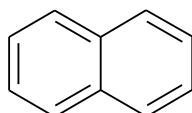
### 構造式から

例 ナフタレン  $C_{10}H_8$

二重結合 … 5

環構造 … 2

→ 不飽和度 (5 + 2 =) 7



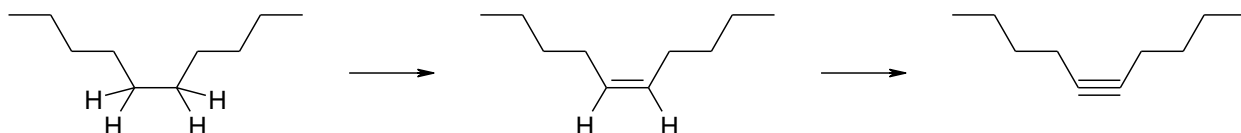
### 式から

炭素10のデカンの分子式は、 $C_{10}H_{22}$  である。

これとくらべて、ナフタレンは、水素数が14個少ない。

→ 不飽和度 (14 ÷ 2 =) 7

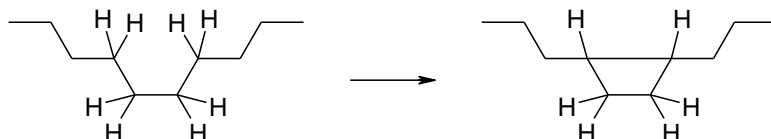
## 上の式で求めることができる理屈



単結合を二重結合にすると、分子式から水素が2つ減る。

三重結合にすると、更に水素が2つ減る。

隣接した2つの炭素から水素をとり、代わりに結合を1本加えと、多重結合となる。



直鎖構造に環の構造を追加すると、分子式から水素が2つ減る。

隣接していない2つの炭素から水素をとり、代わりに結合を1本加えと、環構造となる。

## 式の一般化

不飽和度 0 の構造がもつべき水素数を  $z$  と置くなら、 $(z-x)/2$

ただし、 $x$  は不飽和度を調べようとしている分子中の水素数

アルカン (← 不飽和度 0) の一般式  $C_nH_{2n+2}$

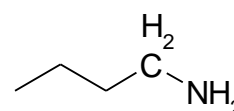
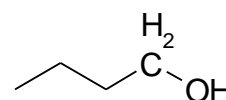
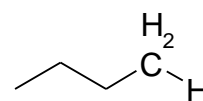
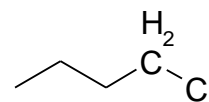
→ 炭素数  $n$  の炭化水素の不飽和度 =  $((2n+2)-x)/2$

炭素、水素以外の元素 (窒素、酸素、ハロゲン) の影響 (構造で確認)

分子にハロゲンを一つ導入すると、分子式中の水素の数は一つ減る。

分子に酸素を一つ導入しても、分子式中の水素の数は変化しない。

分子に窒素を一つ導入すると、分子式中から水素の数が一つ増える。



$C_nH_xCl_iO_jN_k$  の分子式をもつ化合物の不飽和度

不飽和度 0 の構造がもつべき水素数を  $z$  と置くなら

→ 炭素数にあわせて適当な構造式 (多重結合なし、環なし) を書いて、  
水素数  $z$  を数えてもよい。

→ 上の関係から、 $z = 2n + 2 - i + k$  (※)

## 不飽和度がわかると便利なこと

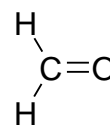
例:  $CH_2O$  という分子式の構造を知りたい。

不飽和度を計算すると、1 であることがわかる。

環の構造が 1、または二重結合が 1 であることを示す。

水素は結合 1 本しかありえないので、環や二重結合は、それ以外の原子間でのみ。

→  $C=O$  の構造をもつことが決定。→ 右の構造しか書けない。



## 不飽和度が苦手とする構造

形式電荷をもつ原子がある場合、不対電子がある場合

→ そのままでは (式の一般化) で述べた関係 (※) では計算できない。補正が必要。

