§電気陰性度

教科書（平尾著「無機化学」）「表 1.8」のかわりに本プリントの Table 2 をご利用下さい。精度の高い値を Allred の値として紹介している教科書があるが（小倉著「無機化学概論」（丸善））、混乱を招くので、Pauling の値と呼んでよい。（Allred-Rochow の定義式はこれとは異なる（教科書 p.42）。）

吉武道子「Pauling の電気陰性度」*表面科学* **22**, 831 (2001).

(中略)

このような違いの原因について述べる前に，Pauling の電気陰性度とはどのようにして求められるのかについて触れる。分子 AB の結合エネルギー E(AB) は，分子 AA の結合エネルギー E(AA) と分子 BB の結合エネルギー E (BB) の平均よりも大きい。AB の結合が理想的共有結合ならば E(AB) はこの平均の値になるはずで，それより大きい部分は原子 A と B が少しイオン化していて原子間に静電引力が働くためと考える。この静電エネルギーの寄与は 2 つの原子間の「電気陰性度」の差の二乗に比例するとして，Pauling は下の式で電気陰性度を定義した[1)]。

$$E(AB)=\{E(AA)+E(BB)\}/2+96.48(\chi_A-\chi_B)^2$$

ここで，χ_A，χ_B はそれぞれ，A と B の電気陰性度である。また，上の式は，結合エネルギーを［kJ/mol］で表したもので，係数 96.48 は 1 eV＝96.48 kJ/mol であるところから来ている。E(AB)－{E(AA)＋E(BB)}/2 は AB の生成熱なので，熱化学データから電気陰性度の相対値を求めることができ，その値が表になっている。昔は生成熱を kcal/mol で表記することが一般的だったので，Pauling の著書では，係数は kcal/mol からの換算係数 23.06 になっている。

さて，2 つの表の違いであるが，日本の Yahoo JAPAN から検索されたウェブサイトでは，化学便覧同様，Pauling の著書[1)]から電気陰性度の値が採られていることが多いと考えられる。一方，Pauling の著書出版の翌年，A.L. Allred がより新しい多くの熱化学データから Pauling の提唱した計算方法で電気陰性度の計算を行って電気陰性度の表を発表している[3)]。電気陰性度には Pauling が提唱した方法以外にも，Mulliken の方法[4)]を始めいくつもの異なる定義方法があり，欧米では，Pauling の電気陰性度というのは，「Pauling の著書に記載されている電気陰性度」ではなく，「Pauling の方法により計算された電気陰性度」という意味に用いられているようである。したがって，電気陰性度の値そのものは，Pauling の本が出版された後も，より多くの化合物における結合エネルギーの値を用いて改訂されている。欧米の教科書には改訂後の値が記載されており，Yahoo USA から検索されたウェブサイトにもその値が採用されていると考えられる。付け加えると，日本語の無機化学の教科書でも，欧米の本を翻訳したものでは欧米タイプの値を掲載している。

Table 2　欧米の教科書[2]に掲載されている Pauling の電気陰性度.

I	II	III	II	II	II	II	II	II	II	I	II	III	IV	III	II	I	0
H																	He
2.2																	—
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
0.98	1.57											2.04	2.55	3.04	3.44	3.98	—
Na	Ma											Al	Si	P	S	Cl	Ar
0.93	1.31											1.61	1.90	2.19	2.58	3.16	—
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.82	1.00	1.36	1.54	1.63	1.66	1.55	1.83	1.88	1.91	1.90	1.65	1.81	2.01	2.18	2.55	2.96	3.00
							1.96^{III}			2.00^{II}							
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0.82	0.95	1.22	1.33		2.16	1.9	2.2	2.28	2.20	1.93	1.69	1.78	1.96	2.05	2.1	2.66	2.60
				1.6^{V}	2.19^{III}								1.80^{II}				
					2.24^{IV}												
					2.27^{V}												
					2.35^{VI}												
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
0.79	0.89	1.10	1.3	1.5	2.36	1.9	2.2	2.20	2.28	2.54	2.00	2.04	2.33	2.02	2.0	2.2	—
												1.62^{I}	1.87^{II}				
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									
0.7	0.9	1.1															

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
1.12	1.13	1.14	—	1.17	—	1.20	—	1.22	1.23	1.24	1.25	—	1.27
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
1.3	1.5	1.38	1.36	1.28	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	—