

組成式から可能な分子式を絞り込める場合がある。

共有結合の化合物の原子価の合計は偶数

有機化合物は共有結合の化合物なので、各原子が手をつないでいる。

よって、各原子が共有結合のために出す手の数（原子価）の総和は偶数である。

C,H,N,O の原子価はそれぞれ 4,1,3,2 だから、

分子式が  $C_pH_qN_rO_s$  の化合物では、原子価の合計 =  $4p + q + 3r + 2s = \text{偶数}$  となる。

したがって、組成式の原子価の総和から可能な分子式を絞り込める場合がある。

たとえば、組成式が  $C_4H_7O$  の場合、

原子価の和 =  $4 \times 4 + 1 \times 7 + 2 \times 1 = 25$  と奇数だから、

可能な分子式は、 $(C_4H_7O)_{2n} = (C_8H_{14}O_2)_n$  である。

これは、「分子量 100 以上 200 以下の化合物云々」など分子量の範囲がわかっている化合物の構造決定において威力を発揮する。

**補足**

原子価の和が偶数以外に

$$\text{不飽和度} = \frac{(2 + 2 \times \text{Cの数} + \text{Nの数}) - \text{Hの数}}{2} = \frac{(2 + 2p + r) - q}{2} = \text{整数}$$

を使ってもよい。

**まとめ**

組成式の原子価の合計が奇数ならば、分子式はその偶数倍である。