

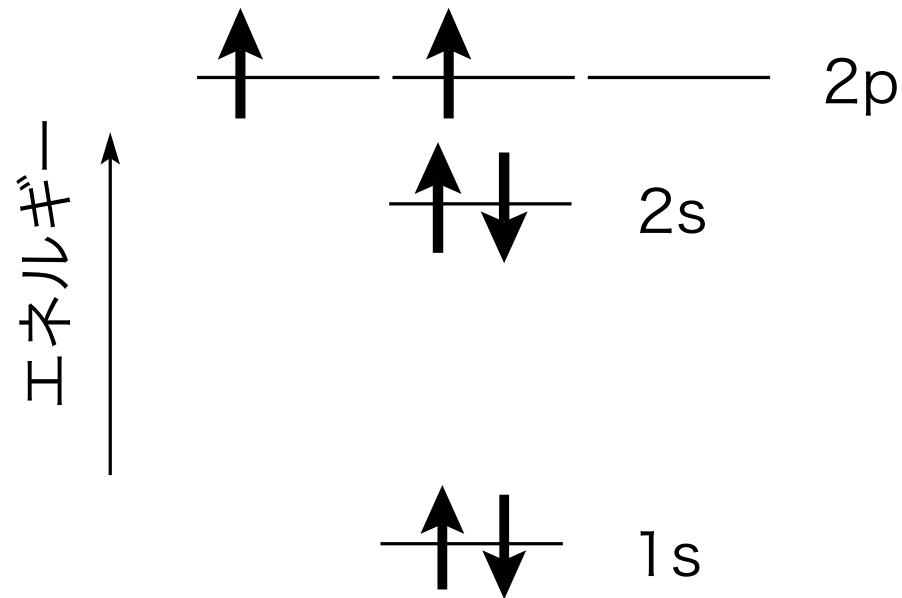
メタンの結合：sp³混成軌道

炭素原子の4個の価電子はどこにある？

メタン CH₄ の結合はどうやってできる？



炭素原子の電子配置

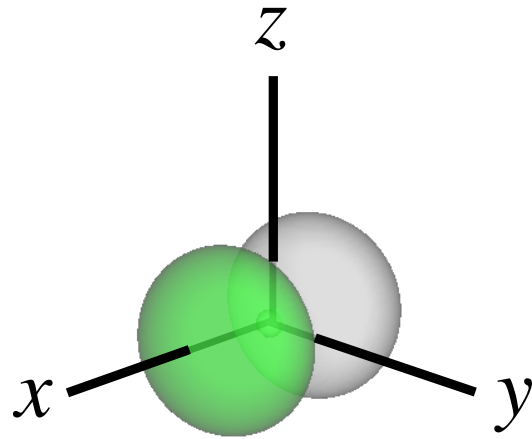


炭素原子：[He](2s)²(2p_x)(2p_y)

三つの 2p 軌道 = 2p_x, 2p_y, 2p_z

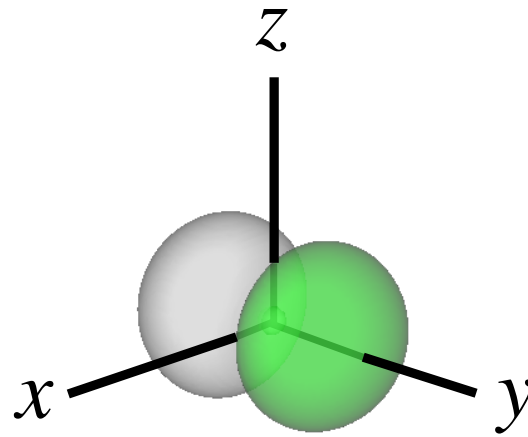


三つの 2p 軌道



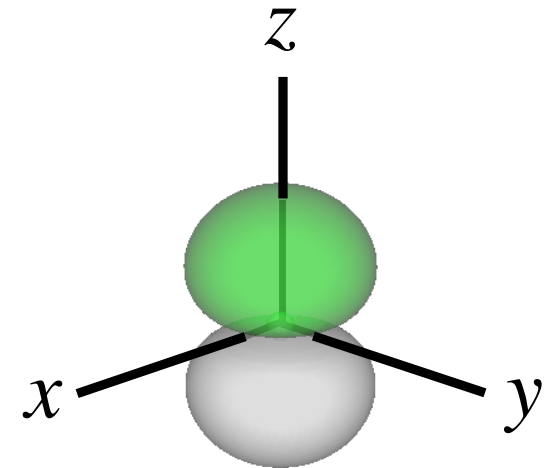
$2p_x$

x 軸方向



$2p_y$

y 軸方向



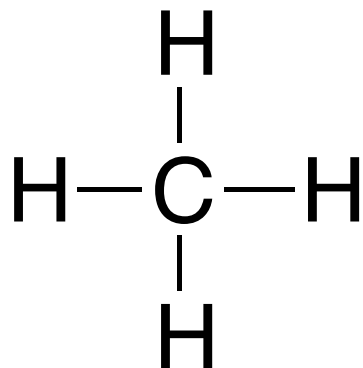
$2p_z$

z 軸方向



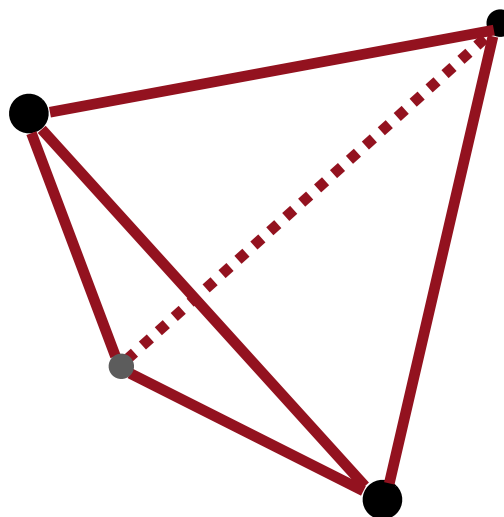
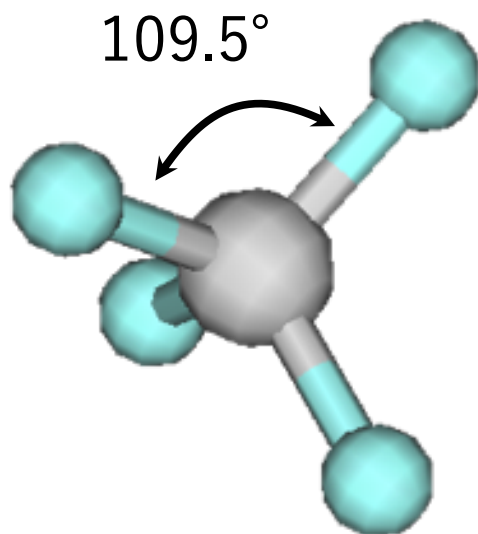
メタンの結合

メタン



正四面体構造

(正方形ではない！)

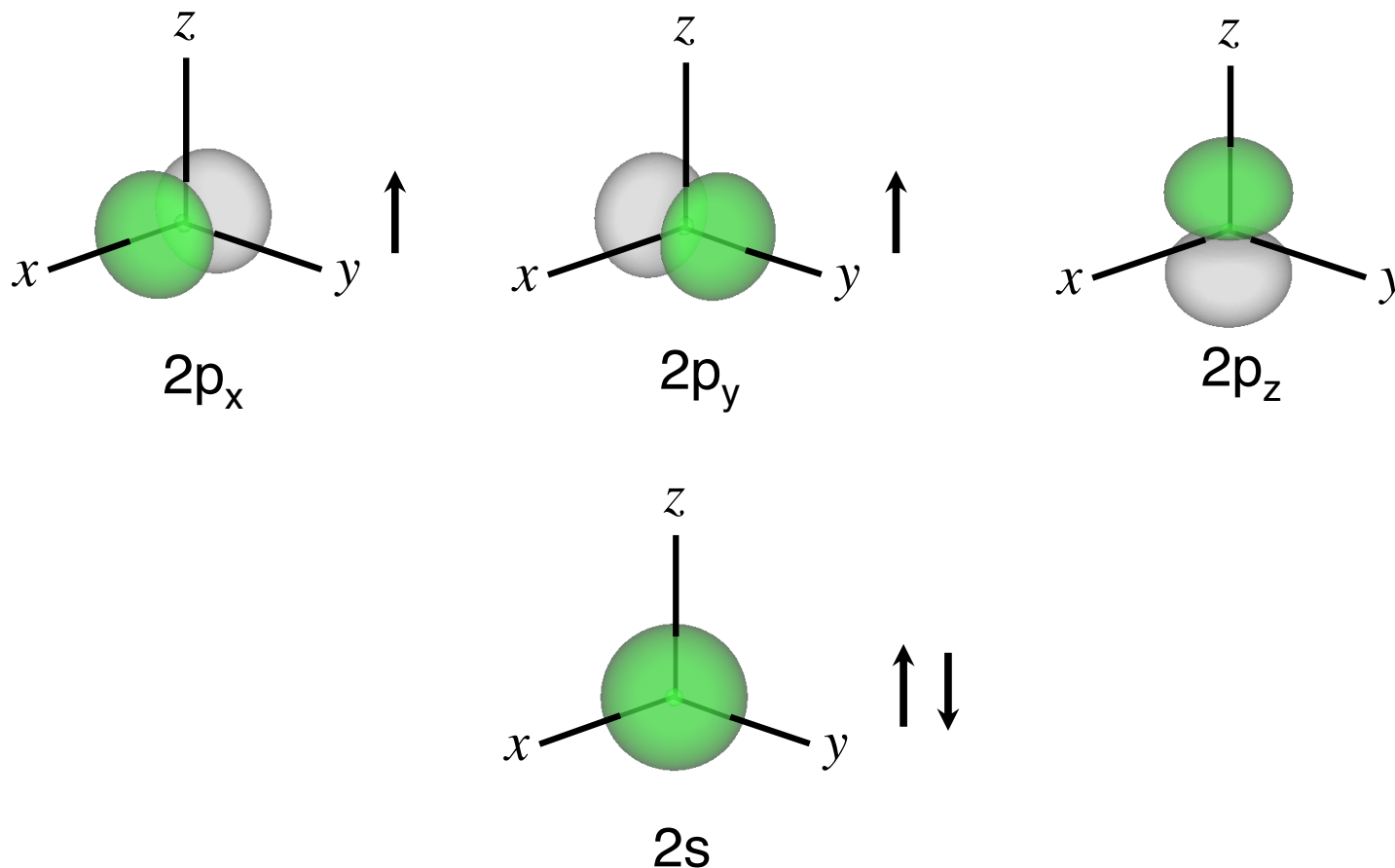


(4 個の H 原子が
正四面体の頂点の
位置にある)

・ 4 本の C-H 結合はどのようにできている？



炭素原子の 4 個の価電子

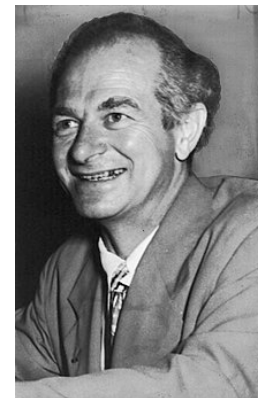


- ・ 不対電子が 2 個しかない？（4 本の結合をどうやって作る？）
- ・ x, y 方向：結合の角度は 90° ？（メタンの結合角は 109.5° ）



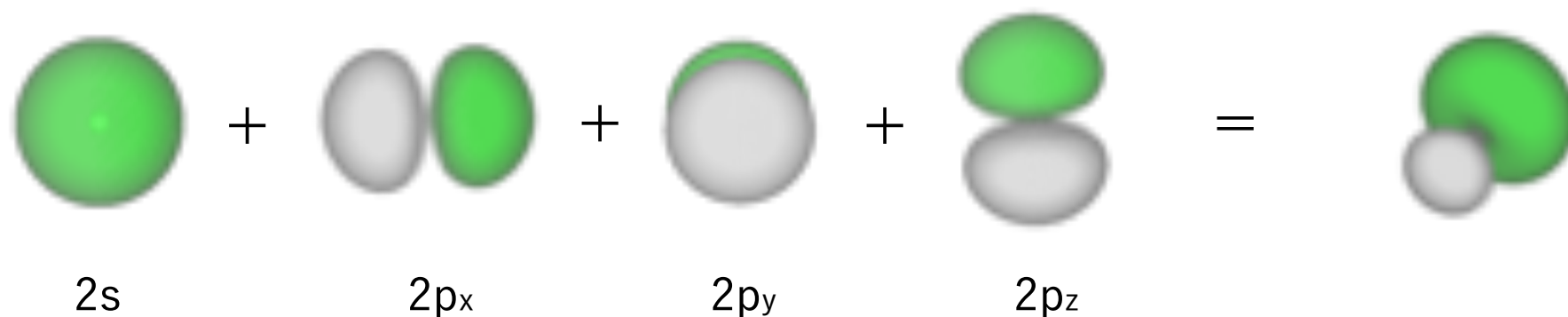
混成軌道

同じ原子上の原子軌道を重せ合わせて
新しい軌道を作る = 混成軌道



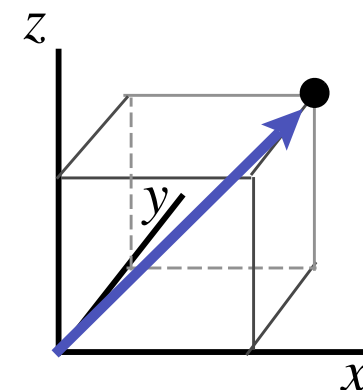
Linus C. Pauling
(1901–1994)

Photo:
public domain

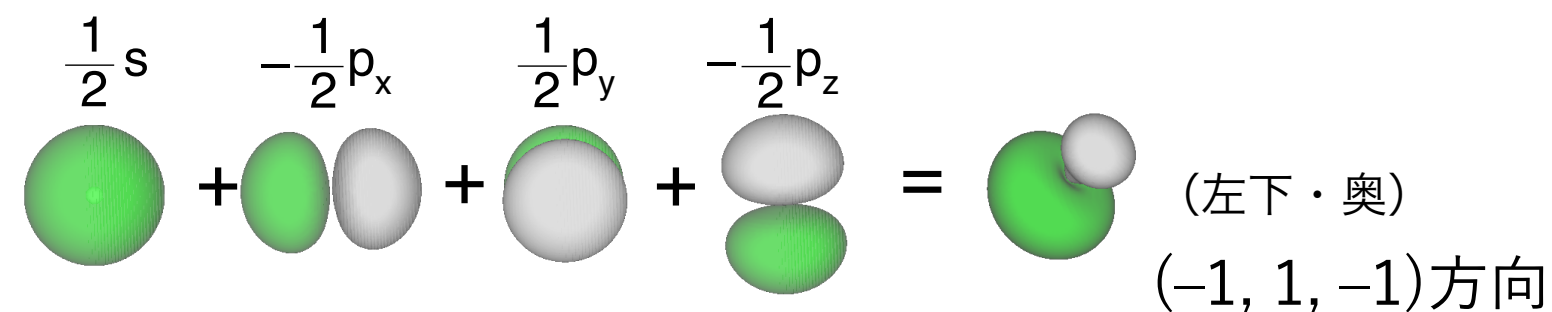
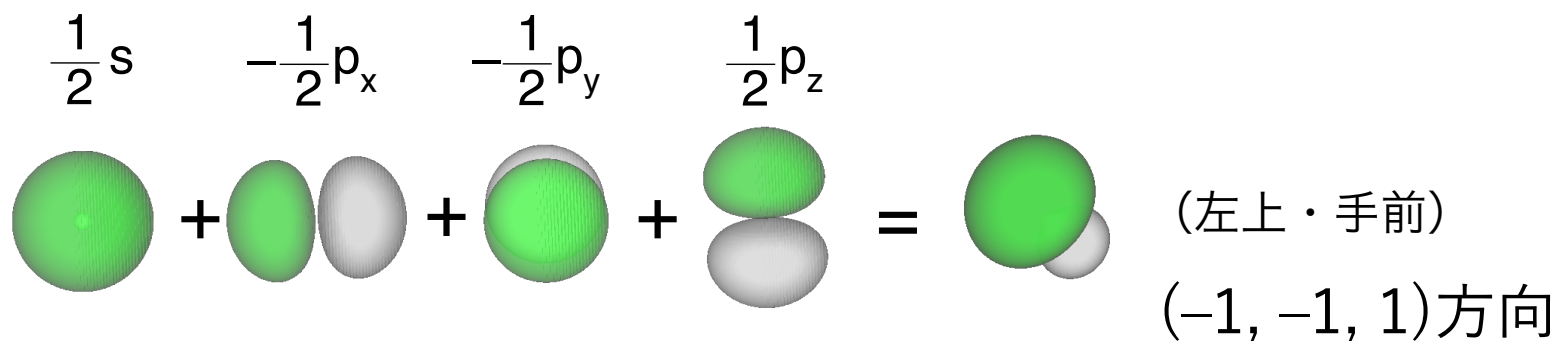
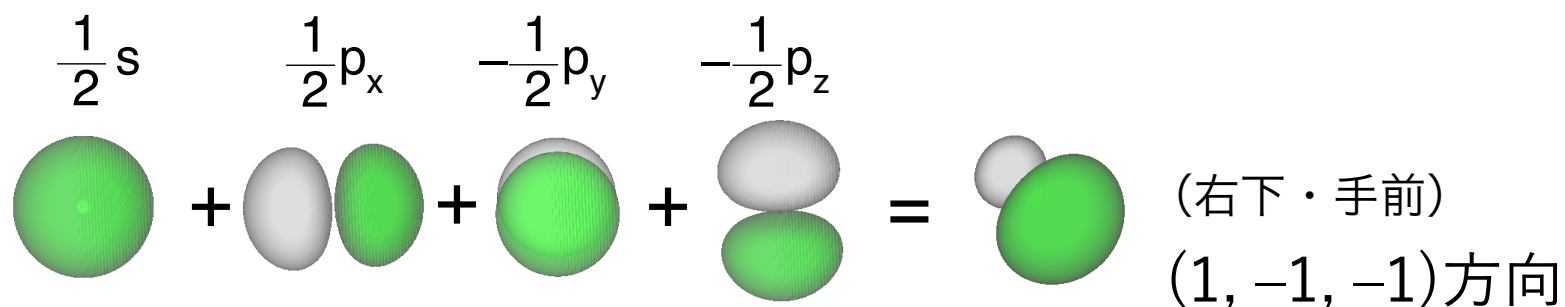
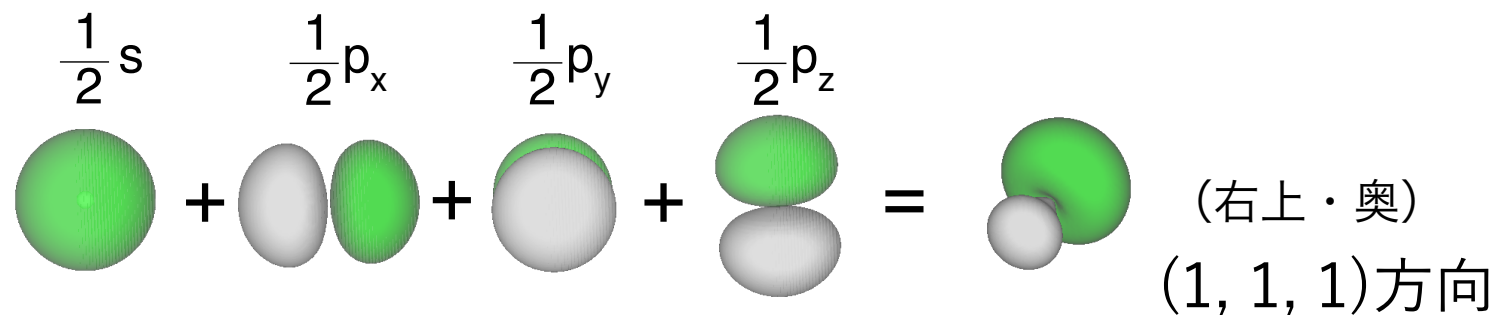


同じ位相の部分（色がついた部分）が強め合って
(1, 1, 1)方向（= 右・上・奥）の軌道ができる

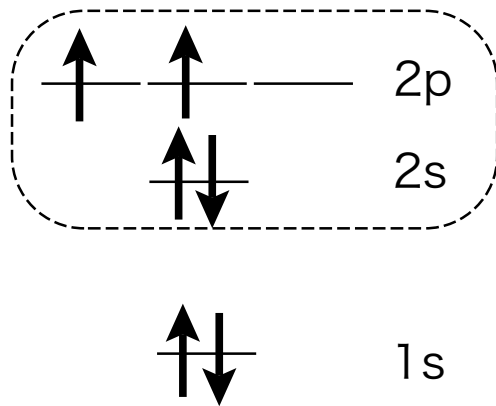
s 軌道と 3 つの p 軌道の重ね合わせ
= 「sp³ 混成軌道」



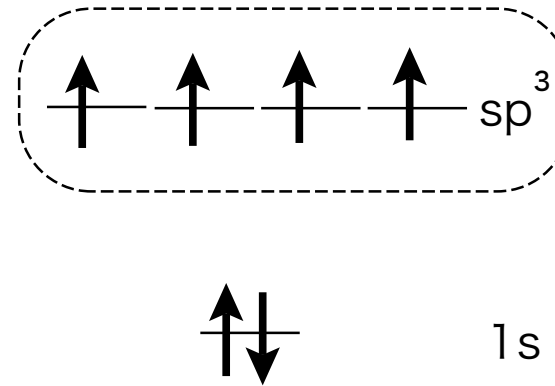
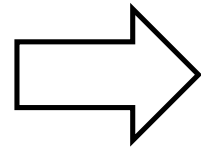
4 個の sp^3 混成軌道



炭素原子の「不対電子」は……？



本来の炭素原子の状態



「仮想的な」炭素原子の状態



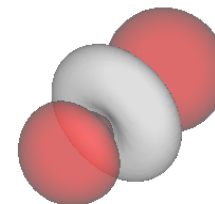
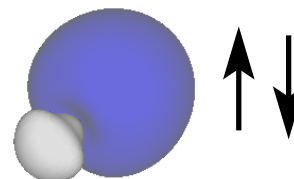
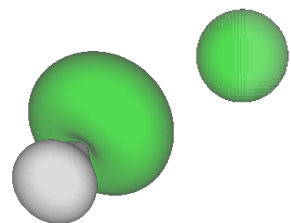
メタン (CH₄) の共有結合

C sp³ + H 1s

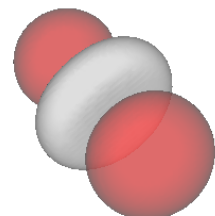
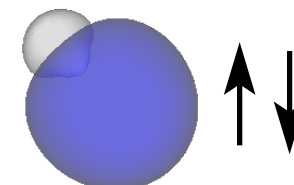
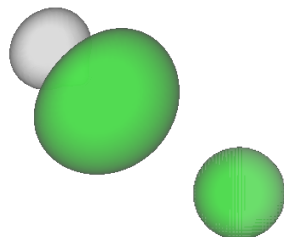
結合性軌道

反結合性軌道

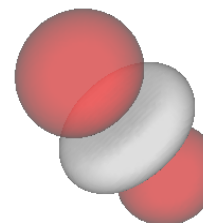
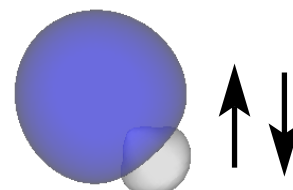
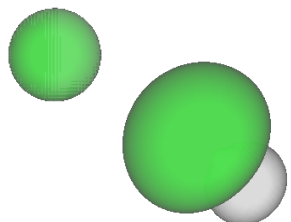
(右・上・奥)



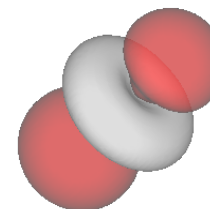
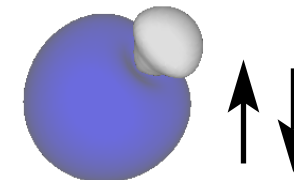
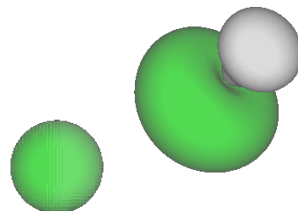
(右・下・手前)



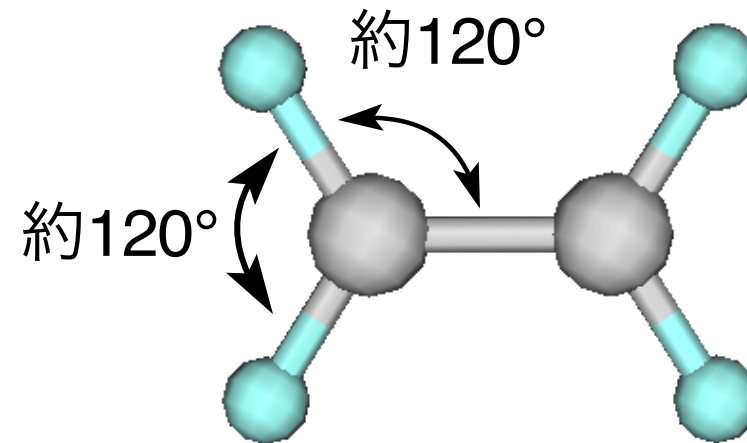
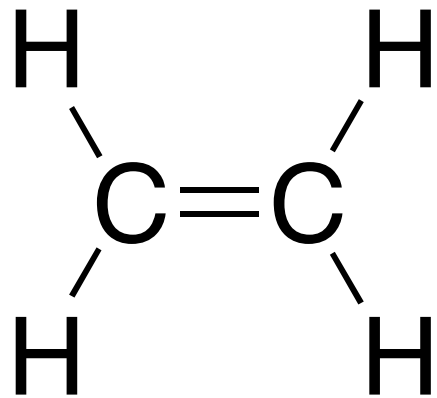
(左・上・手前)



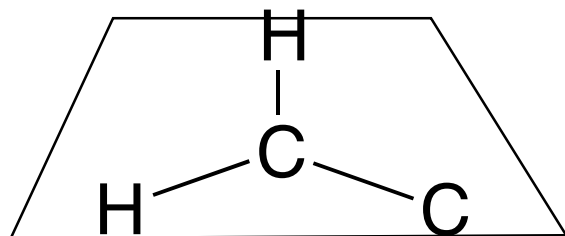
(左・下・奥)



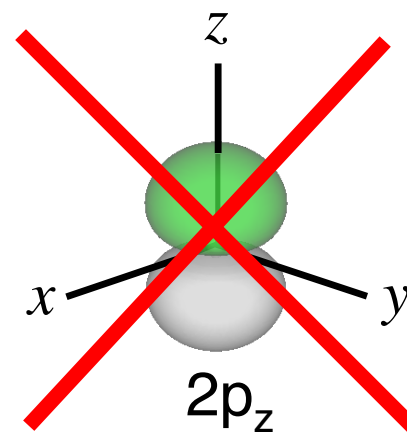
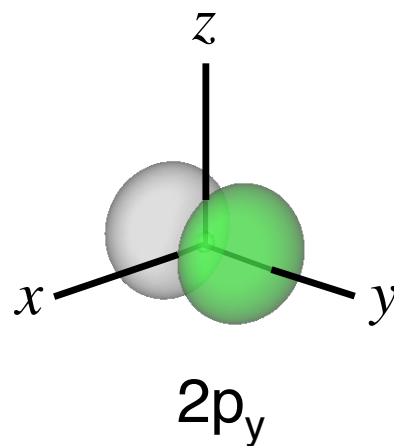
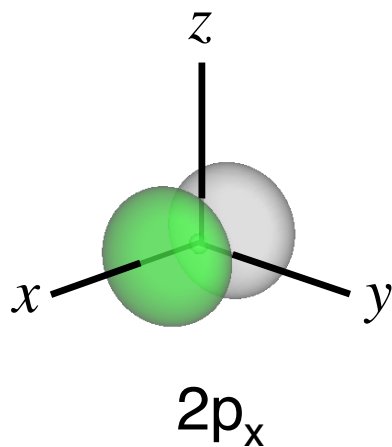
エチレンの結合



平面内の 3 つの軌道を作る

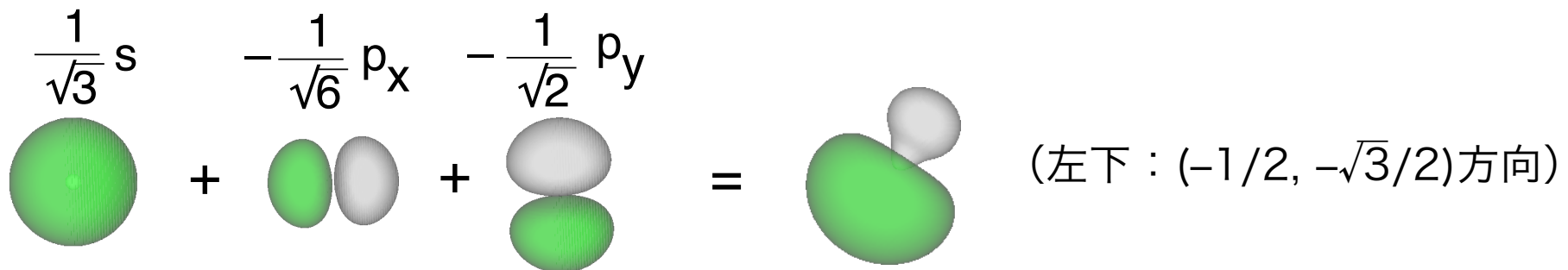
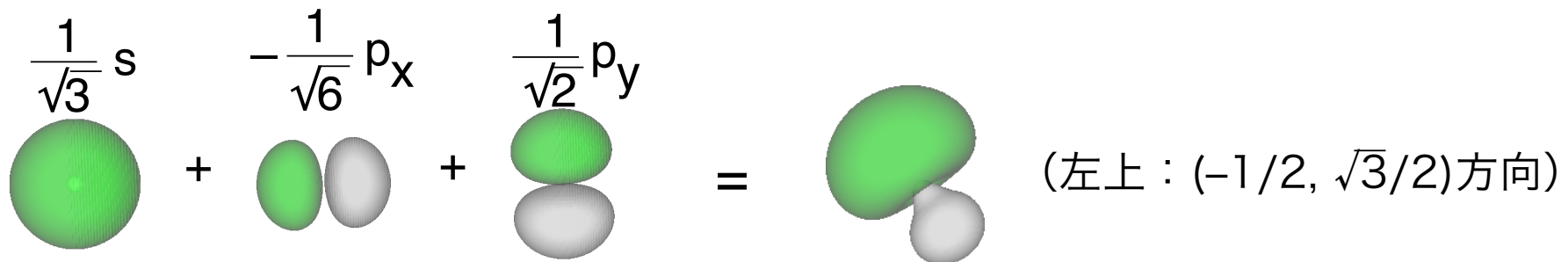
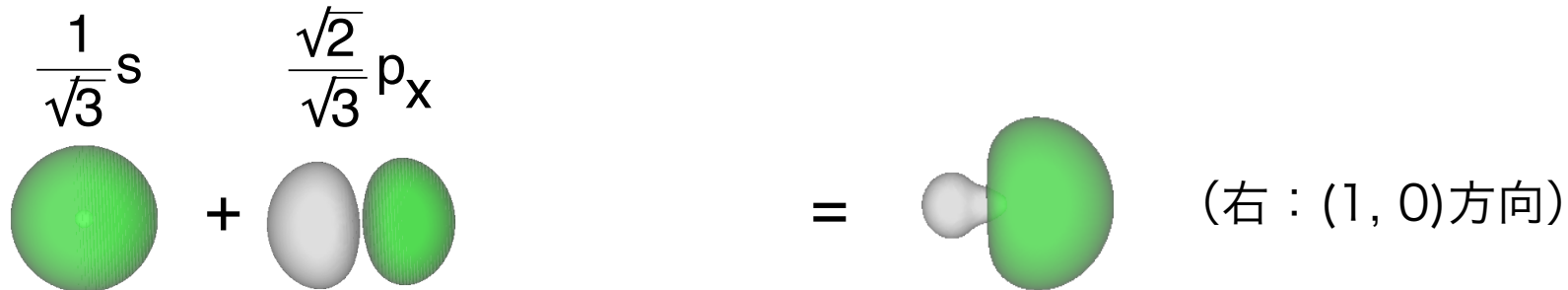


まず「平面内に 3 本の結合を作る」
ことを考える



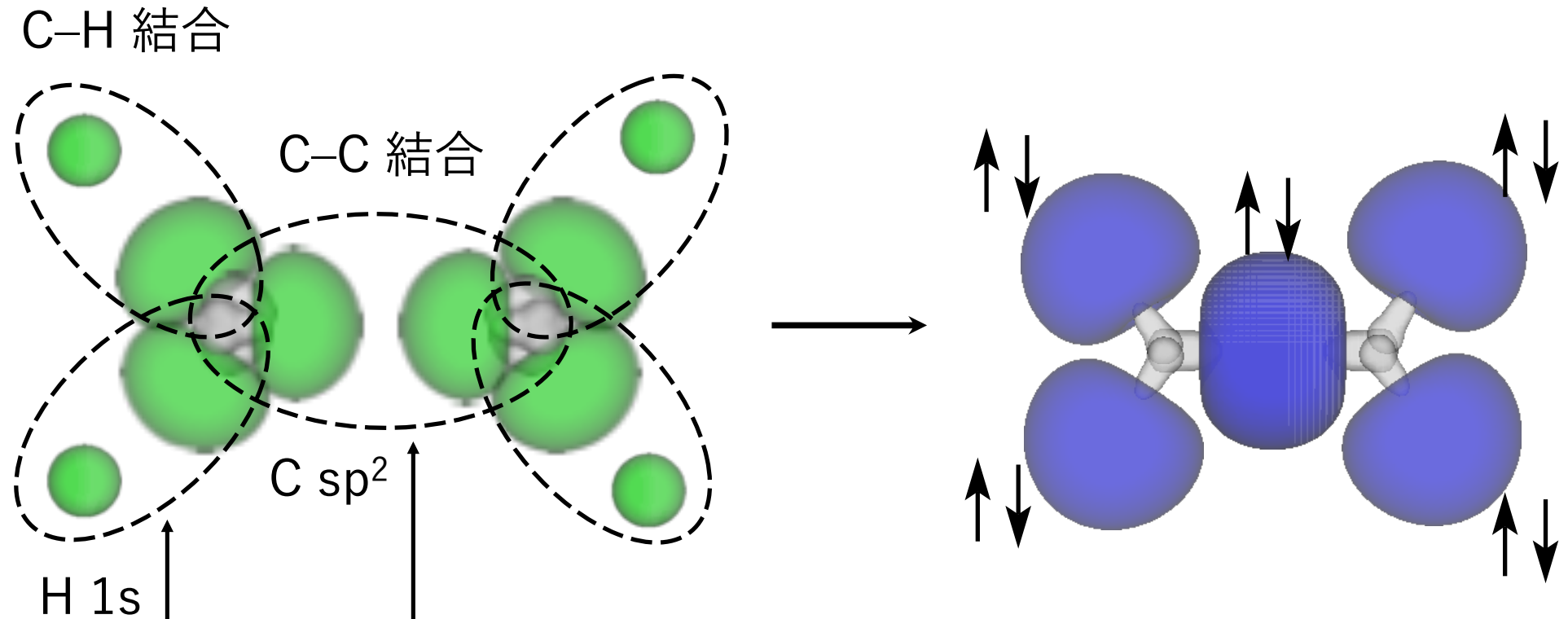
sp² 混成軌道

s 軌道 1 個と p 軌道 2 個が重なり合っただけでできた混成軌道
= sp² 混成軌道



3 個の sp² 混成軌道は同一平面内にある (xy 平面)

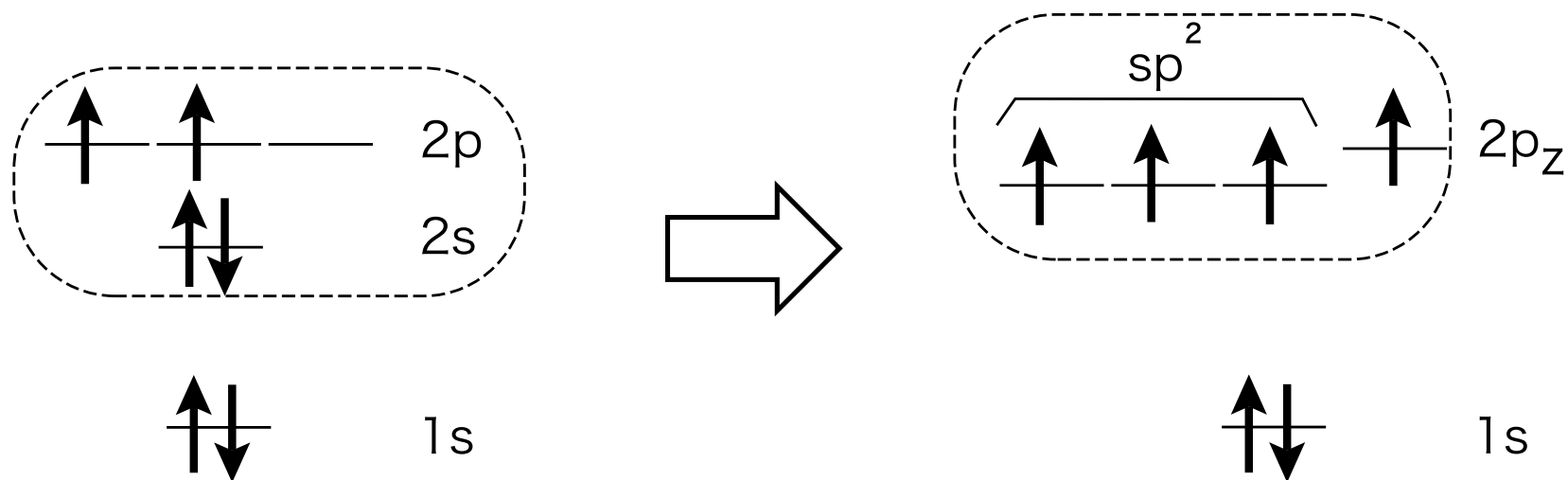
エチレンの C-H、C-C 結合：sp²混成軌道による結合



- ・ C-C 結合：C の sp² 混成軌道同士
- ・ C-H 結合：C の sp² 混成軌道と H の 1s 軌道



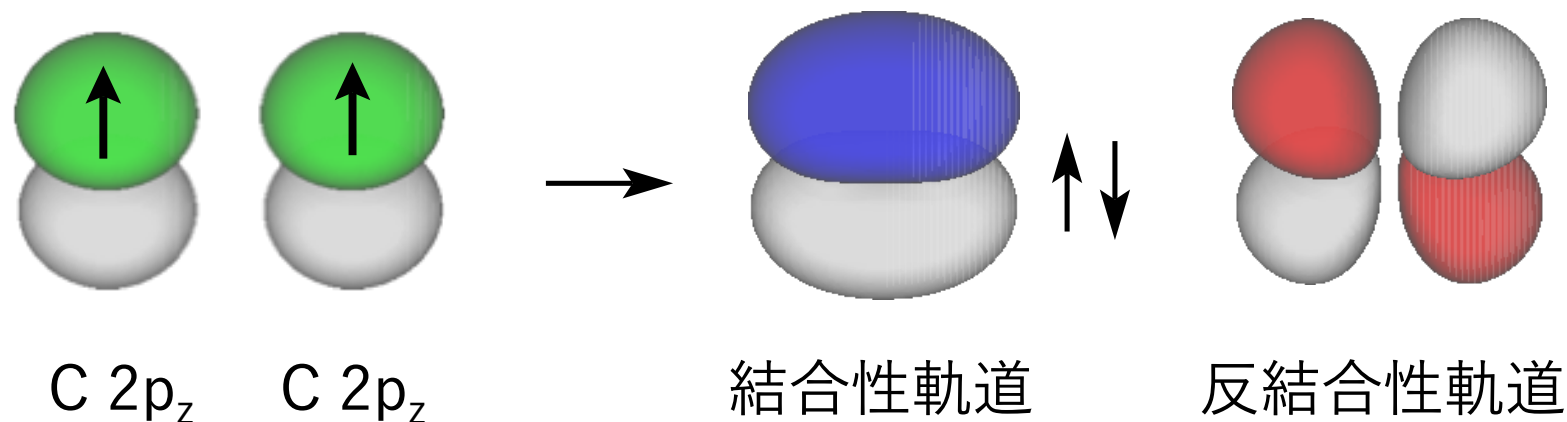
sp^2 炭素の 4 個の価電子：あと 1 個は？



sp^2 混成の C 原子には $2p_z$ 軌道が残っている



エチレンの C-C 結合：2p_z 軌道による結合



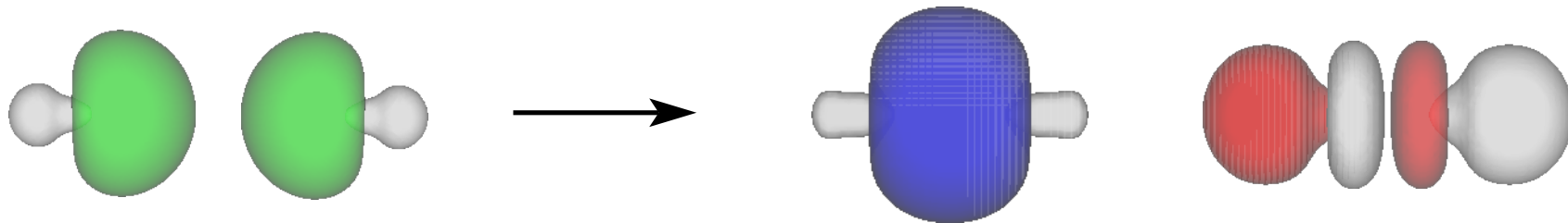
sp² 混成軌道同士の重なり合い
2p_z 軌道同士の重なり合い

二重結合



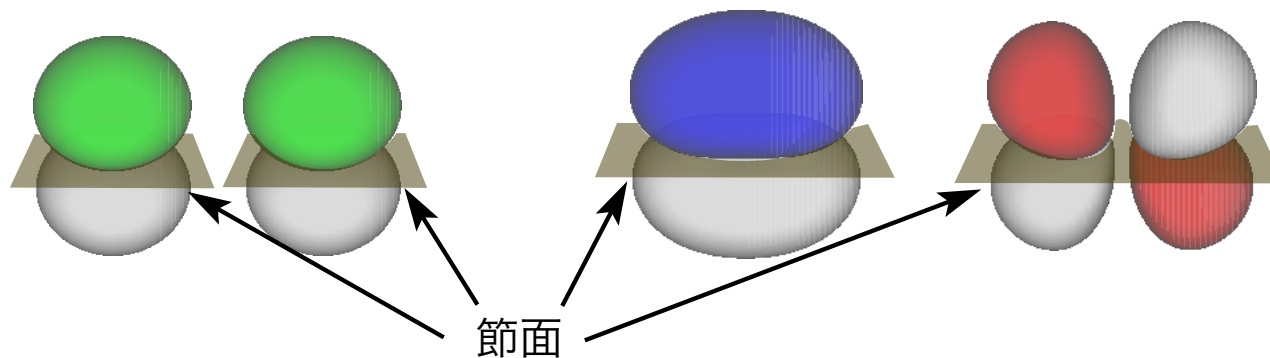
σ (シグマ) 結合と π (パイ) 結合

sp²混成軌道の重なり合い



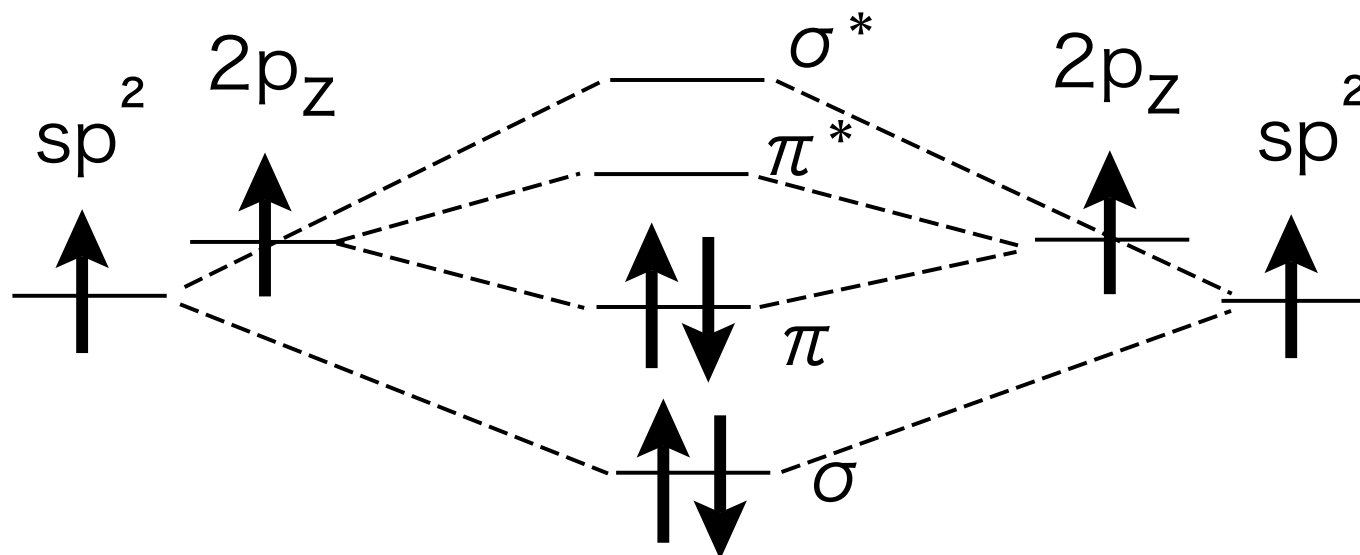
結合軸に対して軸対称 = σ (シグマ) 結合 :

2p_z 軌道の重なり合い



結合軸を含む1つの「節面」を持つ = π (パイ) 結合

σ 結合と π 結合のエネルギー図



結合を作った時の「エネルギーの下がり具合」は
 σ 結合の方が大きい

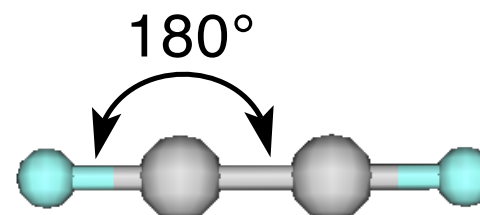


σ 結合の方が安定で、反応しにくい

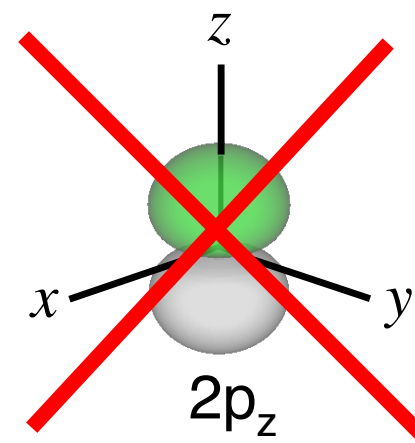
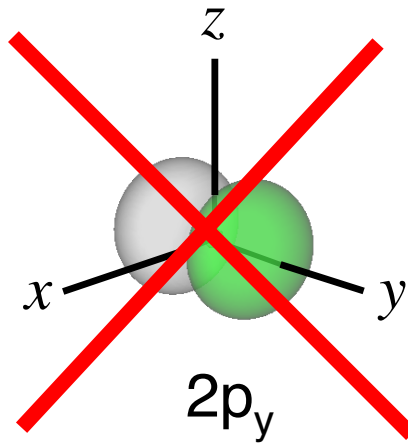
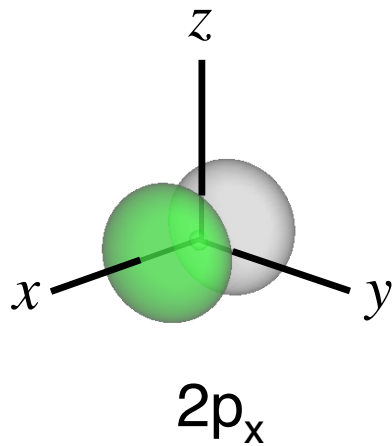
π 電子の方が不安定で、反応しやすい



アセチレンの結合

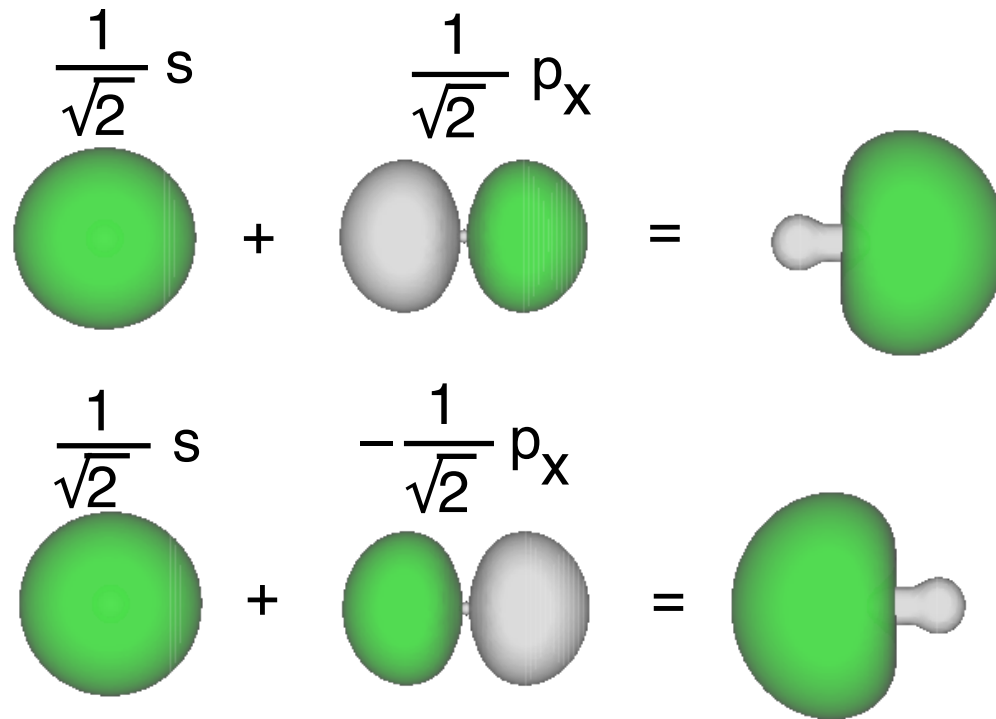


直線上の2つの軌道を作る



sp 混成軌道

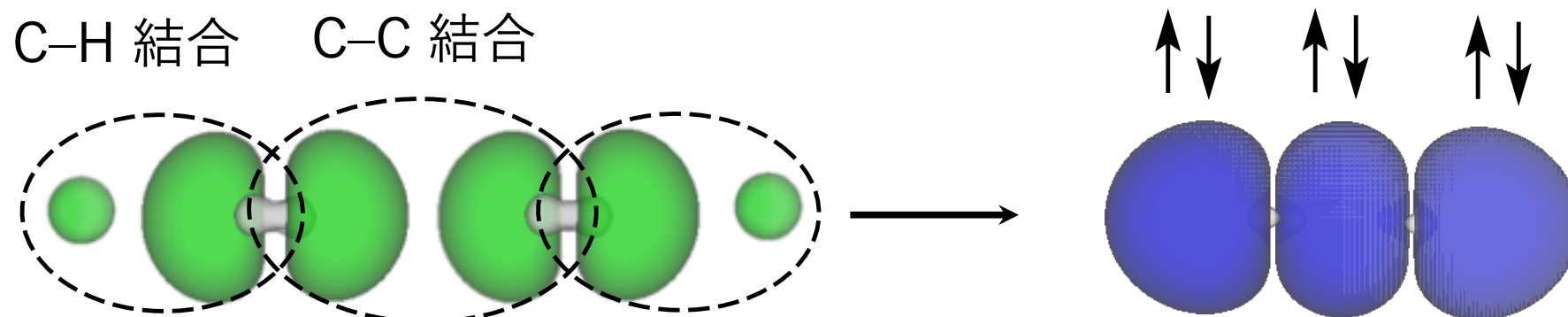
s 軌道 1 個と p 軌道 1 個が重なり合っただけの混成軌道
= sp 混成軌道



2 個の sp 混成軌道は直線上にある



アセチレンの C-H 結合、C-C 結合



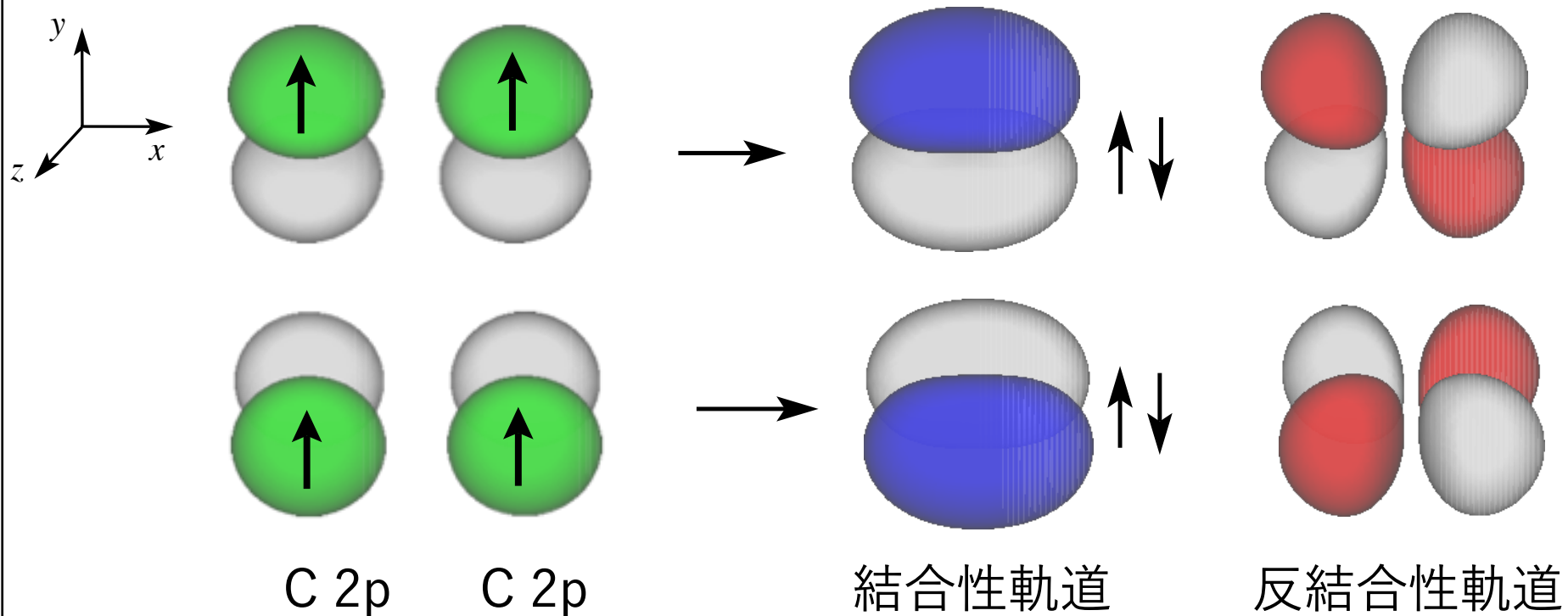
・ C-C 結合 : C の sp 混成軌道同士

・ C-H 結合 : C の sp 混成軌道と H の 1s 軌道



アセチレンの C-C π 結合

sp 混成の C 原子には p 軌道が 2 個残っている



sp 混成軌道同士の重なり合い (σ 結合)

p 軌道同士の重なり合い (π 結合 2 本)

三重結合

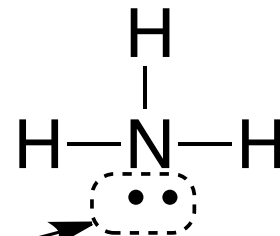
アンモニアの結合

ローンペアを持つ原子の混成軌道

混成軌道の見分け方

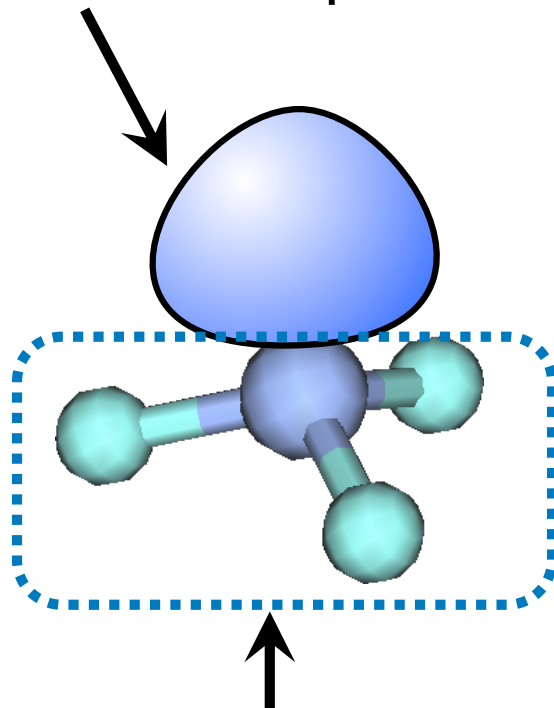


アンモニアの結合：N の混成状態は？



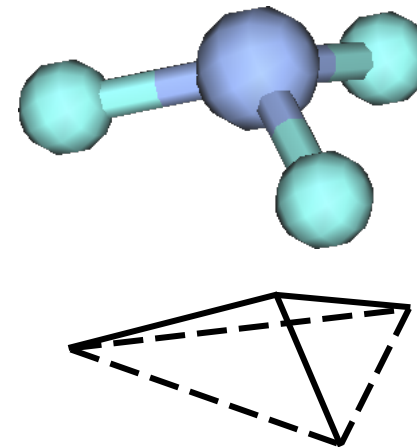
ローンペア

ローンペア： sp^3 混成軌道



N-H結合： sp^3 混成軌道

アンモニアは三角錐構造

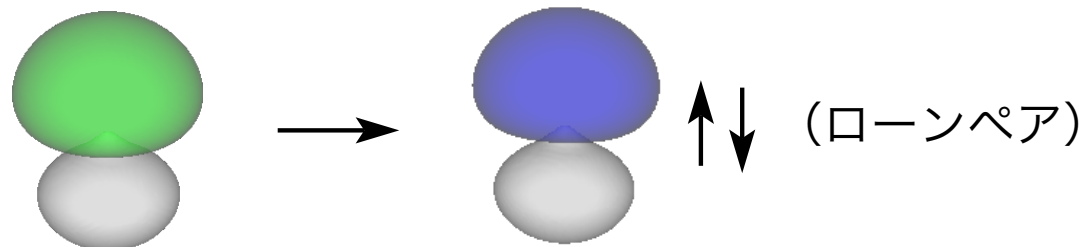
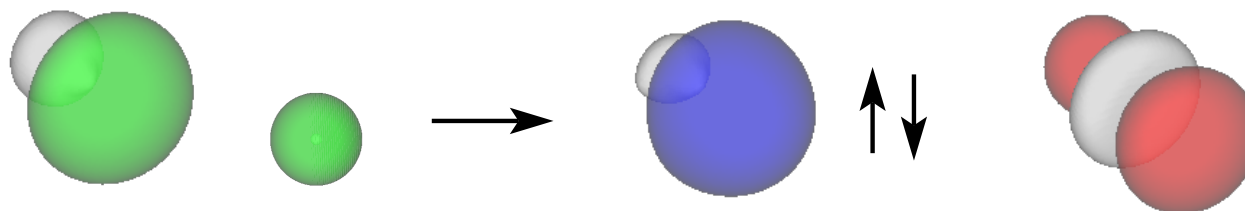
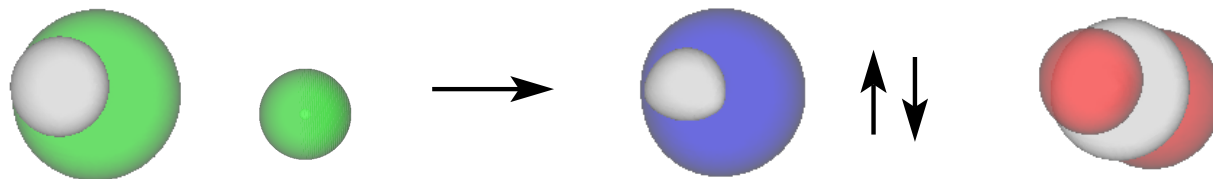
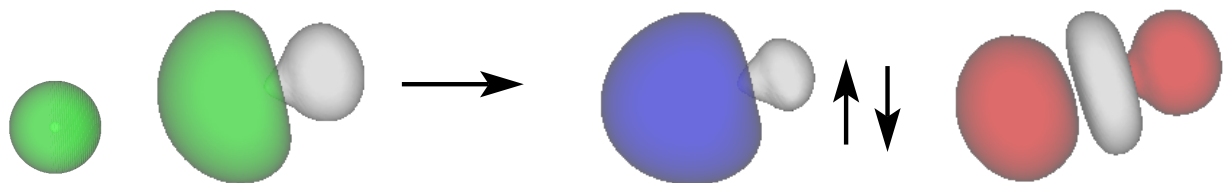


アンモニアの結合

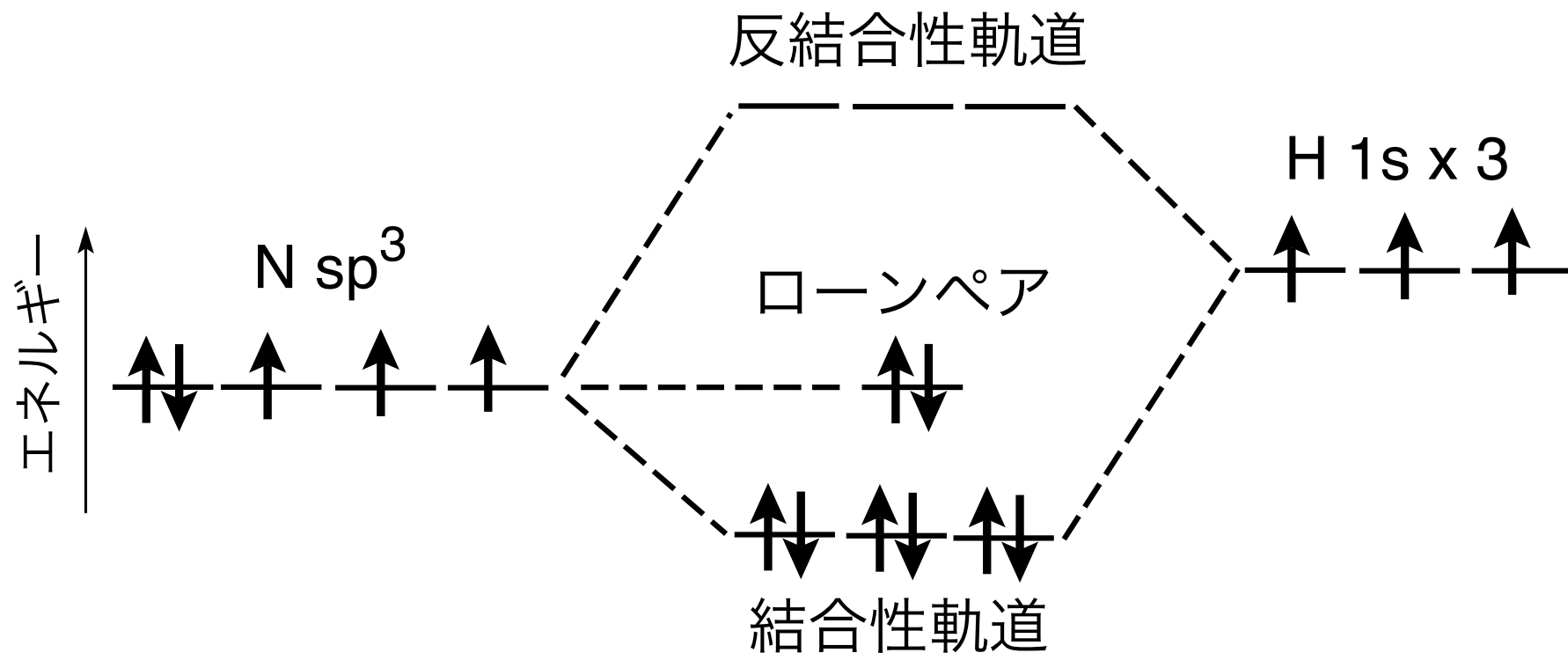
H 1s + N sp^3

結合性軌道

反結合性軌道



ローンペアの電子はエネルギーが高い

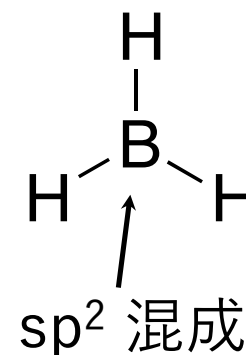
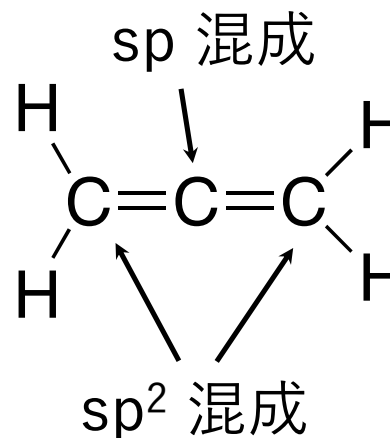
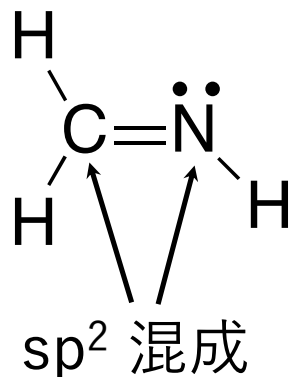
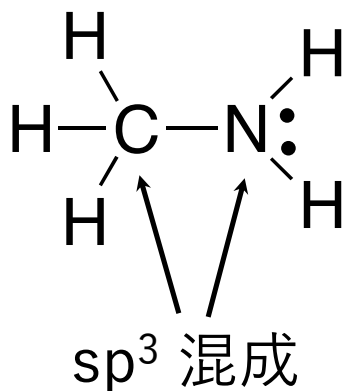


ローンペアの電子は結合電子よりもエネルギーが高い
→ 化学反応に関与しやすい

混成軌道の見分け方

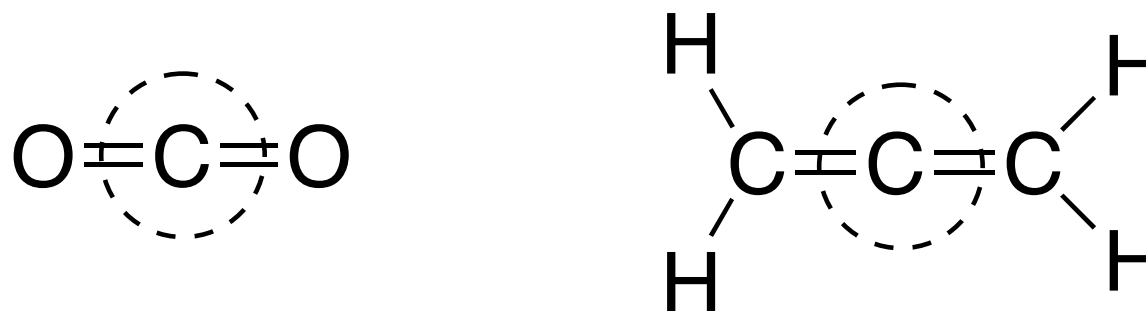
「結合している原子の数 + ローンペアの数」が

- ・ 4 個 → sp^3 混成
- ・ 3 個 → sp^2 混成
- ・ 2 個 → sp 混成

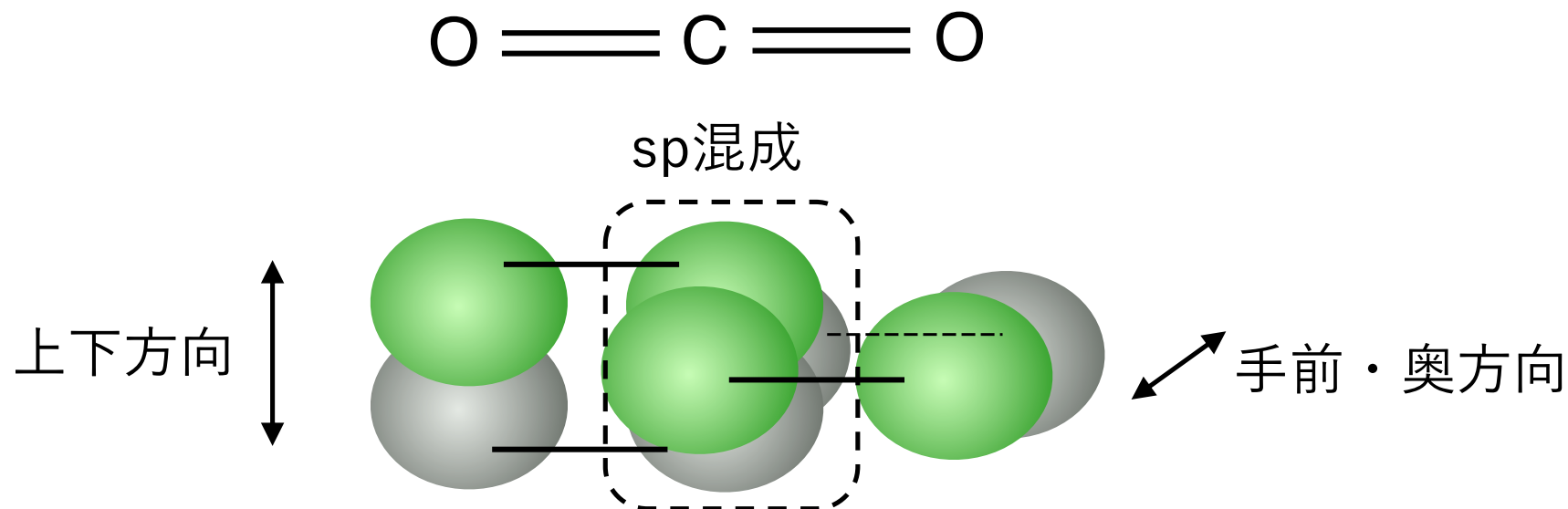


注意を要するケース①：二酸化炭素など

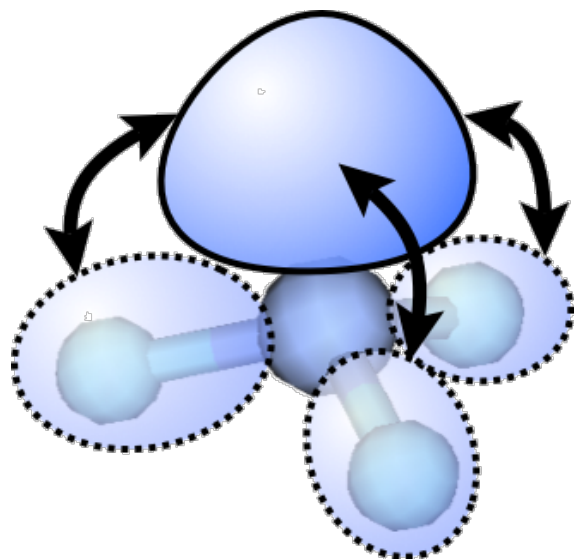
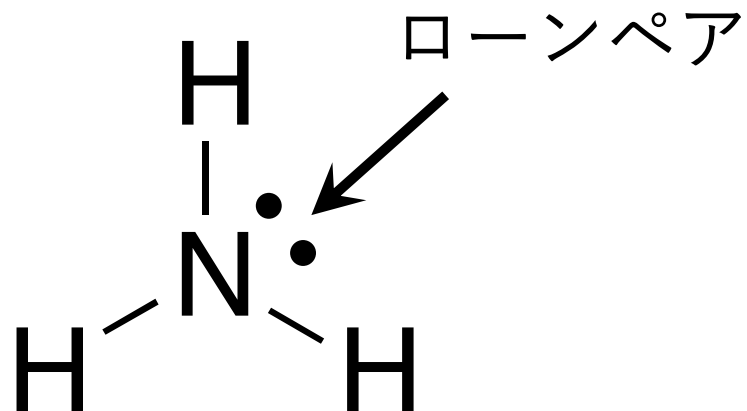
- 1 個の炭素原子が「2 個の原子とそれぞれ二重結合で結ばれている」とき、その炭素原子は sp 混成。



【二酸化炭素の π 結合】

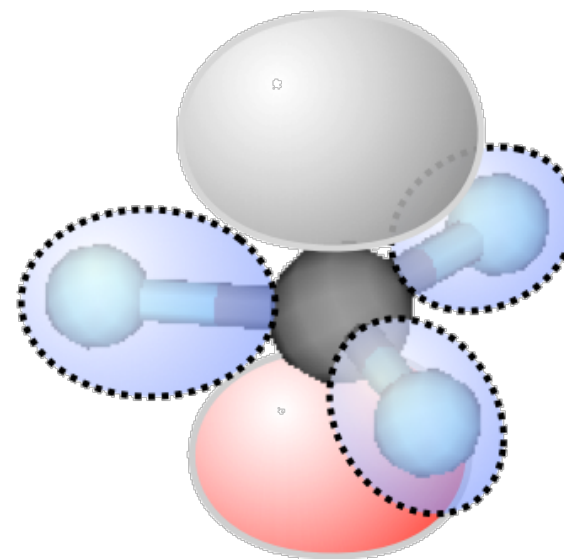
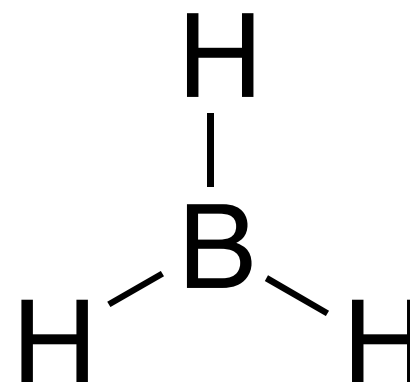


注意を要するケース②： NH_3 と BH_3 の違い



三角錐構造

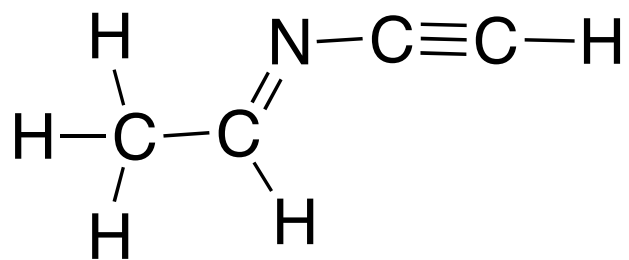
= ローンペアとN-H結合電子を
なるべく遠ざけるため



平面構造

= 2p軌道は空で、B-H結合電子
との反発は無い

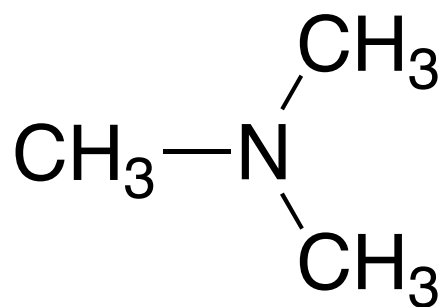
【練習問題】 下の分子の炭素原子・窒素原子はどういう混成状態と考えられるか。



補足：ローンペアについて

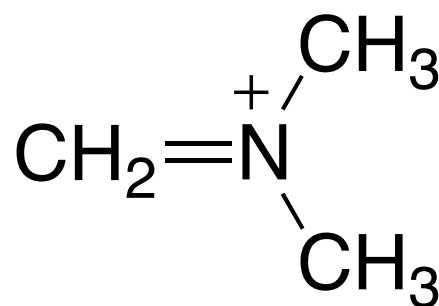
ローンペアがあるかどうか（あるとしたら何対か）は自分で電子を数えて判断しないといけない

（構造式に書かれているとは限らない）



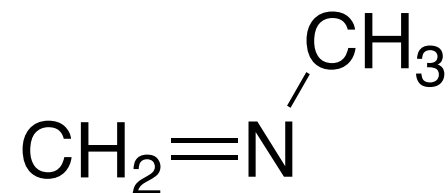
ローンペアあり

Nの価電子 5 個
－ 結合 3 本
＝ 残り 2 個



ローンペアなし

Nの価電子 4 個
－ 結合 4 本
＝ 残り 0 個



ローンペアあり

Nの価電子 5 個
－ 結合 3 本
＝ 残り 2 個

