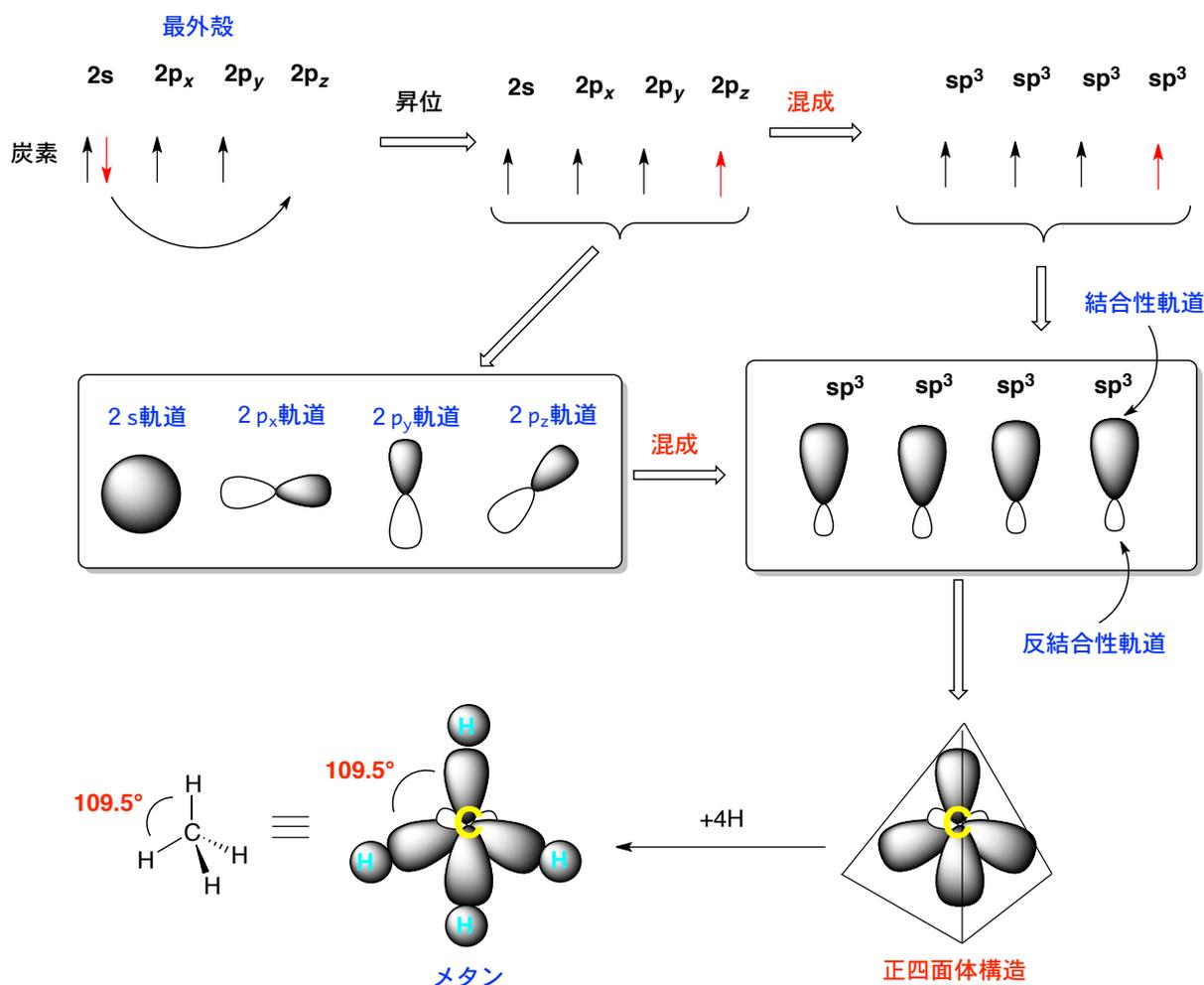


問題1：エタン（ $\text{CH}_3\text{CH}_3$ ）の  $\text{sp}^3$  混成軌道を図示せよ。

今回の小テストの課題はすべて**混成軌道**についてである。非常に重要であるので、しっかり復習してください。まず、なぜ炭素は4本の手（結合）を持つのかから理解する。メタン（ $\text{CH}_4$ ）を例に挙げ説明していく。炭素の最外殻には4つ電子が入っている。2s 軌道に2つ、3つの 2p 軌道のうち、2つに一つずつ電子が入っている。このままだと、共有結合は電子が一つ入っている  $2p_x$  と  $2p_y$  軌道しか作れない。（共有結合は通常、電子を一つずつ出し合って結合を形成する。）しかしながら、最外殻を満たすためには4本の結合を作る必要がある。（**オクテット則**。後、4つ電子を受け取ると炭素の最外殻は満たされる。）

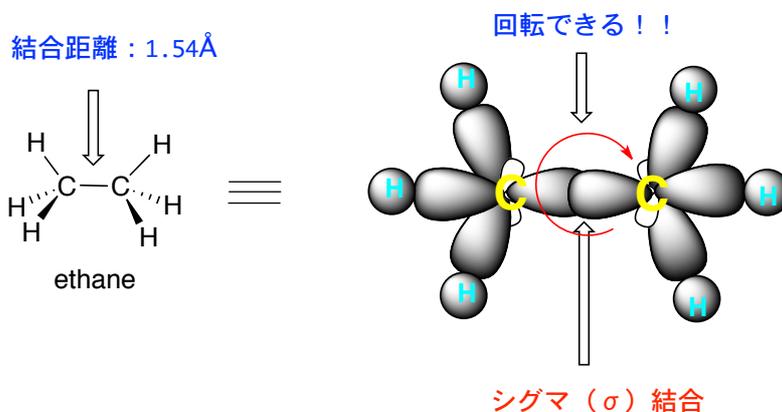


実際は、2s 軌道にいる電子が一つ  $2p_z$  軌道に飛んでくる（昇位）。そうすると、2s,  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$  にそれぞれ一つずつ電子が入り、4つの共有結合を作れるようになる。しかし、これまで学んだ軌道のままだと、結合を作ることにはできない。（不規則かつ、効率の悪い結合様式になってしまう。）そこで、4つの軌道がお互いに**混成**することで、新たな軌道を作る。1つのs軌道と3つのp軌道から混成される軌道を

**sp<sup>3</sup> 混成軌道**という。この**3**はp軌道の数を示す。**sp<sup>3</sup> 混成軌道**は大きなローブの**結合性軌道**と小さなローブの**反結合性軌道**からなり、これが重なり合って**正四面体構造**を形成する。なぜ、正四面体構造を取るかというと、**結合性軌道がお互いに最も離れた位置にくるように配置した結果**である。メタンの構造は sp<sup>3</sup> 混成軌道の結合性軌道と水素の 1s 軌道がお互いに重なって**シグマ (σ) 結合**を作ることにより形成される。(軌道が重なってできる共有結合のことを**シグマ (σ) 結合**という。) なお、最も水素が離れるように配置された際の結合間の角度は **109.5 度**である。なお、メタンは**非極性分子**である。(電荷の偏りが無いことは覚えておこう。)

以上の知識からエタンの sp<sup>3</sup> 混成軌道を図示してみよう。エタンの場合は炭素-炭素結合を持っており、これは混成軌道同士でσ結合を形成している。このσ結合は**回転できる**ことを覚えておこう。この自由回転により、有機化合物や有機高分子(タンパクなど)が大きな自由度を獲得している! また、エタンの炭素-炭素結合の距離は 1.54 Å (オームストロング) である。オームストロングは長さの単位で 1 Å は 0.1nm (ナノメートル)。1nm は 0.000001mm。つまり、1 Å は 0.0000001mm。

**注!** なお、描画ソフトの関係でローブに色が付いているが、テスト等ではローブの中を塗りつぶす必要はありません。また、反結合性軌道は示さなくても良い(ぐちゃぐちゃになるので。でも存在を忘れないで。)

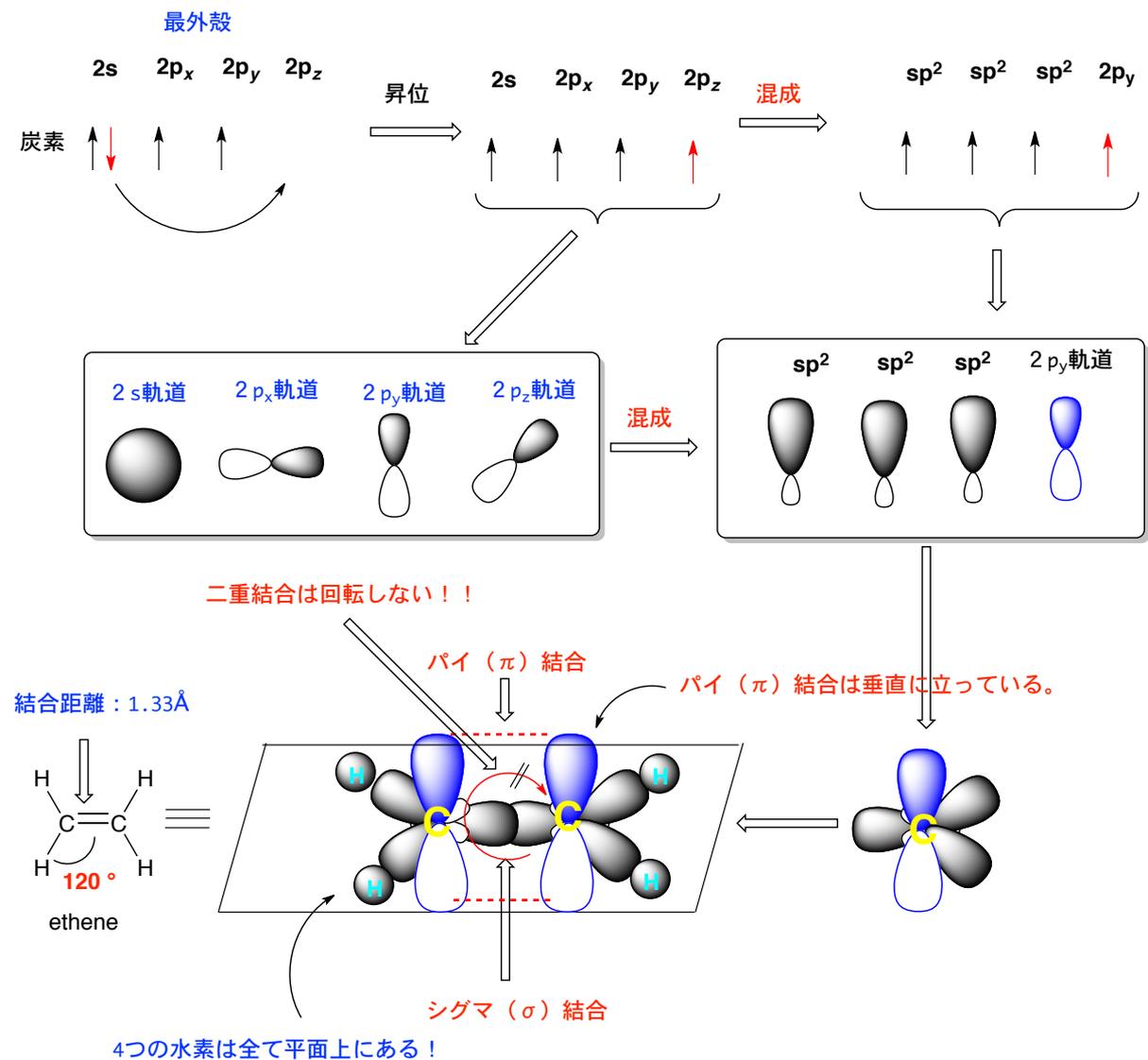


問題 2: エテン (CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>) の sp<sup>2</sup> 混成軌道を図示せよ。

エテンは炭素-炭素**二重結合**を持つ。この時の軌道は **sp<sup>2</sup> 混成軌道**を取る。二重結合形成のためには一つの p 軌道を残す。したがって、3つの sp<sup>2</sup> 混成軌道と一つの p 軌道から結合ができる。**二重結合の炭素-炭素間**は**一つのσ結合と p 軌道が重なり合うこと**でできる**パイ (π) 結合**からなる**剛直な結合**である。二重結合上の置換基(今回は水素)は全て平面上に配置され、π結合は垂直に形成される。そのため、**この炭素-炭素二重結合を軸にして回転することはできない**。(回転させるためにはπ結合をねじる必要があり、そのためのエネルギーは極めて大きい。) このため、二重結合上に異なる置換基がついた場合、単結合(σ結合)では観測されない**幾何異性体(シス-トランス異性体)**が存在する。同じ向きに2つの置換基がついている場

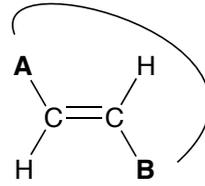
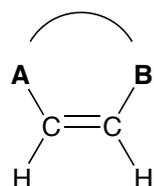
合を**シス配置**といい、逆向きについている場合を**トランス配置**という。シス配置の方が電子のおよび立体的に不利である。（そのうち、教えます。）

また、エテンの**二重結合の距離は  $1.33\text{\AA}$** であり、**単結合よりも短い**。結合角は最も離れて配置する **120度**である。また、結合が2つあるので、当然、**結合解離エネルギーは単結合よりもはるかに大きい**。



シス配置 (cis)

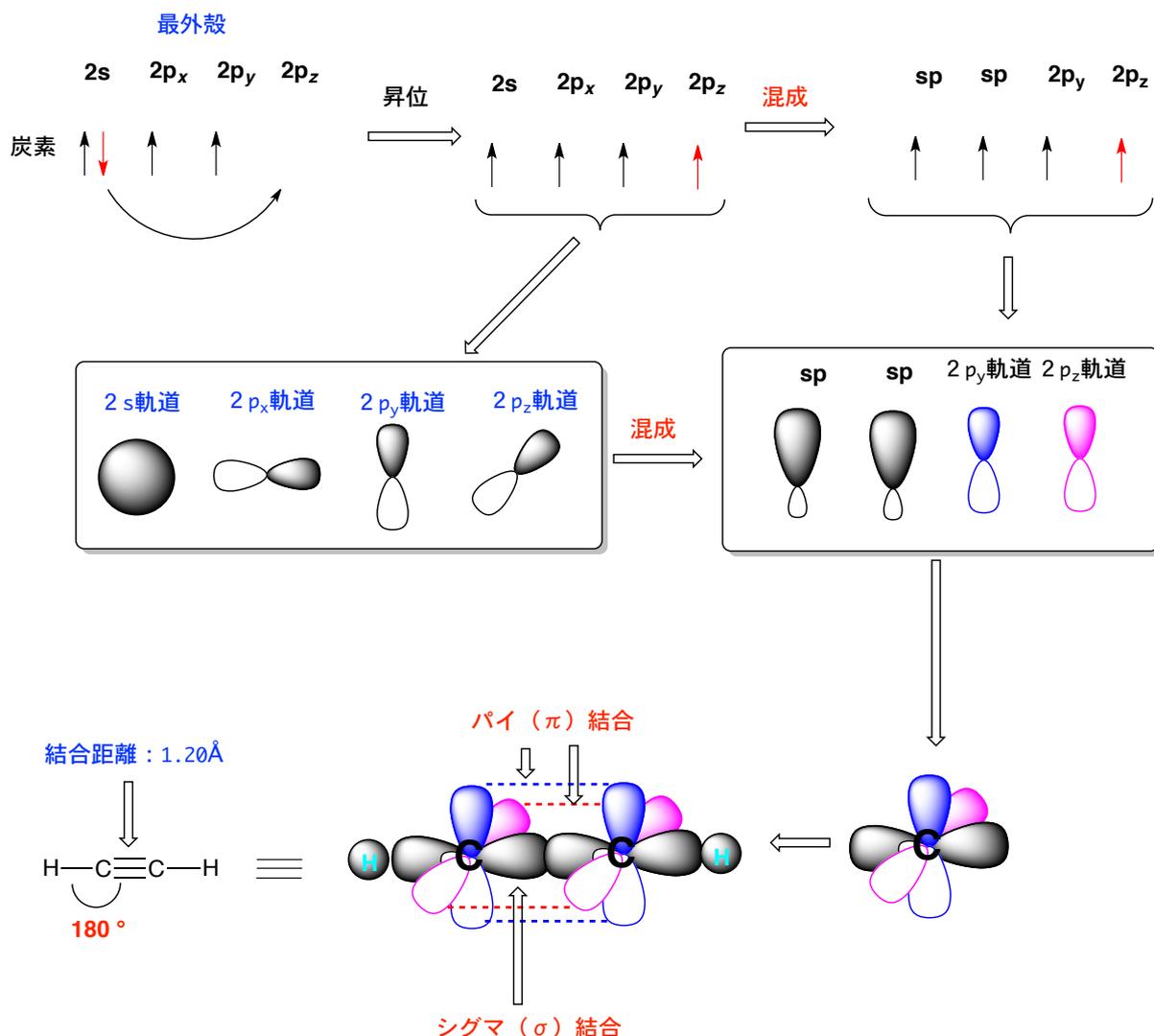
トランス配置 (trans)



幾何異性体 (シス-トランス異性体)

問題3：エチン（アセチレン、CHCH）の sp 混成軌道を図示せよ。特に角度がわかるように。

エチン（アセチレン）は炭素-炭素**三重結合**を持つ。この時の軌道は **sp 混成軌道**を取る。三重結合形成のためには2つの p 軌道を残す。**三重結合は1つのσ結合と2つのπ結合からなる直線的な結合になる**。結合角は直線である **180度**、結合距離は **1.20Å**と二重結合よりさらに短くなる。**結合解離エネルギーも当然二重結合より大きい**。



まとめ：すべての混成軌道をきちんと書けるようにしておく。どの混成軌道がもっとも結合距離が短いのか？結合解離エネルギーは？結合角は？π結合って何？σ結合は？ここに書いてあることは何を聞かれても答えられるように！

また、小テストには出していないが、**メチルカチオン**、**メチルラジカル**、**メチルアニオン**、**酸素（水）**、**窒素（アンモニア）**の軌道図（教科書 P26～30）も合わせて覚えておいてください。