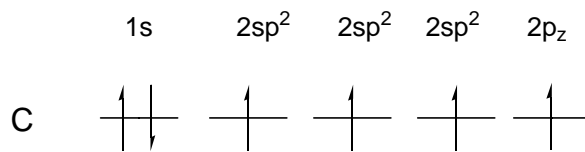


## 混成軌道

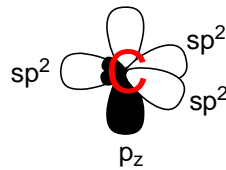
### 式の巻

#### sp<sup>2</sup>軌道

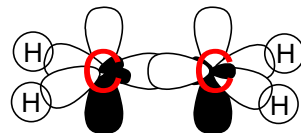
エチレンやベンゼンなど、二重結合を形成している炭素はsp<sup>2</sup>軌道である。sp<sup>2</sup>軌道（sp<sup>2</sup>混成軌道）はその名の通り、s軌道1つとp軌道2つが混じり合っている。すなわち、前回のsp<sup>3</sup>軌道同様、炭素原子の2軌道の電子2つのうちの1つが昇位してp軌道に入るまでは同様だが（s軌道1つとp軌道3つに電子が1つずつ入った状態になっている）、この状態からs軌道1つとp軌道2つが混じり合い、3つのsp<sup>2</sup>軌道と1つのp軌道となる。



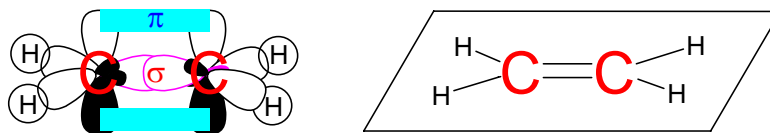
つまり、p<sub>z</sub>軌道はそのままで、3つのsp<sup>2</sup>軌道（p<sub>z</sub>軌道は関係していないので、z軸方向の成分を含まない）が互いに電子反発を避ける方向（正三角形の頂点に向かう方向）を向くので、sp<sup>2</sup>炭素の形は、



となる。先に（ ）内に示したように、3つのsp<sup>2</sup>軌道はz軸方向の成分を含まないので、xy平面上に正三角形の形で存在する。したがってエチレンの構造は



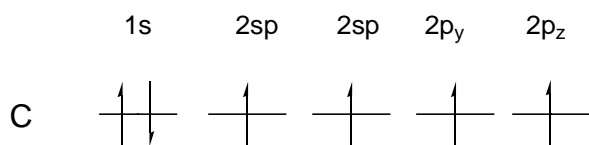
となる。さて、ここでC-C結合に注目しよう。2つのCは前回のエタンの時と同様、同じ色の大きい重なり部分が重なっている。これがσ結合である。一方、2つのp<sub>z</sub>軌道も同じ色で並んでいる。これも色（位相）が同じなので、くっつくことができる。この結合をπ結合という。この結合は、軌道の側面で重なり合うことによってできるため、σ結合よりも弱い。



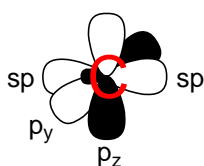
上左図は一見、σ結合1本とπ結合2本の3重結合に見えるが、π結合は上下セットで1本分（2つの軌道が重なって1つの結合ができる）なのでこれは2重結合である。σ結合だけならC-Cは自由回転できるが、π結合が存在すると、p<sub>z</sub>軌道は並んでいなければならないため、2重結合は回転ができない。また、p<sub>z</sub>軌道が並んでいるために、4つの水素は同一平面上に存在することになる。

## sp 軌道

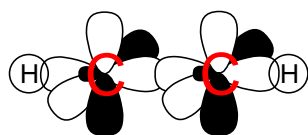
アセチレンを形成するsp混成軌道 (sp軌道) についても、上と同様な考え方で組み立てることができる。今度は1つのs軌道と1つのp軌道が混じり合い2つのsp軌道ができあがる。ここでp<sub>y</sub>軌道とp<sub>z</sub>軌道はそのままである。



p<sub>y</sub>軌道とp<sub>z</sub>軌道はそのままなので、できたsp軌道はx成分のみを含み、2つの軌道が反発をさせる方向、つまり直線上 (x軸上) の反対側を向く。



sp<sup>2</sup>軌道の時と同様、sp軌道でσ結合を形成する (p軌道よりもs軌道の方がポテンシャルエネルギーが低いため、それらが混じり合ったsp軌道はp軌道 (p<sub>y</sub>軌道およびp<sub>z</sub>軌道) よりもポテンシャルエネルギーが低い。このため混成軌道で共有結合 (σ結合) を作った方が、p軌道でσ結合を作るよりも安定になる) ので、アセチレンの構造は以下のようなになる。



結合の種類を書くと、



となり、3重結合の内訳は、σ結合1本とπ結合2本である。