

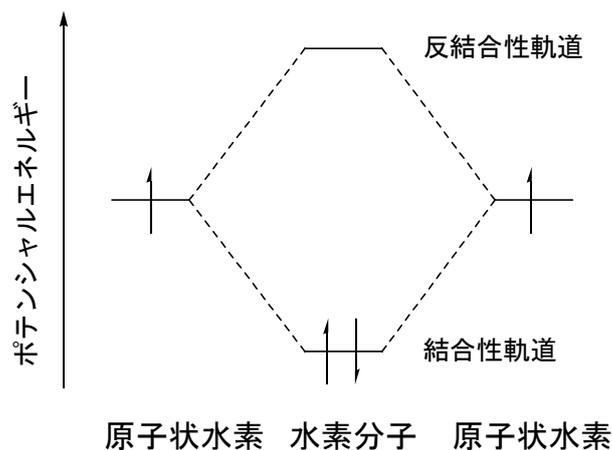
混成軌道

壺の巻

どんな教科書にも書いてあるし、大学に入るとまず最初に習うことなのに、どういうわけか皆、習ったこと自体、忘れてるのが混成軌道。大学生は皆、「見たことはある」「聞いたことがある」と答えるので、ちゃんと習っているのです。炭素は sp 、 sp^2 、 sp^3 の3種類の混成軌道をとることができます。実はこの「3種類の混成軌道をとれる」ことが、有機化合物の多様性や反応性に大きく関与し、しいては生命現象の大事な要素となるのです。ざっくりとですが、基本の基本から復習しましょう。

まずは水素で共有結合というものを考える

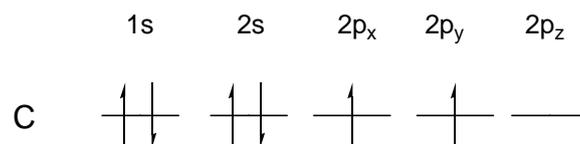
皆さんご存知のように水素は分子を形成する。なぜ原子状水素でとどまらないのか？それは2つの核で2つの電子を引っ張り合う「共有結合」の状態が安定だからである。下図はよく見かけるであろう。



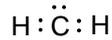
つまり、共有結合を作れば安定になれる。

炭素について考える： sp^3 軌道

では、同様な考え方を炭素原子にあてはめてみる。炭素原子をエネルギーの低い方から $1s$, $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ の順で電子を詰めていくと、全部で電子6つであるから以下のようなになる。



これでは不対電子2個なので、水素と結合を作る際は CH_2 となる。これでめでたし、めでたし、となるか？そうはならないのである。 CH_2 は炭素のL殻 ($2s$ 軌道+ $2p$ 軌道3種) が満たされない (入っている電子は6つ)、つまりオクテット則 (L殻に電子は8つ入った状態が安定) を満たさない。



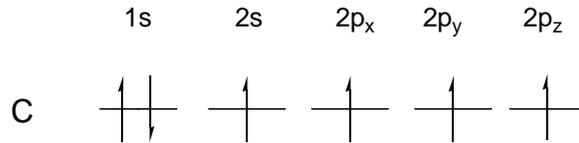
では、どうすればもっと安定になれるか？これまでに出てきた「安定化の要素」を考えると、

1. オクテット側を満たす。

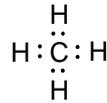
2. 共有結合の数が多。

を満たすものを探せばよい。

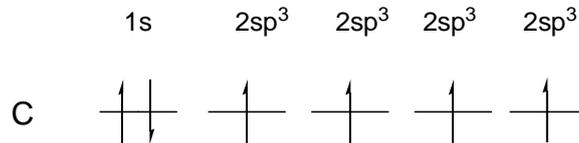
ここで、2s 軌道の一つの電子が 2p 軌道に入った（昇位した、という）状態を考えると、



となり、不対電子は4つであるから、4つの水素原子と結びつく。



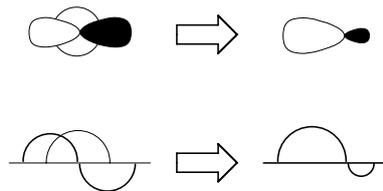
これは、オクテット側を満たすし、先ほどの例よりも共有結合の数が多いので、より安定なはずである。ではこれで話は終わりか？そうではない。よく考えてみると、2s軌道は球形、2p軌道は亜鈴型なので、どうしても2s軌道の電子と2p軌道の電子（3つ）との電氣的反発が生じてしまう。ではこれを回避する手はないか？ある。幸い、2s軌道と2p軌道のエネルギーは近いので、これらを混ぜてsp³混成軌道とし（s軌道1つとp軌道3つを混ぜてできるのでsp³混成軌道、4つの軌道を混ぜるので、4つのsp³軌道ができる）、4方向（正四面体ができる方向）に分散してしまえばよい。



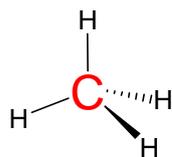
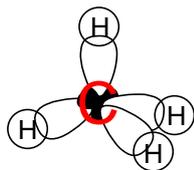
ここで、軌道の形はどうなるか？軌道は波動関数で表されるので、波と考えればよい。



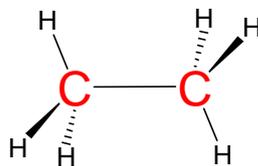
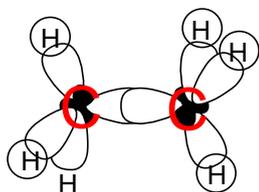
2s 軌道は球形、2p 軌道は亜鈴型であり、p 軌道の色の違いは+と-（位相が逆）を表わすから、2s 軌道と 2p 軌道が混ざると、



と、大小を合わせた亜鈴形となる。これが4つ存在し、互いに電子の反発を避けるために正四面体ができる方向に分散するので、メタンの形は



となるのである。また、エタンの形は



となる。