



# 化学 IA

担当 佐藤 しのぶ

11回目(2015.7.14)

## 6・5 混成軌道

メタン $\text{CH}_4$

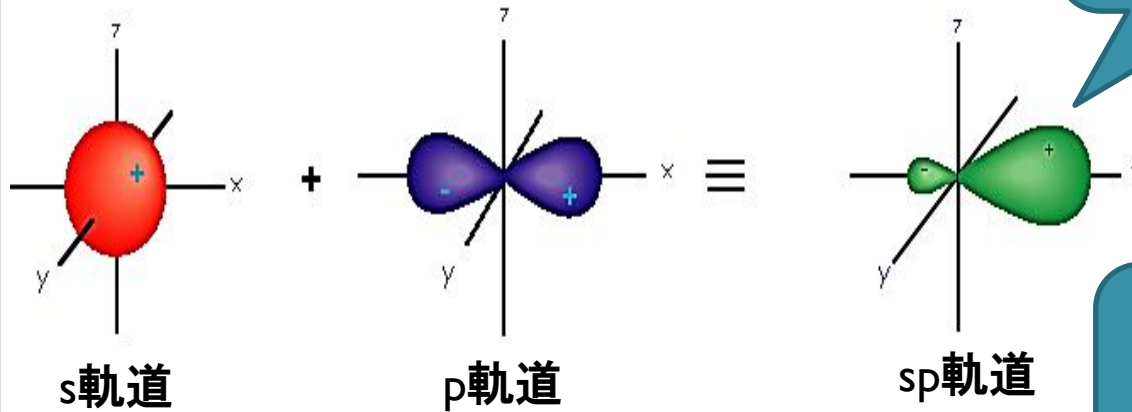
Cの価電子  
 $2s^2 2p^2$



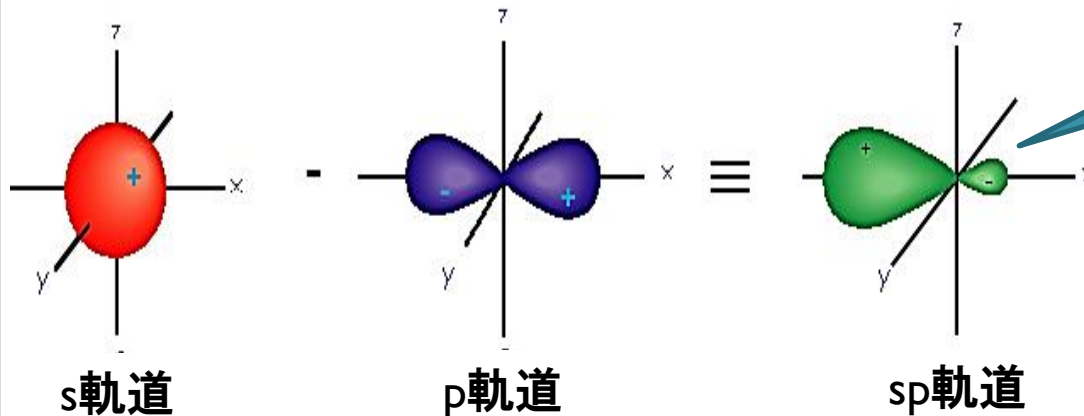
水素と結合  
するには？

<黒板で説明>

# 混成軌道の考え方

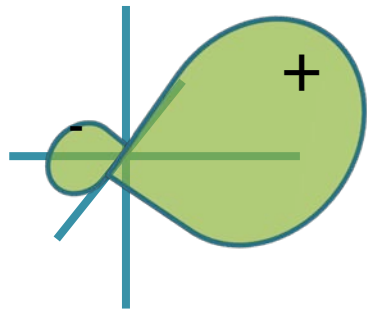


同じ符号のものは、大きくなる



違う符号のものは、小さくなる

# 混成軌道の特徴



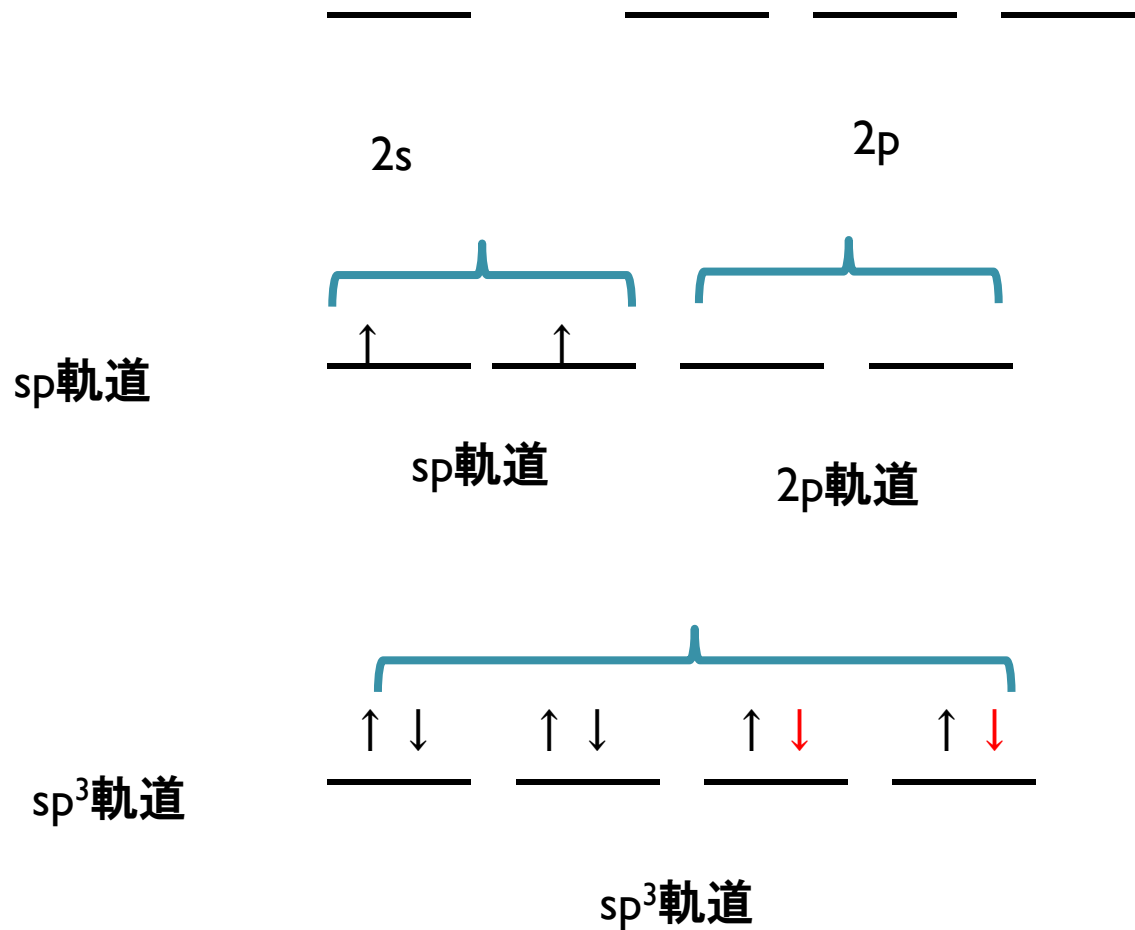
- 軌道が最も伸びた方向はよく重なることが出来る。  
共有結合形成に加わる際の方向性が強い
- 他の原子の軌道と効率よく重なることが出来る。  
混成軌道から生じた結合は、通常の原子軌道  
から生じた結合よりも強い傾向がある。

s軌道、p軌道の重なり・・・sp軌道、sp<sup>2</sup>軌道、sp<sup>3</sup>軌道

s軌道、p軌道、d軌道の重なり・・・sp<sup>3</sup>d軌道、sp<sup>3</sup>d<sup>2</sup>軌道

各軌道の形は  
図6・15参照

# sp軌道、sp<sup>3</sup>軌道について





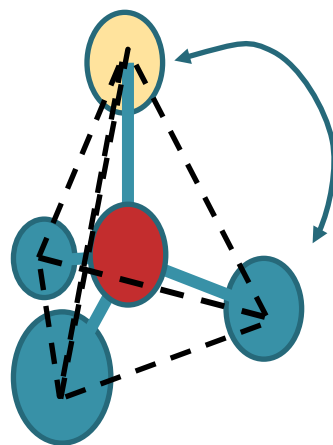


# 配位共有結合の場合

## アンモニウムイオン



空の1s軌道とアンモニア分子の窒素上の孤立電子対の重なりあわせによって生じる



結合角：109.5°



# 6・6 多重結合

2重結合 or 3重結合

宿題の答え

$\sigma$ 結合とは

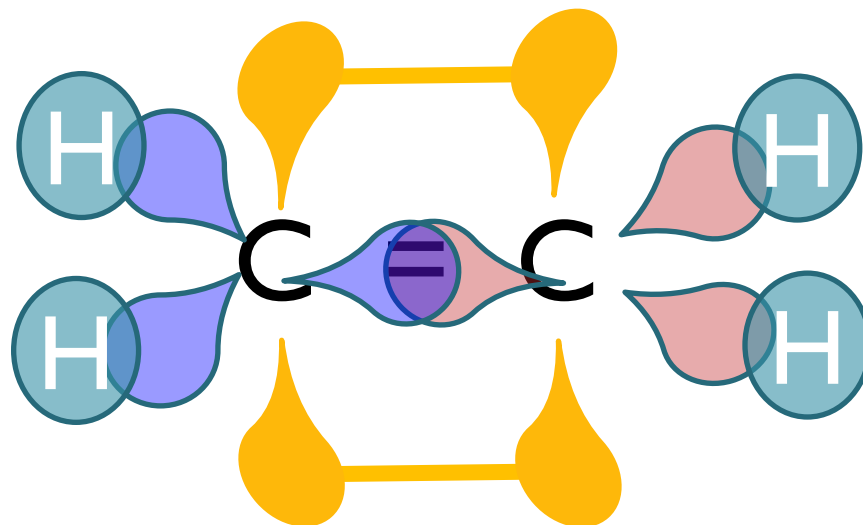
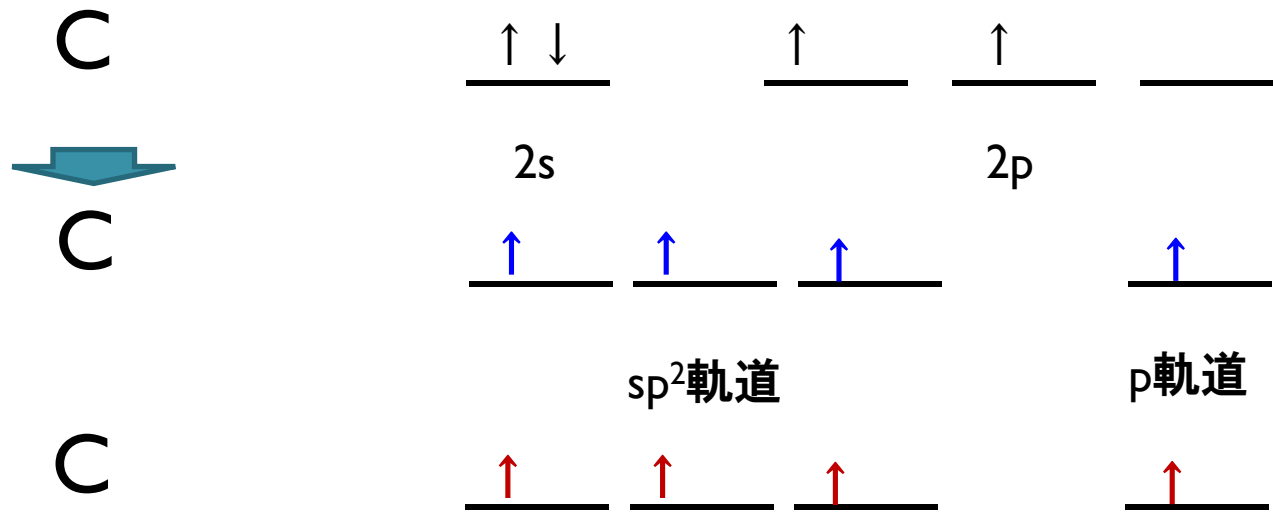
隣接した原子の混成軌道の重なりによって生じる結合

$\pi$ 結合

混成に関与していないp軌道に不対電子が存在するとき  
互いに形成された結合

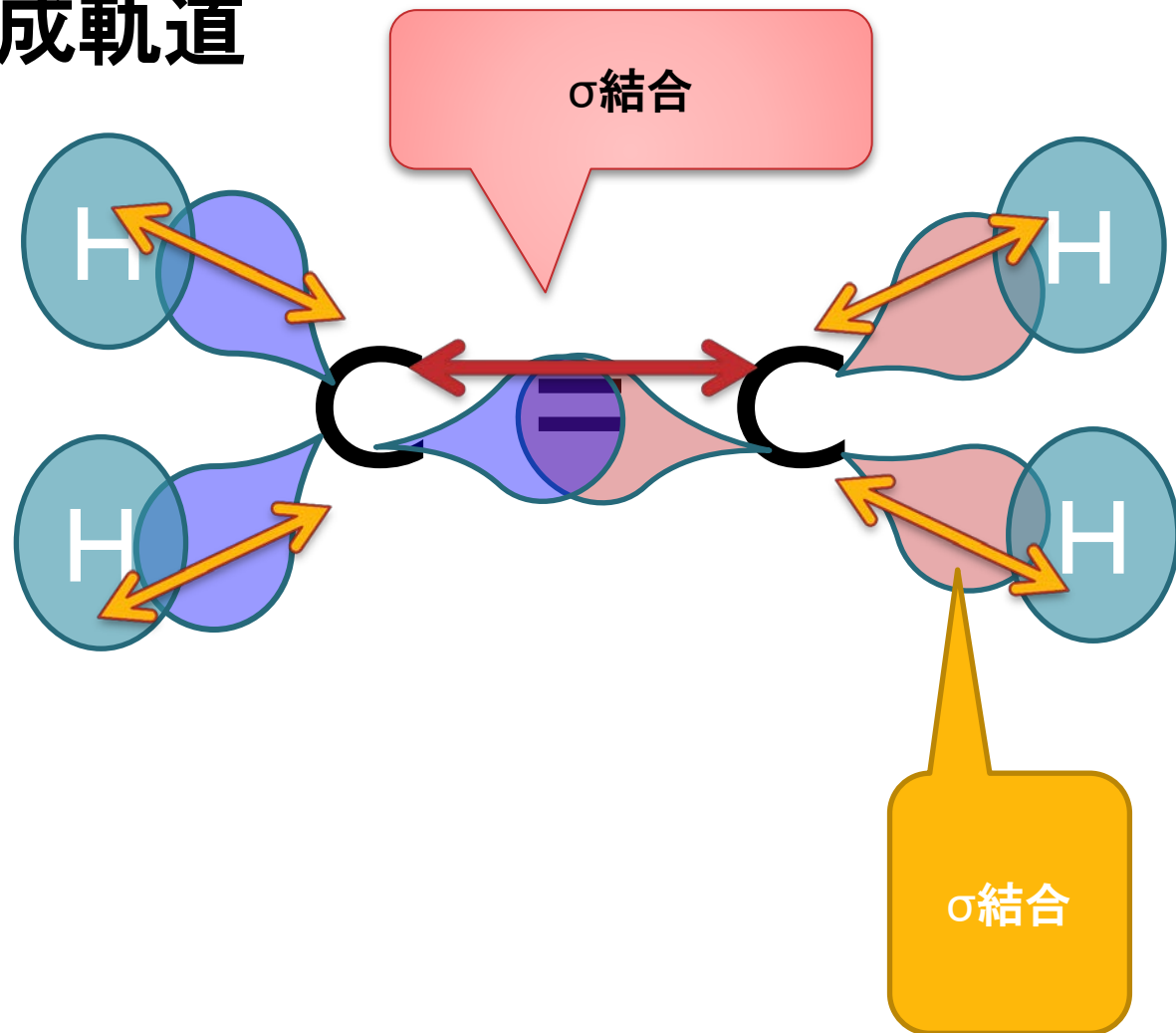
# エチレンの場合

SP<sup>2</sup>混成軌道を使う



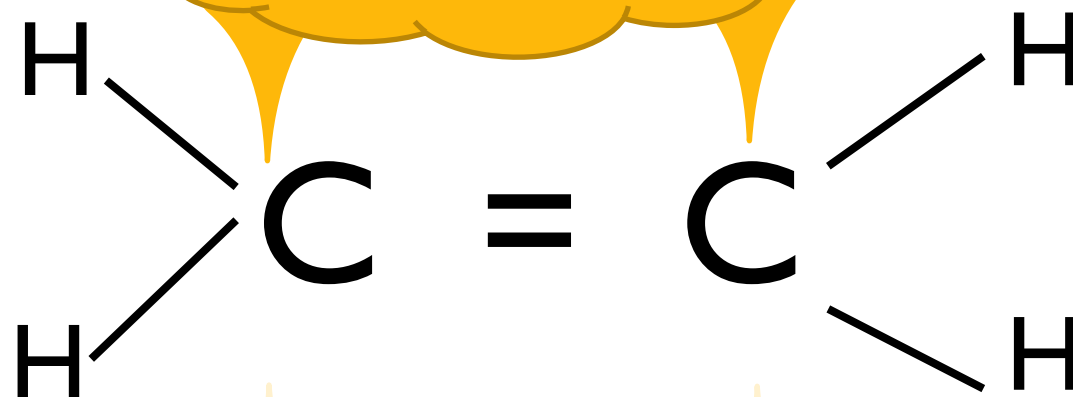
# エチレンの場合

SP<sup>2</sup>混成軌道



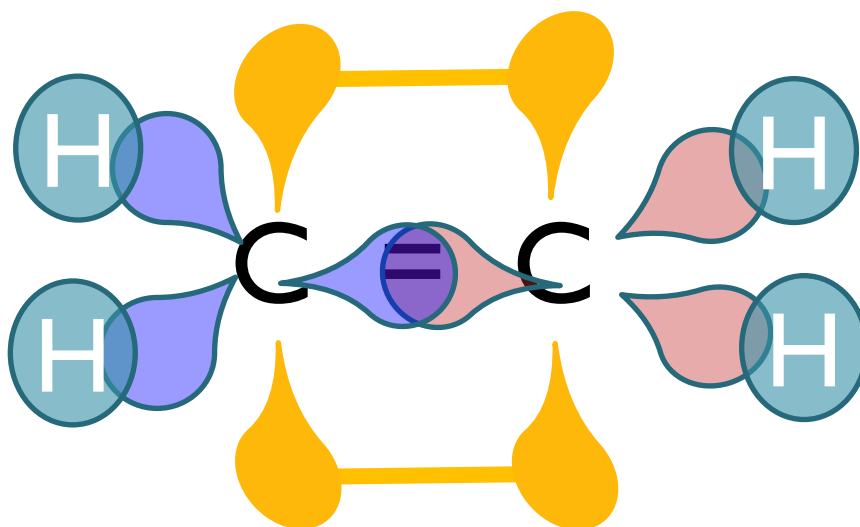
# エチレンの場合

P軌道



$\pi$ 結合  
上下でひと組

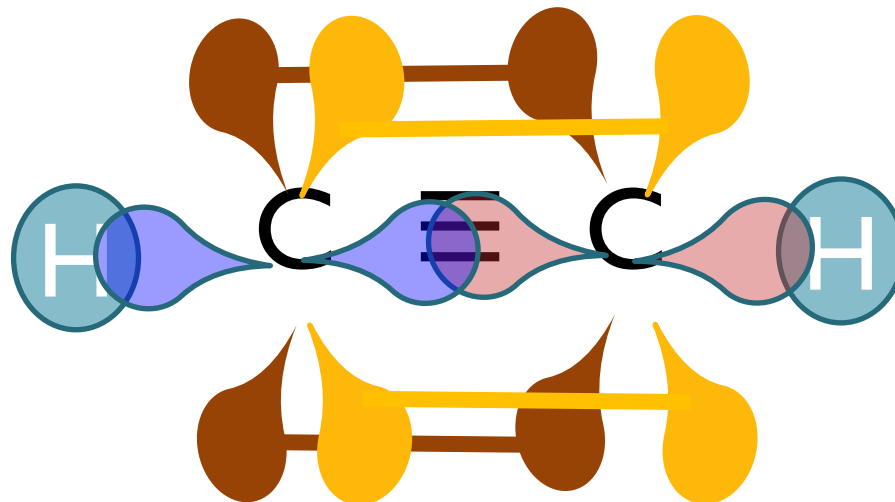
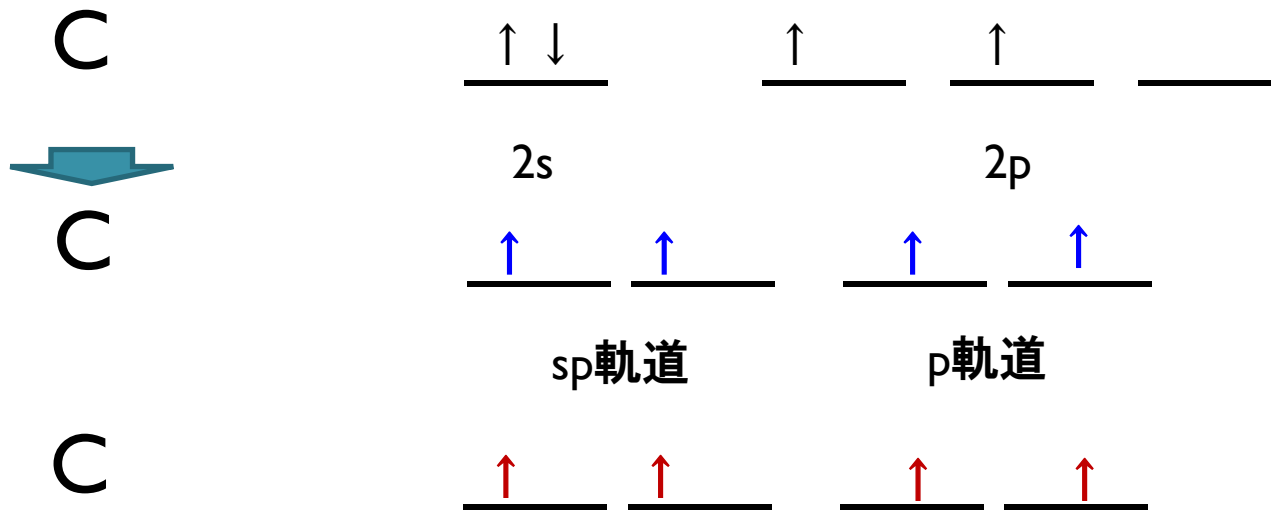
# エチレンの結合



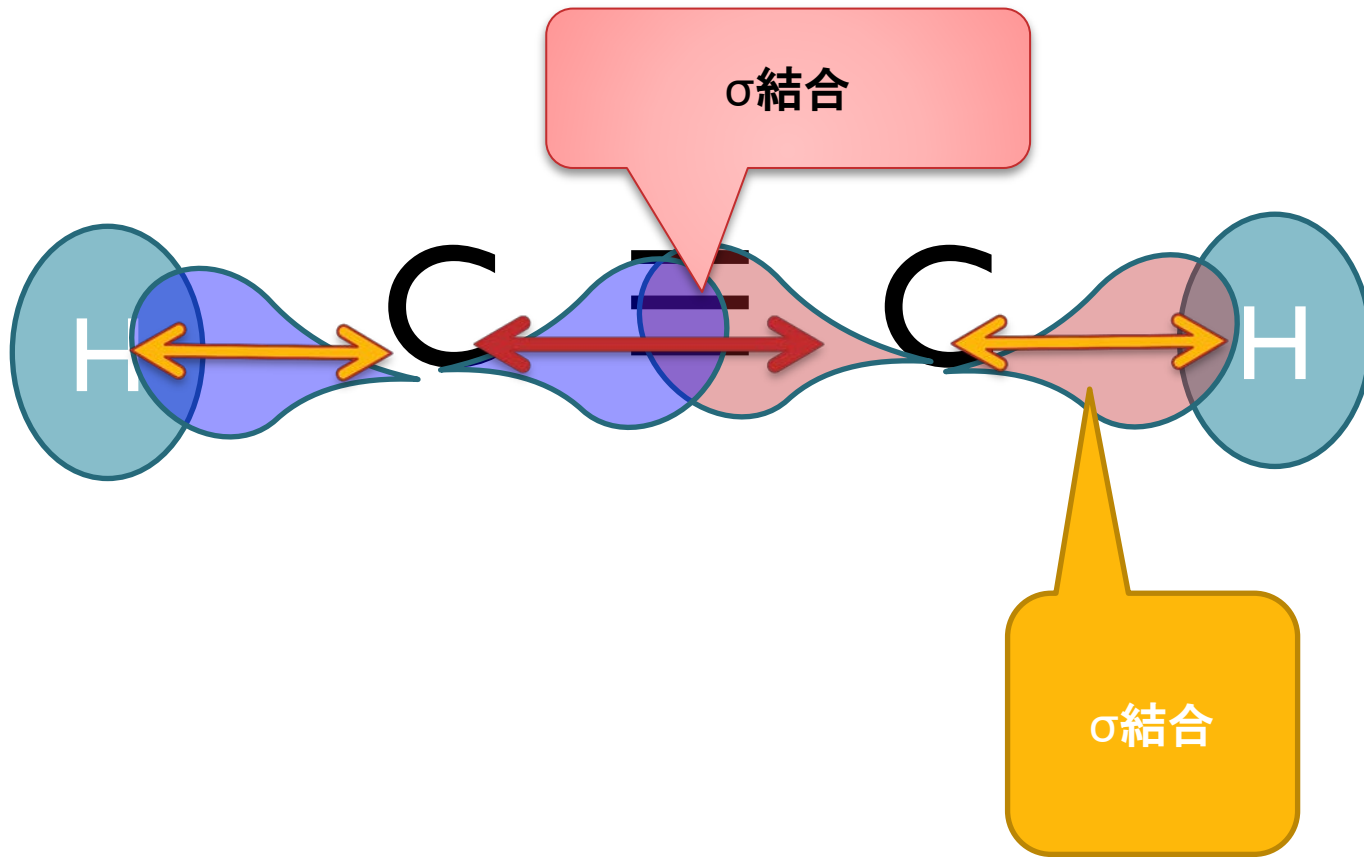
C-C σ結合 1つ  
C-H σ結合 4つ  
C-C π結合 1つ

# アセチレンの場合

SP混成軌道を使う

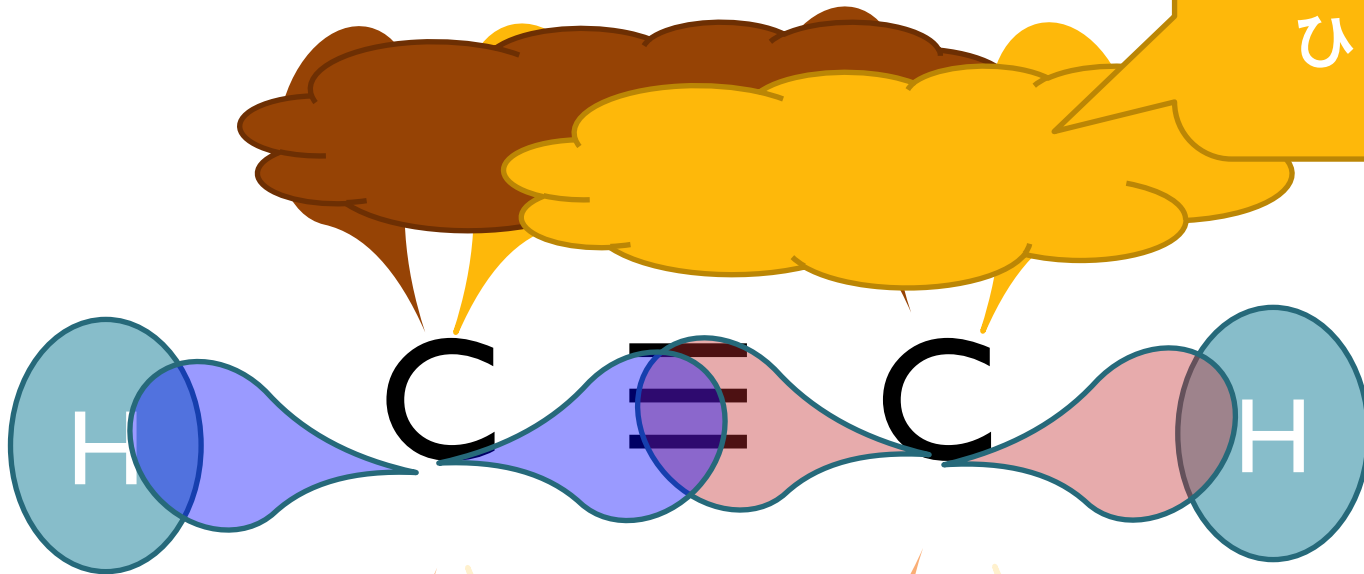


# アセチレンの場合



# アセチレンの場合

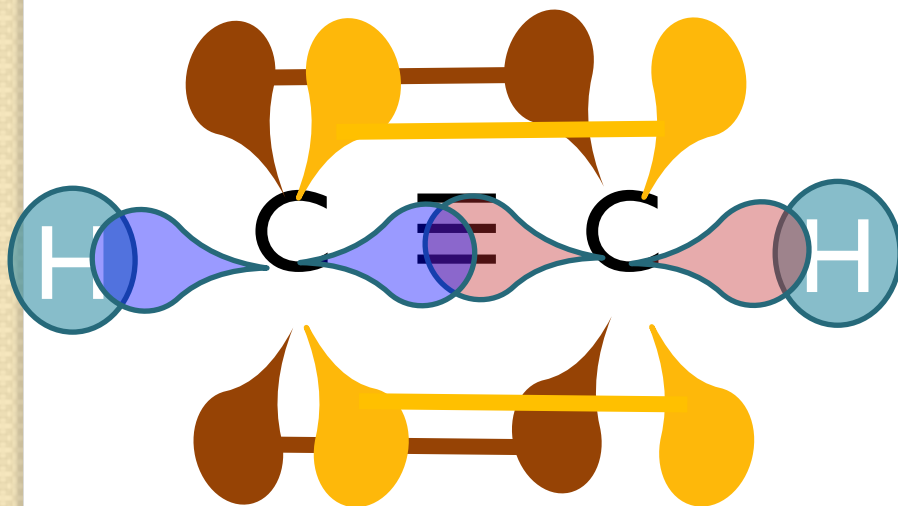
$\pi$ 結合  
ひと組目



$\pi$ 結合  
ふた組目



# アセチレンの結合



C-C σ結合 1つ  
C-H σ結合 2つ  
C-C π結合 2つ

# まとめると

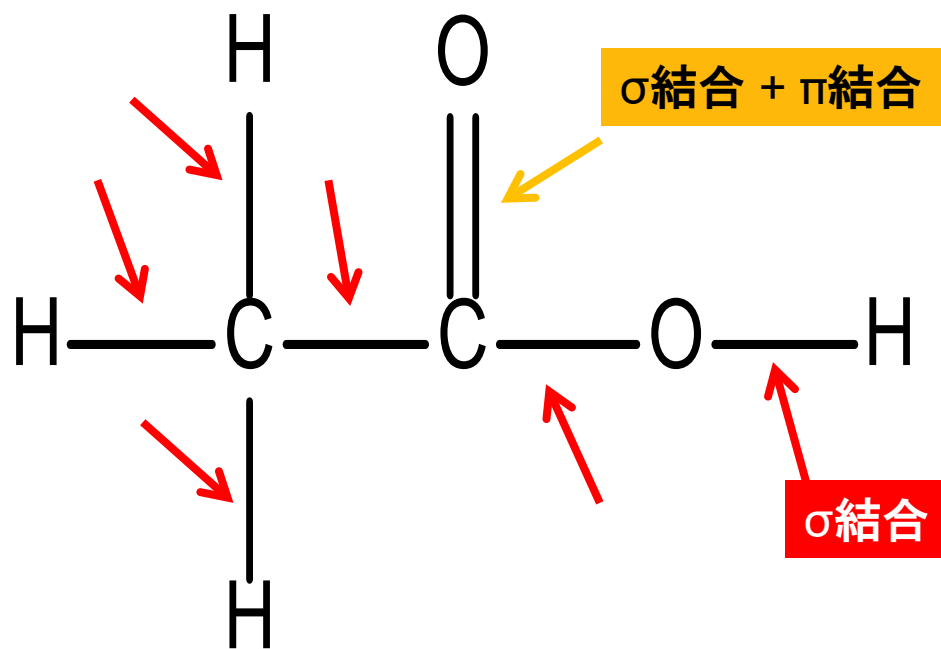
単結合 ・ ・ ・  $\sigma$ 結合 1つ

二重結合 ・ ・ ・  $\sigma$ 結合1つと $\pi$ 結合1つ

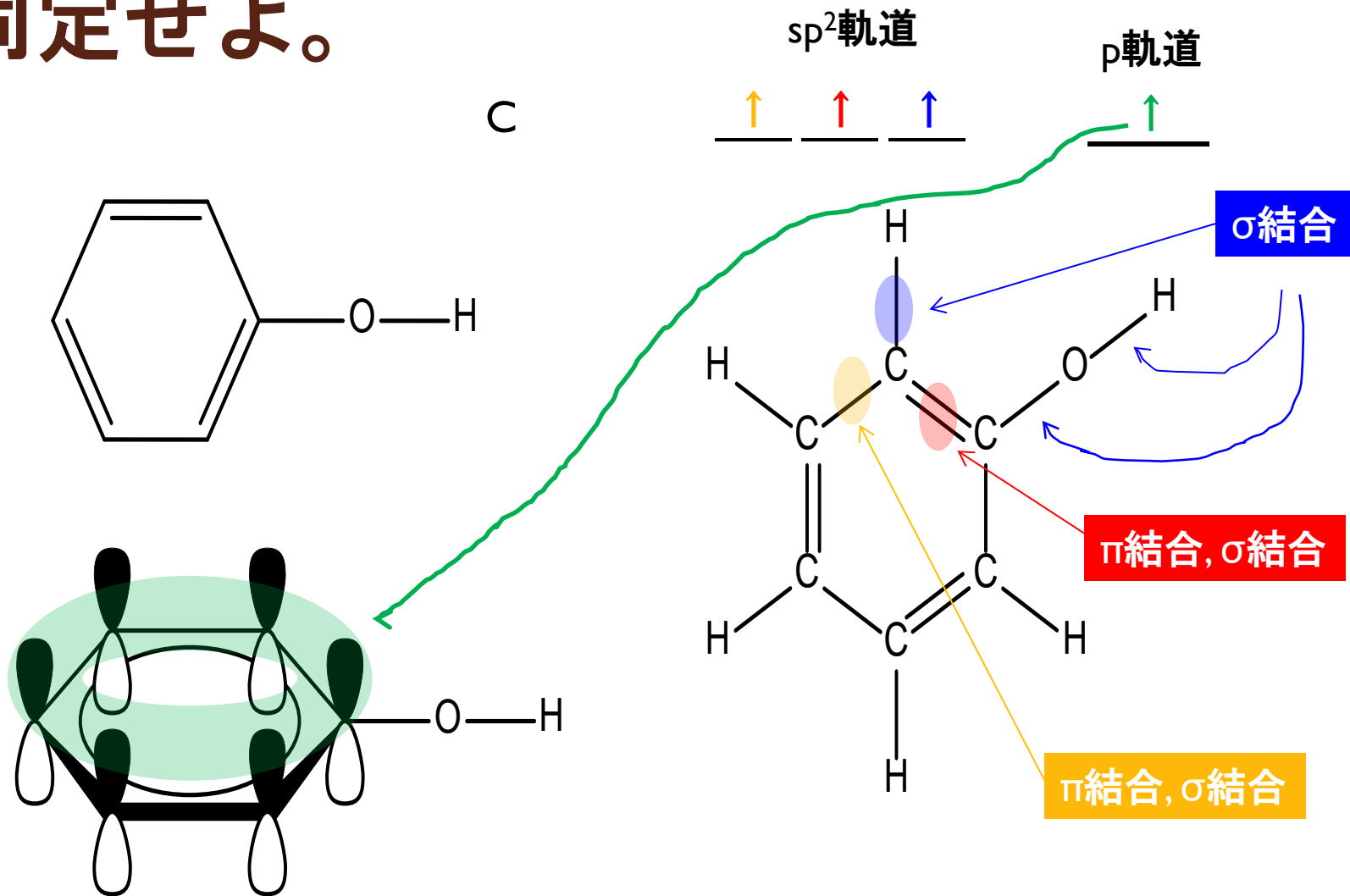
三重結合 ・ ・ ・  $\sigma$ 結合1つと $\pi$ 結合2つ

# 分子中の結合を調べる

例題 6・11 分子中の原子によって用いられる $\sigma$ 結合、 $\pi$ 結合を同定する。

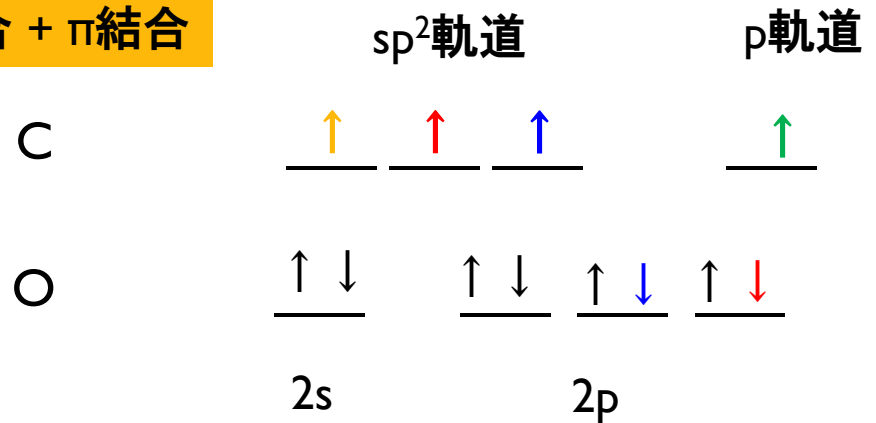
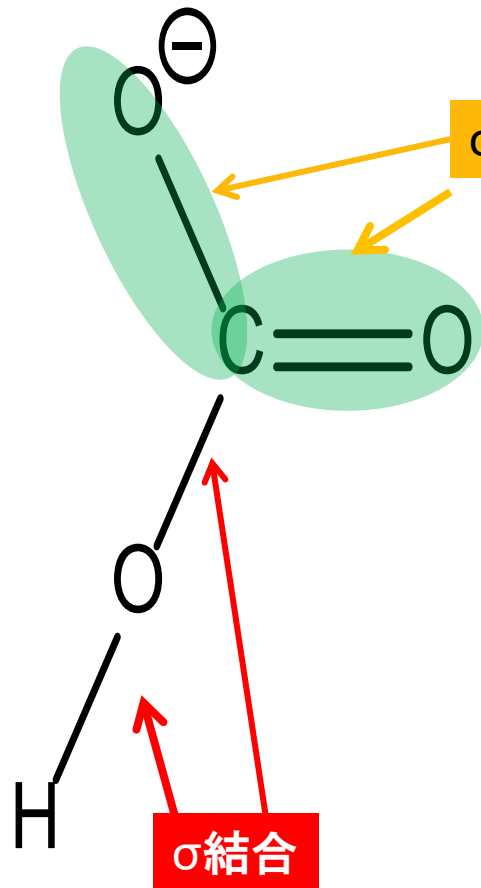


# フェノールの分子中の結合を 同定せよ。



# 炭酸イオンの分子中の結合を同定せよ

共鳴構造なので、全体が $\pi$ 結合している、C-O 結合は $\sigma$ 結合



電子がどのように軌道に入っているのか、  
記載しにくい

分子軌道理論を使う

## 6・9 分子軌道理論

分子は原子のある配置を含み、  
ひと組の分子軌道がこれらの核の周りに従う。  
分子の電子構造は、  
原子軌道に電子を入れるときに用いた  
規則に従って、これらの分子軌道に  
適当な数の電子を与えることによって得られる。

# 分子軌道

## 結合性軌道

二つの波(軌道)が加わる時、その結果出来る分子軌道は、電子密度が二つの核の間に集まっている様な形になる。

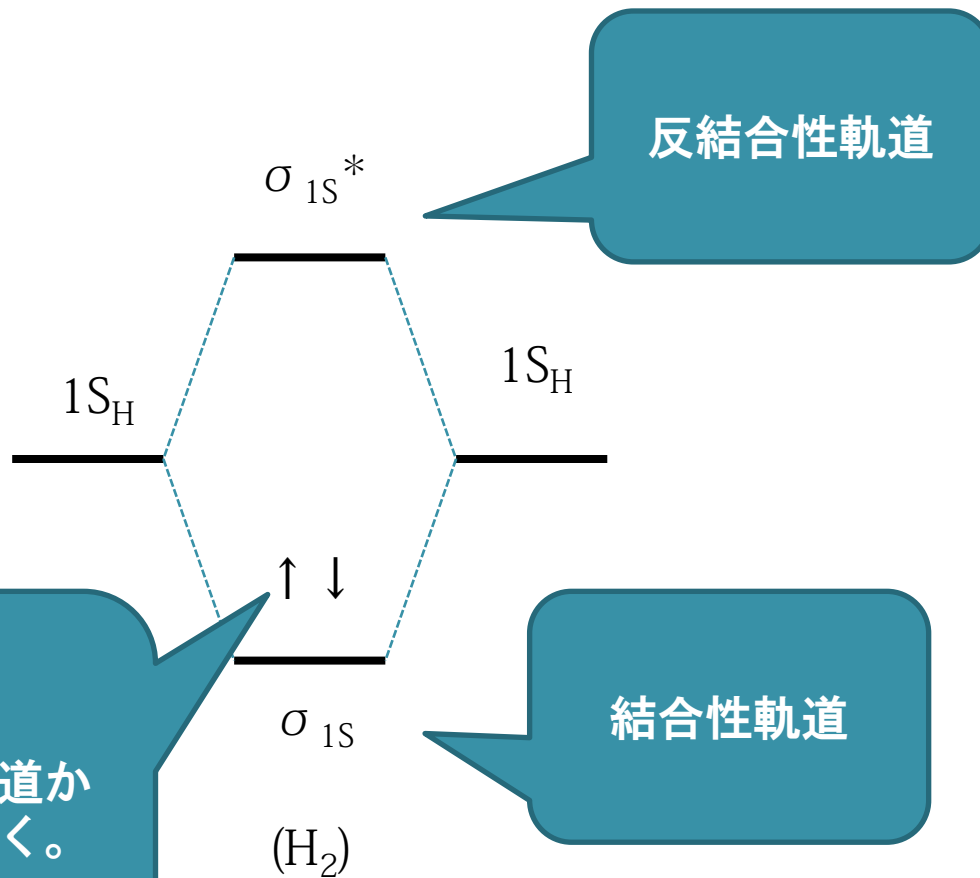
→ そのような軌道中の電子は核を寄せ合わせ、分子を安定させる  
**1s軌道の $\sigma$ 結合の場合、 $\sigma_{1s}$ と書く。**

## 反結合性軌道

二つの波(軌道)が打ち消し合うような場合、その結果出来る分子軌道は、電子密度が二つの核の間の外側にあるような形になる。

→ そのような軌道中の電子は核を寄せ合わす役には立たない。  
**1s軌道の $\sigma$ 結合の場合、 $\sigma_{1s}^*$ と書く。**

# 水素分子の分子軌道は??



電子は低い軌道から埋まっていく。



# 次回の授業

## 6章 共有結合と分子構造 (つづき)

<九州工業大学 竹中研究室>で検索  
研究グループ>佐藤しのぶ (Shinobu Sato)で以下のページを確認しておくこと。

<http://takenaka.che.kyutech.ac.jp/2016/member/sato.html>