

2220 : sp^2 混成軌道

(二重結合を持つ原子は sp^2 混成軌道を通して結合しています.)

キーポイント: 結合角; σ 結合; π 結合; 炭化水素; 不飽和炭化水素; 黒鉛; フラーレン; カーボンナノチューブ

sp^2 混成軌道は, $2s$ 軌道と 2 つの $2p$ 軌道が混じりあってできた軌道です. これも炭素原子を例にして説明しましょう. $2s$ 軌道と 2 つの $2p$ 軌道 (例えば, $2p_x$ と $2p_y$) が, すべてが同等に混じり合うと同等の混成軌道が 3 つできます. それらを sp^2 混成軌道といいます. sp^2 混成軌道をとる炭素原子では, 1 個の $2p$ 軌道 ($2p_z$) がそのまま残ります.

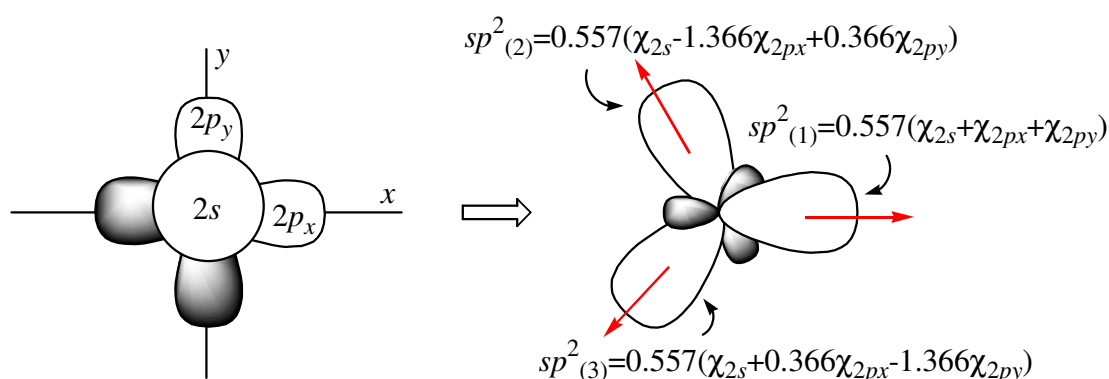


図 1. sp^2 混成軌道. x - y 平面上に 3 つの等価な混成軌道ができる. ローブの方向 (赤→) が結合の方向で互いに 120° の角度 (これを**結合角 (bond angle)** という) を持つ.

エチレン (ethylene) は sp^2 混成軌道を含む炭素のもっとも単純な例です.

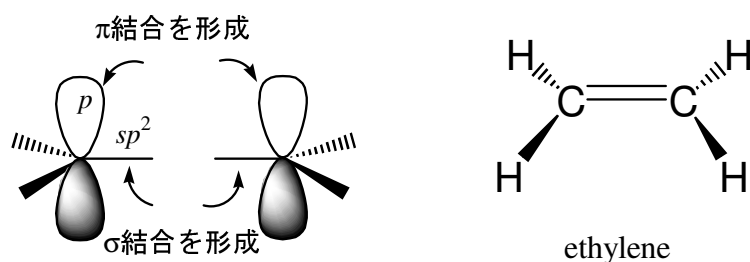


図 2. エチレンの結合形態. “.....” は, 紙面に対して向こう側, “ \blacktriangleright ” は手前側の方向の結合を示す.

炭素と水素原子から成る化合物を**炭化水素 (hydrocarbon)** とよび, それらのうち π 結合を含むものは**不飽和炭化水素 (unsaturated hydrocarbon)** とよびます. すべての炭素原子が

sp^2 混成をもつ不飽和炭化水素は数多く知られています。代表的な例はベンゼン (benzene) です。

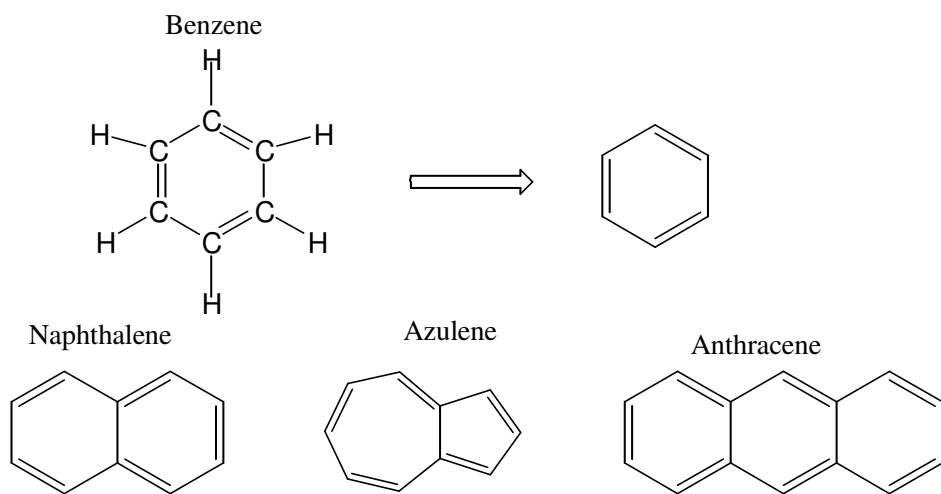


図 3. sp^2 炭素原子から成る代表的不飽和炭化水素.

図 3 に見られるように、通常、C-H 結合は省略して構造を表現します。これらの化合物はすべての原子が同一平面上にあります。類似構造化合物は無限にあります。図 4 に示すように、 sp^2 炭素原子を無限につなげた分子の化合物は黒鉛 (graphite) です。

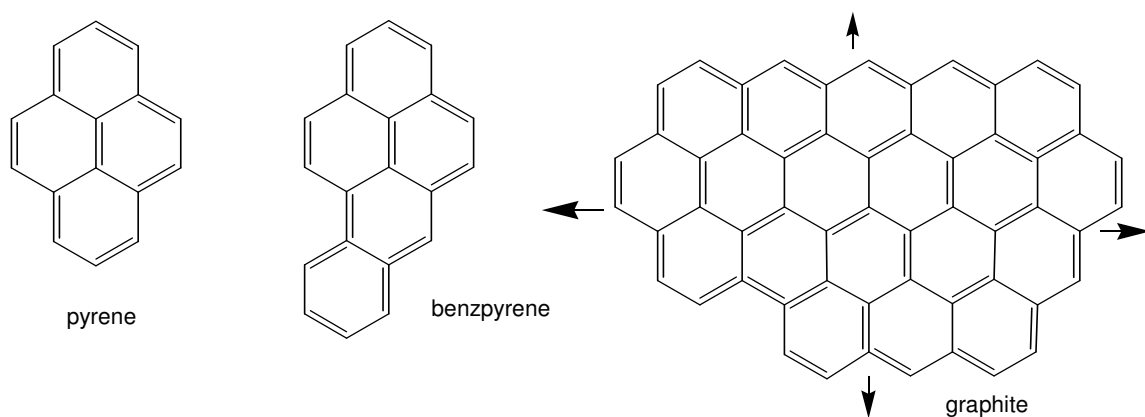


図 4. 黒鉛は sp^2 炭素原子のみが平面的に無限に結合した化合物.

さらに、 sp^2 炭素原子立体的に結合化合物にフラーレン (fullerene) とかカーボンナノチューブ (carbon-nanotube) があります。これらの化合物は、電気の良導体であったり、かご状の分子の中に他の分子やイオンを閉じ込めることができるものであったりします。そのような特異な性質を持つので現在その応用が盛んに研究されています。

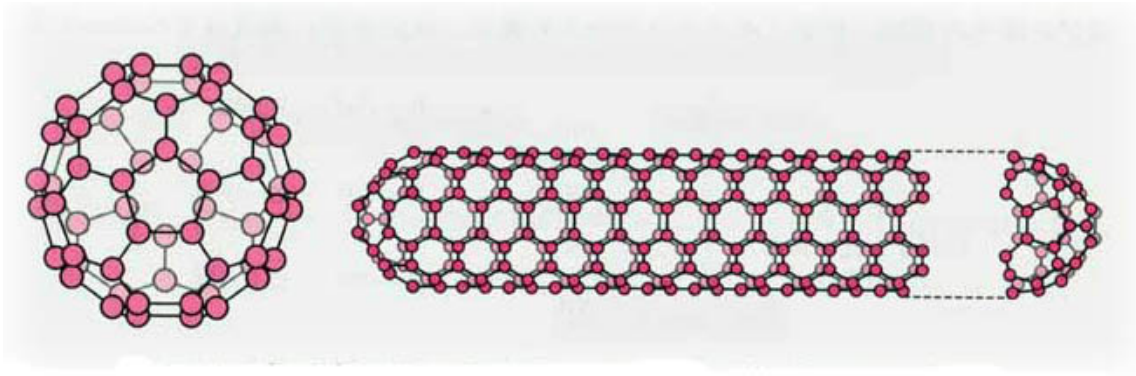


図 5. フラーレンとカーボンナノチューブ.