

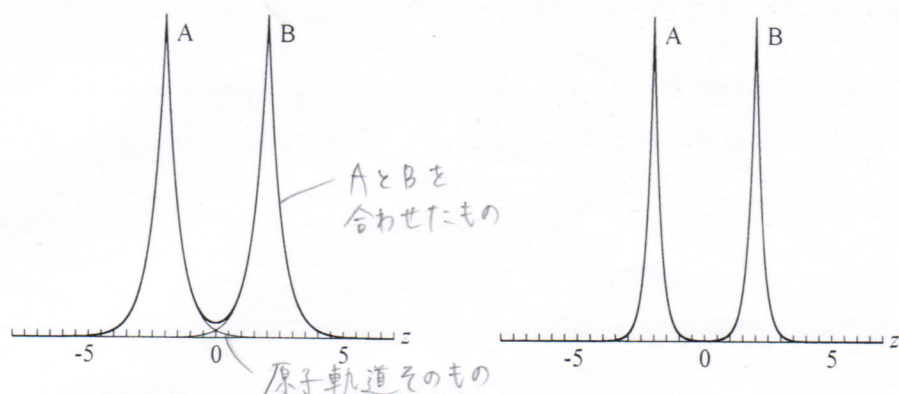


図 4.4 2 個の H 原子が 4 Å まで接近したときの 1s 軌道の変化(左)と電子密度の変化(右).

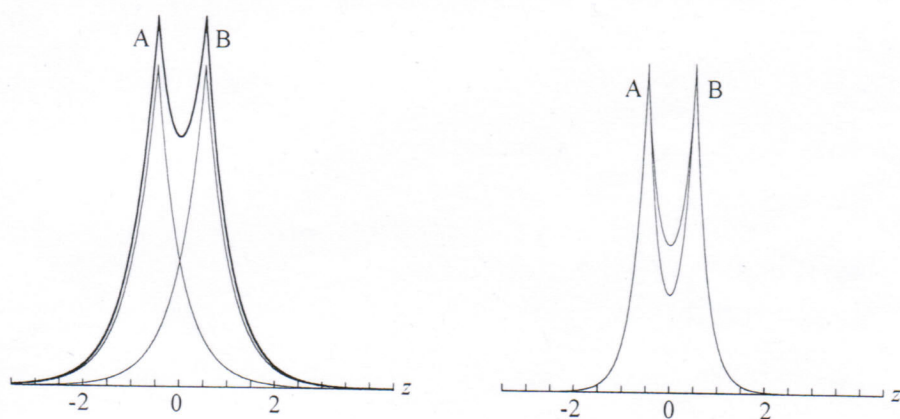


図 4.5 2 個の H 原子が 1 Å まで接近したときの 1s 軌道の変化(左)と電子密度の変化(右).

電子が結合性軌道にあるとき、電子密度は、

$$\psi^2 = N(\phi_A^2 + 2\phi_A\phi_B + \phi_B^2) \quad (4.9)$$

で与えられる。N は規格化定数を表す。これを図示すると、図 4.4 および図 4.5 のようになる。比較のために、原子軌道間の相互作用がない場合の電子分布、

$$\psi^2 = \frac{1}{2}(\phi_A^2 + \phi_B^2) \quad (4.10)$$

も図に示した。結合性軌道における電子の密度は、原子核 A の 1s 軌道による電子密度 $N\phi_A^2$ 、原子核 B の 1s 軌道による電子密度 $N\phi_B^2$ 、および干渉項 $2N\phi_A\phi_B$ の和からなる。この干渉項は、原子核 A, B の中間領域の電子密度に相当する。結合性軌道では、原子核間で電子密度が増大するため、原子核間のクーロン反発が弱められて、全エネルギーが安定化するのである。

(2) $c_A = -c_B$ のとき、 ψ を反結合性軌道という。

反結合性軌道に電子が収容されると、電子密度は、

$$\psi^2 = N'(\phi_A^2 - 2\phi_A\phi_B + \phi_B^2) \quad (4.11)$$