構造化学（加納）

～§4 分子　講義資料～
その2

今回はd軌道はやらない

4.5. 分子軌道

- 等核2原子分子の軌道生成 1

1sとのちがい 内側に節がある

a. 1s, 2sの軌道合成

1s軌道の重ね合わせ　　2s軌道の重ね合わせ

強めあう　弱めあう　強めあう　弱めあう

電子密度分布

等高線表示

結合性軌道 σ_{1s}　反結合性軌道 σ^*_{1s}

結合性軌道 σ_{2s}　反結合性軌道 σ^*_{2s}

一般的には、軌道は下記条件で結合する。
・エネルギー的に近い軌道
・重なりの大きな軌道
H_2, O_2などの等核2原子の場合には、当然、同じ軌道どうしで結合する。

図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

節　イメージ

px↑pz↓pz↑

4.5. 分子軌道

- 重なり積分Sの核間距離R依存性

σ結合　π結合　σ結合　σ結合

打ち消す

軌道同士の重なりについて
・a,c,d: 重なりが核間を結ぶ軸（結合軸）で大きくなる。（軸対称）
・b: 軸上での重なりはゼロ（軸を含む節面を一つ持つ）

大野公一　量子物理化学

結合はできない

結合軸に対して電子がいる ＝ σ結合
〃　いない ＝ π結合

4.5. 分子軌道

- 等核2原子分子の軌道生成 2

b. $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$の軌道合成

$2p_x$, $2p_y$軌道の重ね合わせ　　$2p_z$軌道の重ね合わせ

結合性軌道 π_{2p}　反結合性軌道 π^*_{2p}

結合性軌道 σ_{2p}　反結合性軌道 σ^*_{2p}

分子の結合方向にZ軸をとる

図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

4.5. 分子軌道

- 等核2原子分子のエネルギー準位 1

＊付き：反結合性

a. 準位と軌道

6コ

反転で符号を変える＝奇＝ungerade＝u

反転で符号を変えない＝偶＝gerade＝g

ゲラーデ（ドイ語）

*) σ_{2p}とπ_{2p}はエネルギー準位が接近しているため、分子によっては逆転することもある。

図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

⊕－⊕ → まわす ⊕－⊕ gerade

⊕－⊖ → まわす ⊖－⊕ ungerade

4.6. 等核二原子分子

- 等核2原子分子のエネルギー準位 2

b. N_2の準位と電子密度

N_2分子（電子数14）について、軌道に電子を詰める。

電子密度

*) 電子密度 A.C.Wahl.Science,151,961(1966)

図の出典：http://rikanet2.jst.go.jp/

ここまでで"箱"が完成