

構造化学(加納)

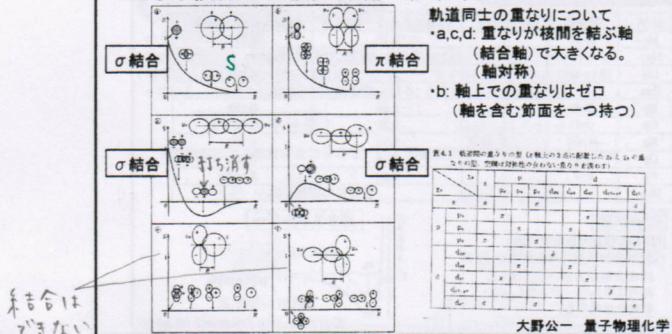
~ § 4 分子 講義資料~ その2

今日はd軌道はやらない

p_x, p_y, p_z

4.5. 分子軌道

・重なり積分 S の核間距離 R 依存性



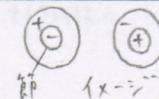
結合車両において電子がいる = σ 結合
いな = π 結合

4.5. 分子軌道

a. 1s, 2sの軌道合成



図の出典: <http://rikane2.jst.go.jp/>

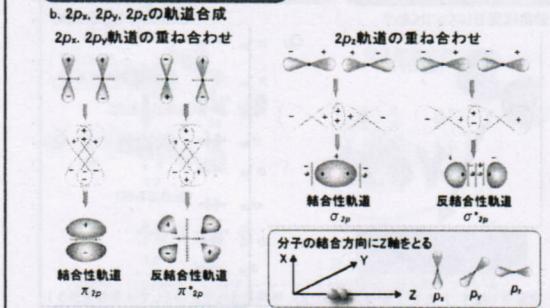


一般的には、軌道は下記条件で結合する。
・エネルギー的に近い軌道
・重なりの大きな軌道
 H_2, O_2 などの等核2原子の場合には、当然、同じ軌道どうしで結合する。

図の出典: <http://rikane2.jst.go.jp/>

4.5. 分子軌道

b. 2p, 2p, 2pの軌道合成

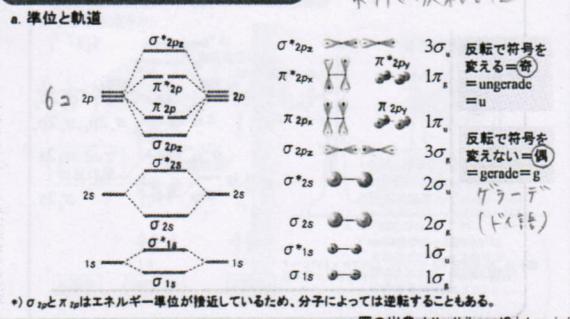


図の出典: <http://rikane2.jst.go.jp/>

4.5. 分子軌道

等核2原子分子のエネルギー準位1

a. 準位と軌道



*) σ_{2p_z} と π_{2p_z} はエネルギー単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。

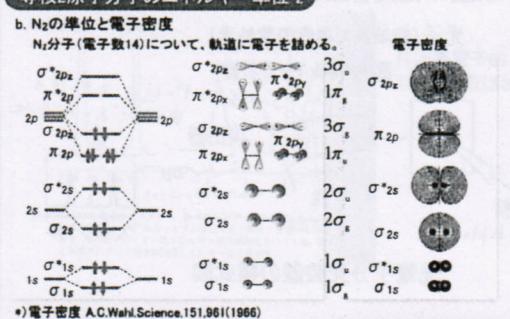
図の出典: <http://rikane2.jst.go.jp/>

$\oplus - \oplus \rightarrow \oplus - \oplus$ gerade
まわす

$\ominus - \ominus \rightarrow \ominus - \oplus$ ungerade
まわす

4.6. 等核二原子分子

b. N₂の準位と電子密度



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

図の出典: <http://rikane2.jst.go.jp/>

ここまで「相」が完成