

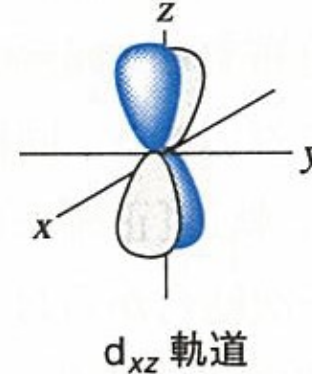
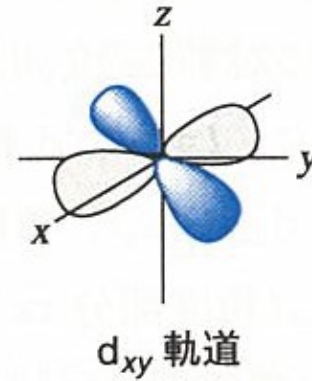
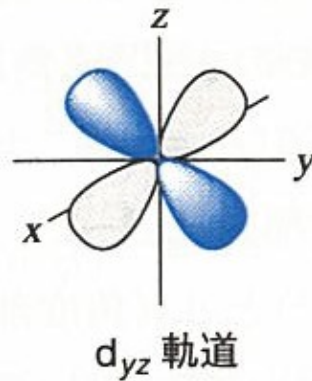
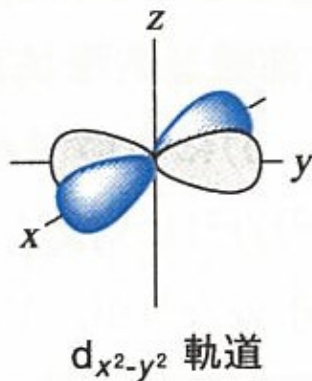
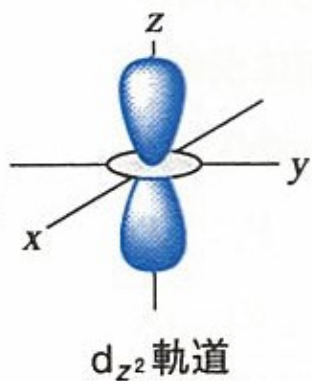
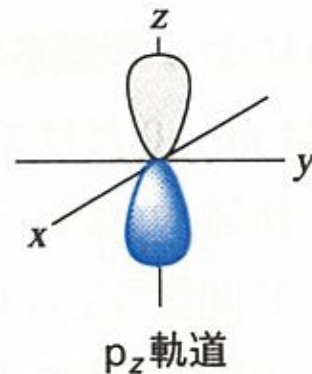
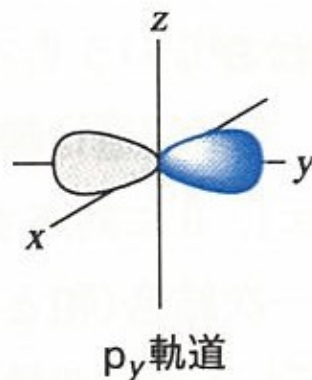
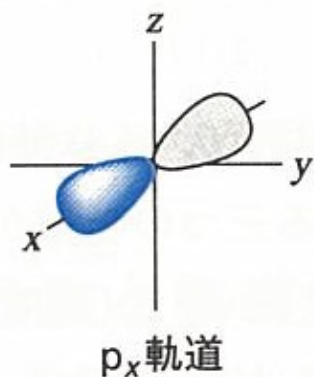
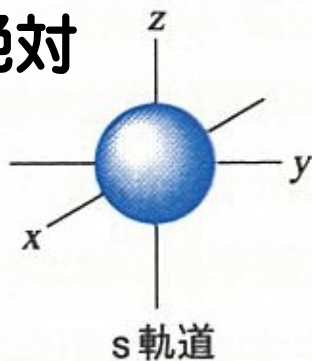
化学 I 分子と化学結合 (第7回)

分子軌道法 (MO法) による共有結合の理解

- 4.1 分子軌道法の基本的な考え方
- 4.2 等核二原子分子の分子軌道
- 4.3 異核二原子分子の分子軌道
 - 4.3.1 HF
 - 4.3.2 CO

軌道の形はこう描かれる

軌道関数の位相+、-に絶対的な意味はありません。ただ“逆”なんだと思ってください。



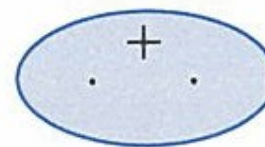
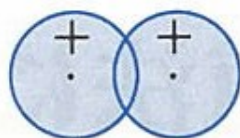
(a)

4.1 分子軌道法の基本的な考え方

波動関数の重なりを考える

同位相

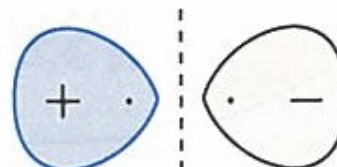
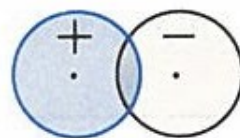
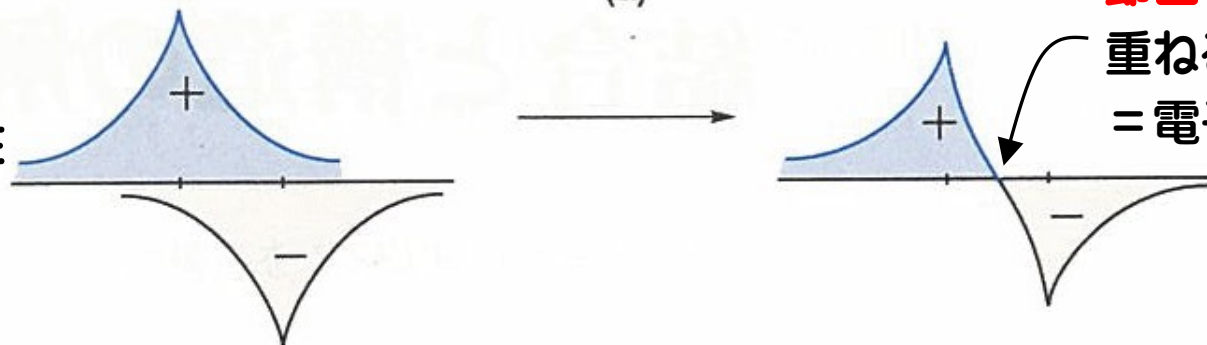
結合性



(a)

逆位相

反結合性



(b)

節

4.1 分子軌道法の基本的な考え方

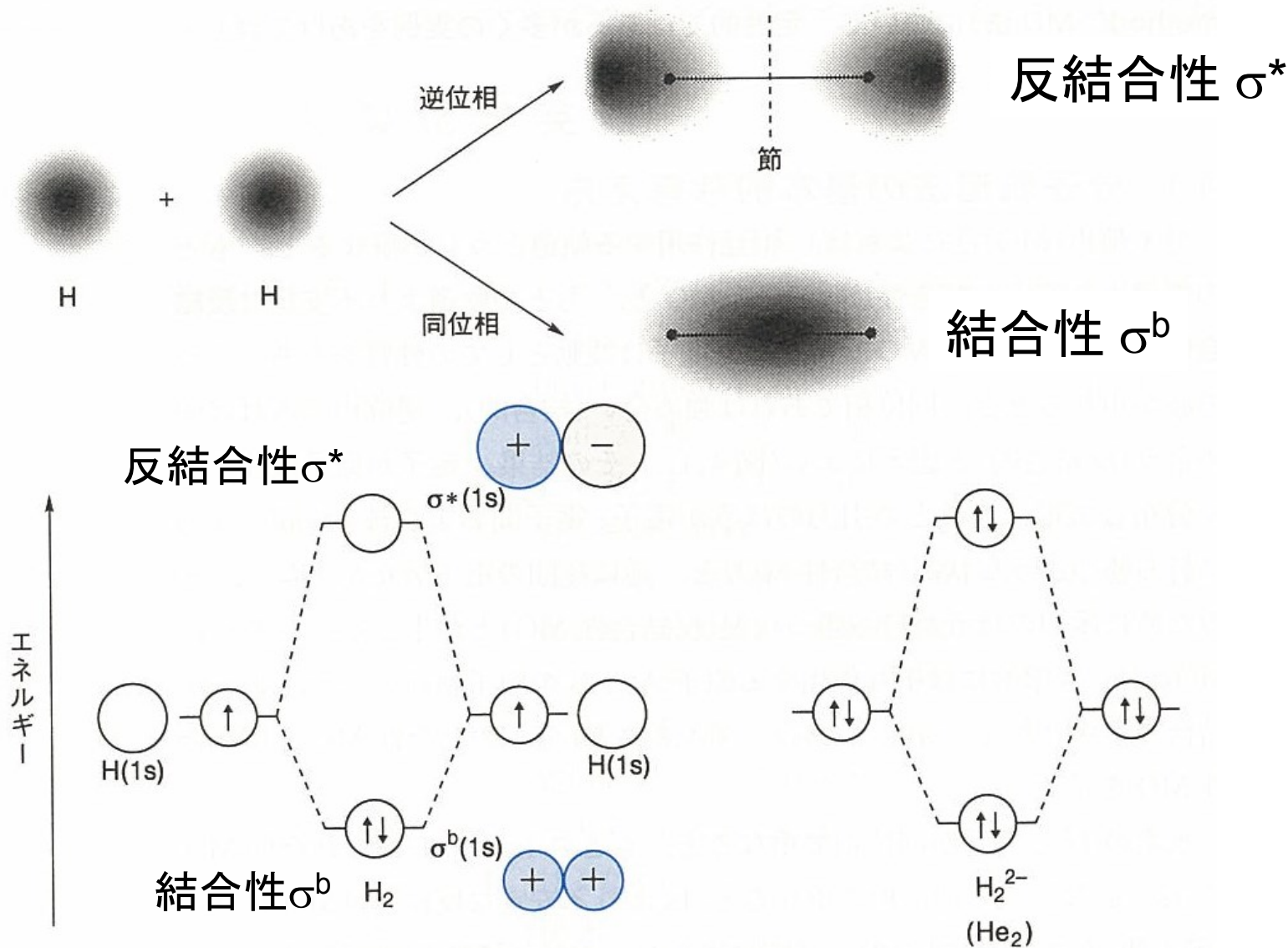
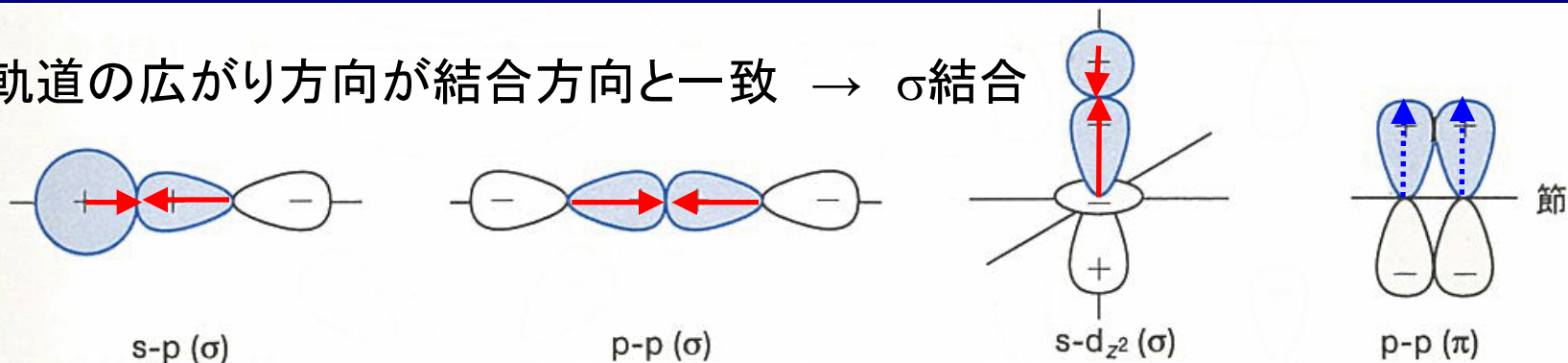


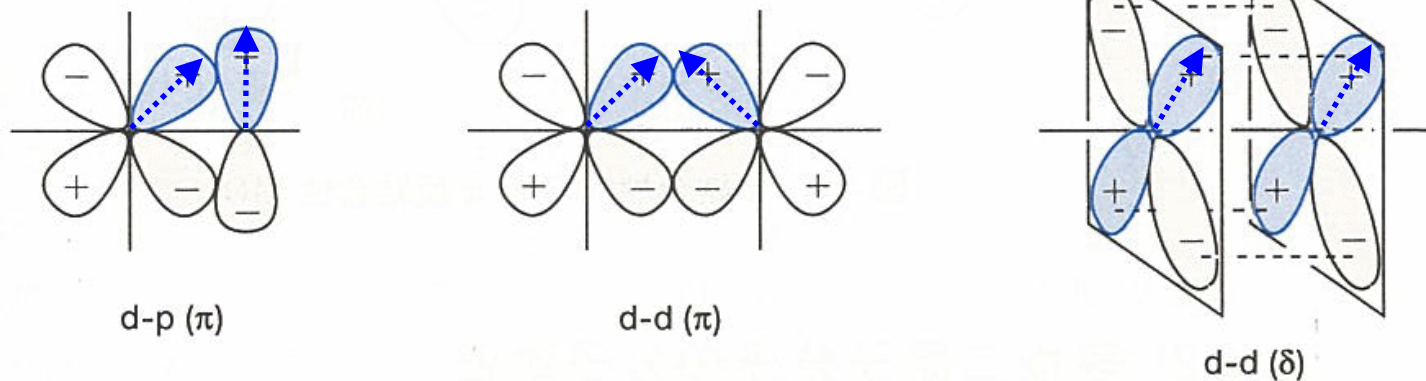
図 4.2 H₂ の結合性 MO と反結合性 MO

4.1 分子軌道法の基本的な考え方

軌道の広がり方向が結合方向と一致 → σ 結合



軌道の広がり方向が結合方向と一致しない → π 結合



球対称

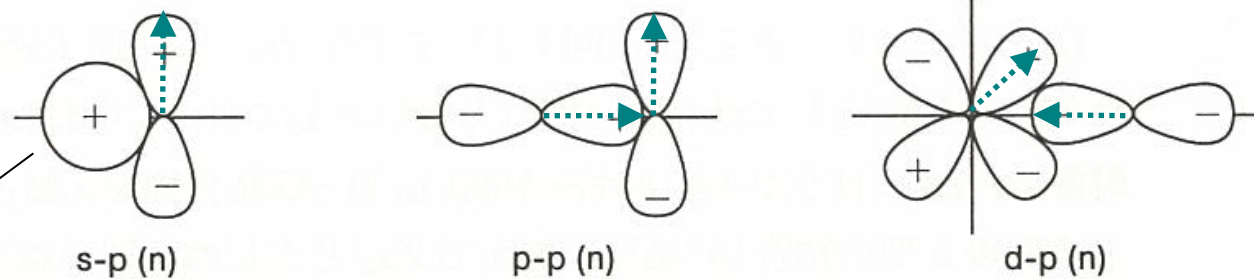


図 4.3 軌道の重なり
(n)では相互作用ができない。

4.1 軌道の広がり方向が結合方向と一致しない → π 結合

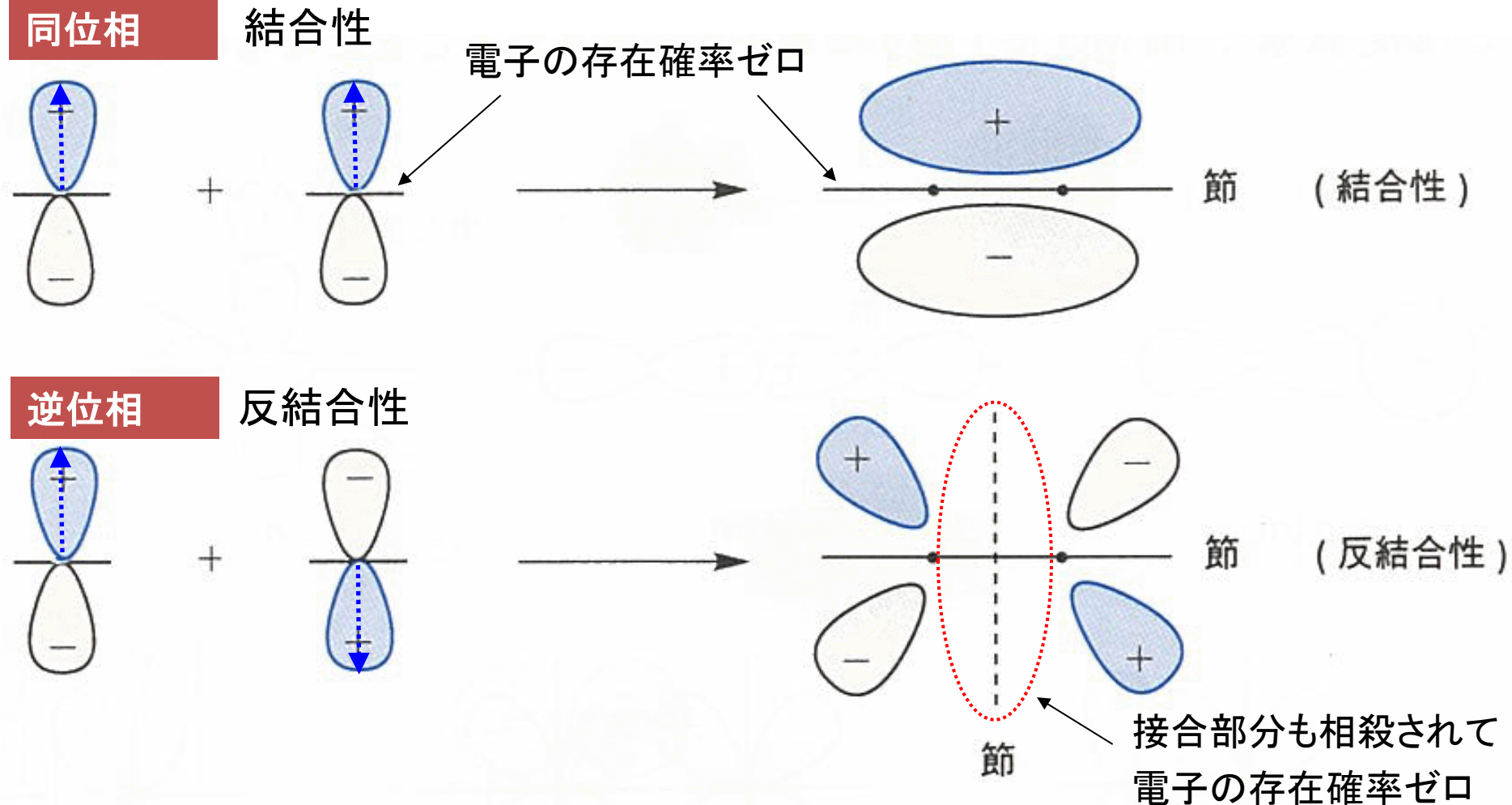


図 4.4 π 結合性 MO と π 反結合性 MO

4.2 等核二原子分子の分子軌道 (O₂分子)

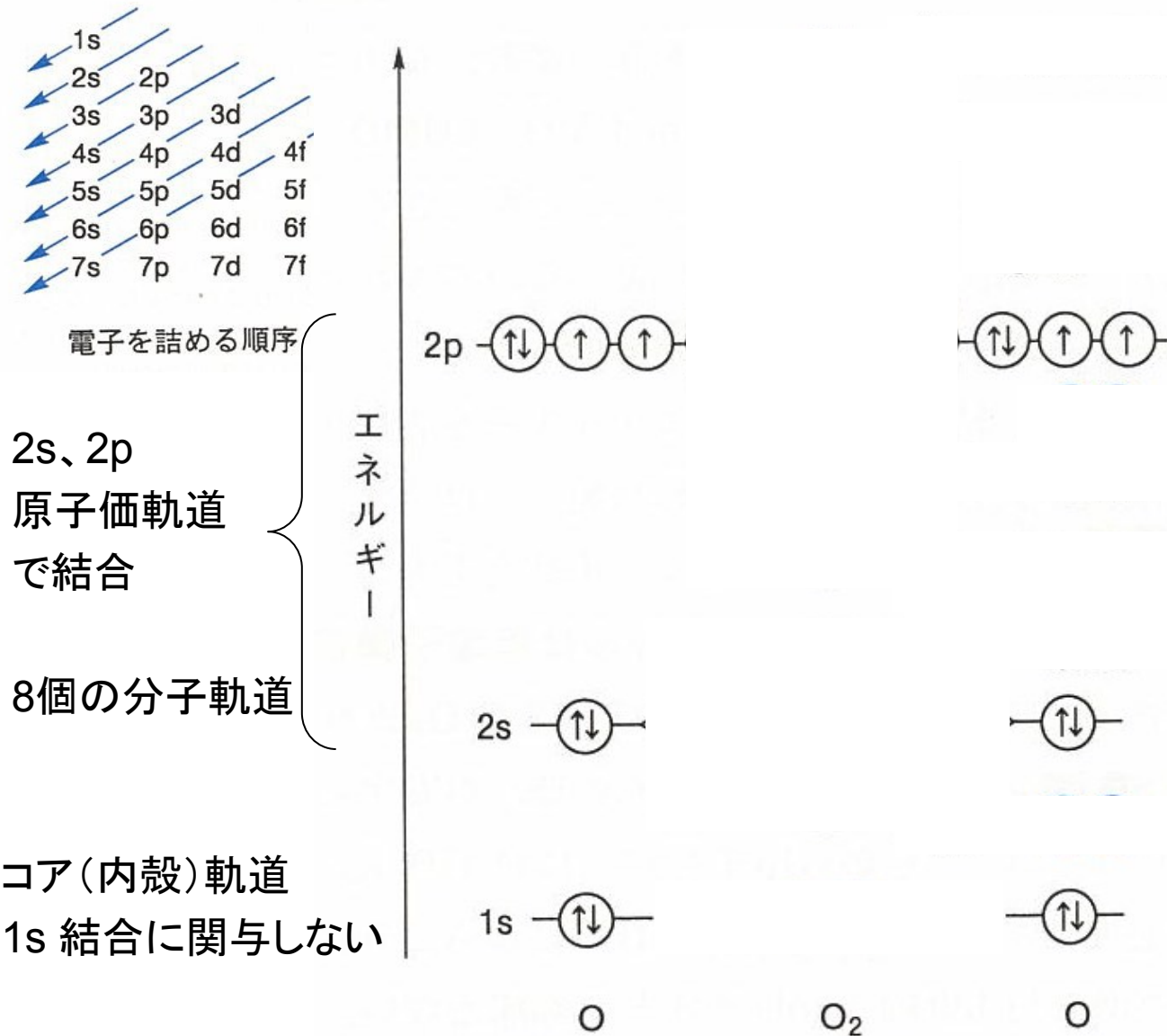
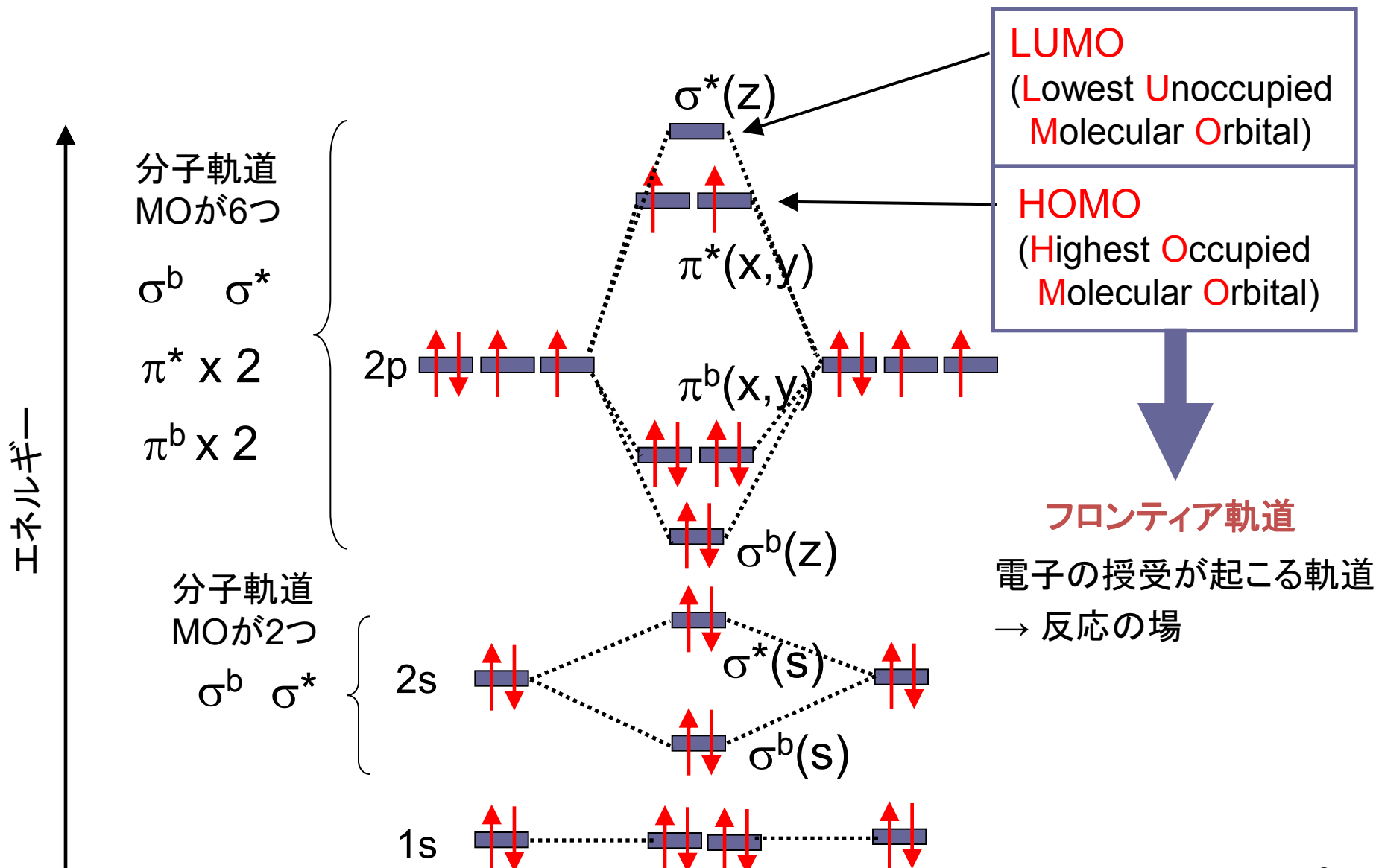


図 4.5 O₂ の MO エネルギー準位図

4.2 等核二原子分子の分子軌道 (O₂分子)



原子価軌道のエネルギー

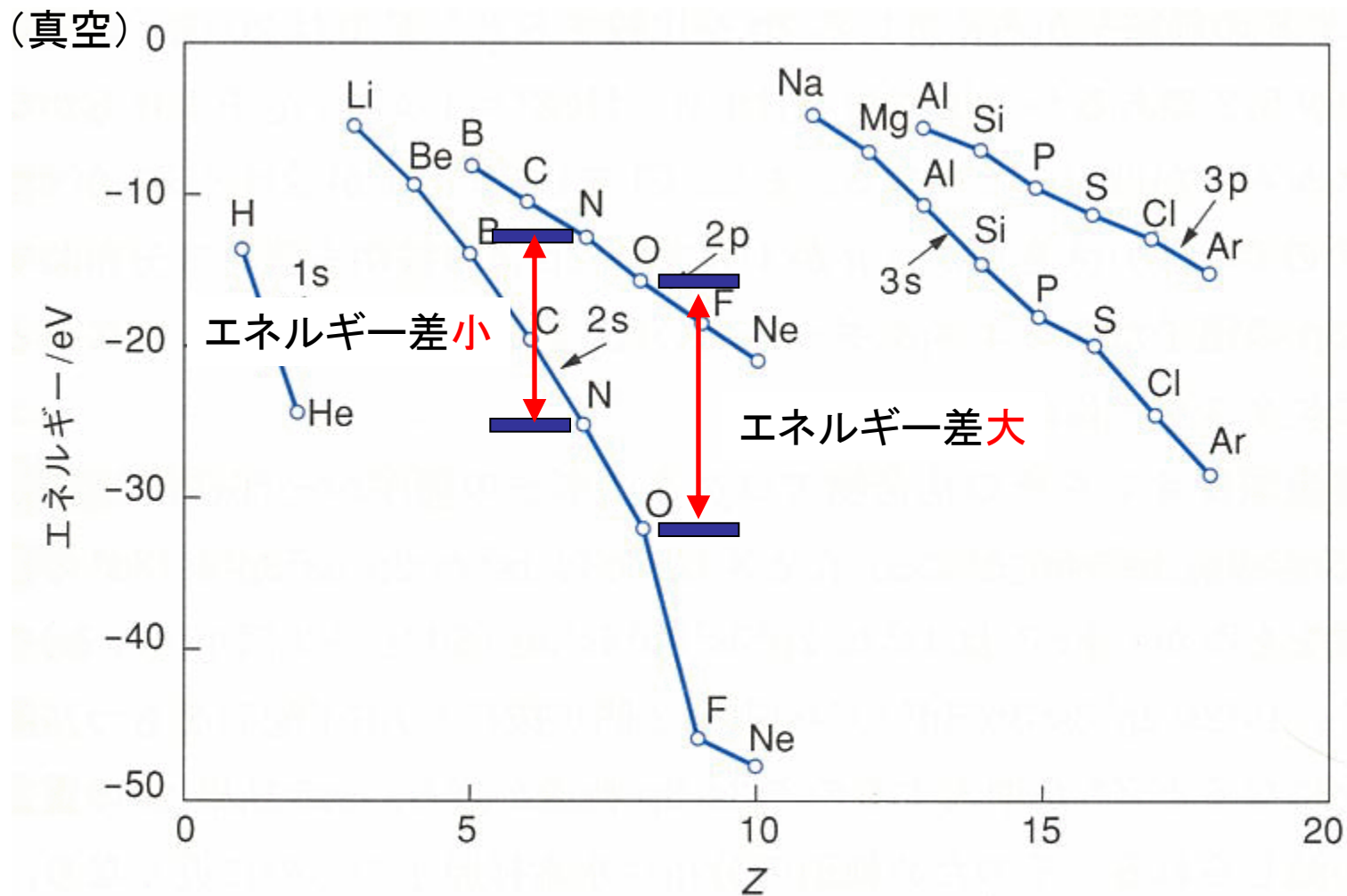


図1.4 原子価軌道のエネルギー
1eV = 96.48kJ/mol

1.3.2 軌道の動径分布と貫入

有効核電荷 Z^* 増大
 エネルギー低下
 軌道は縮む

有効核電荷 Z^* 増大
 主量子数 n 増大
 エネルギー増加
 軌道は広がる

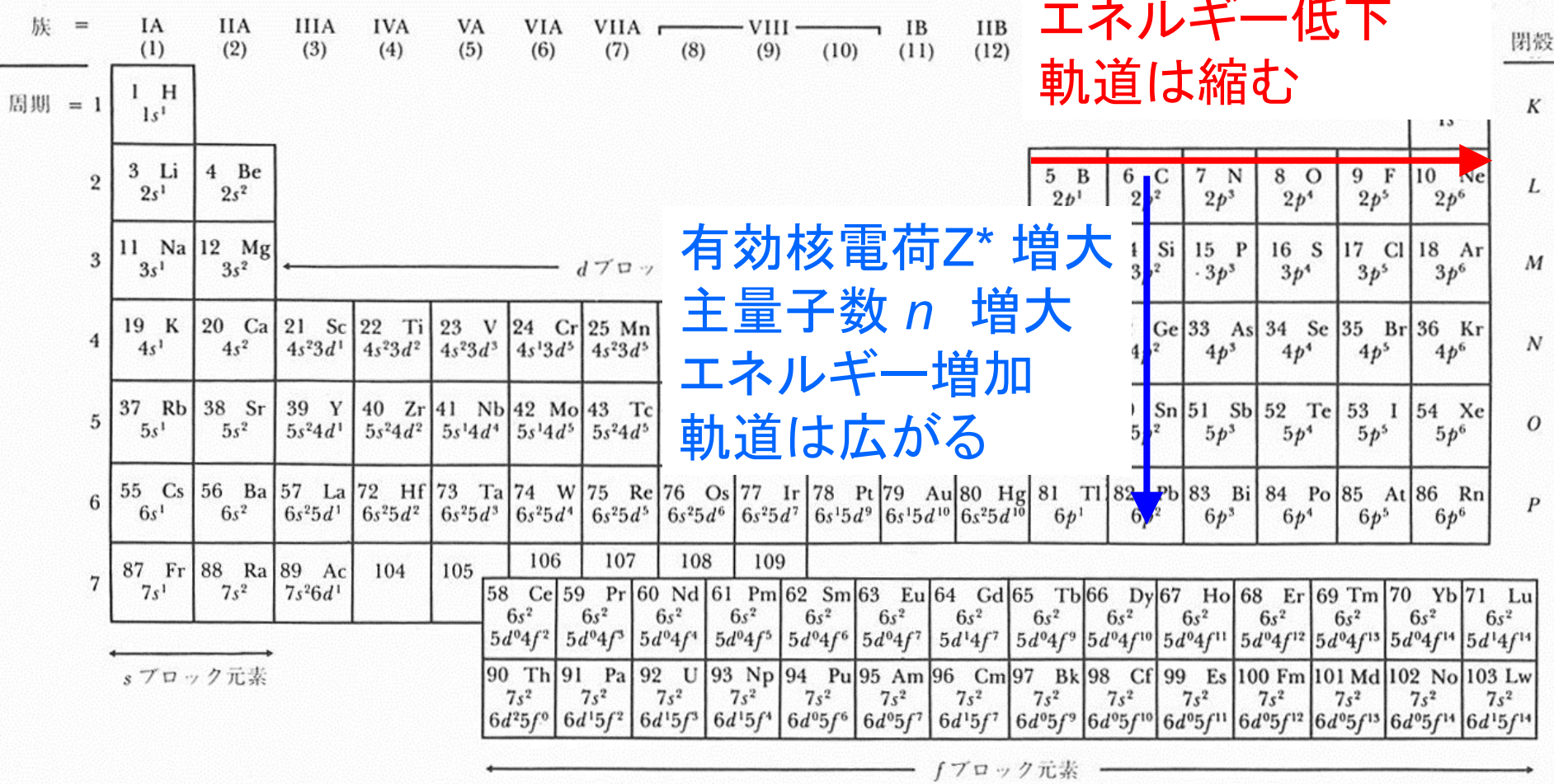
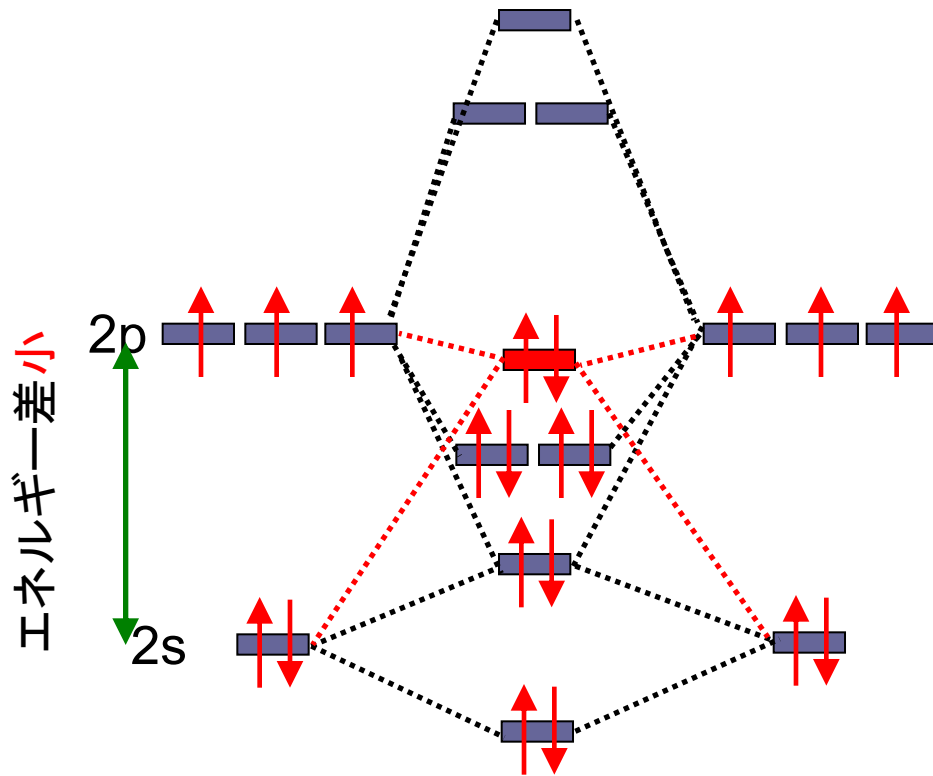


図 2-12 電子配置の周期変化。各元素に対して外殻電子すなわち識別電子で示してある

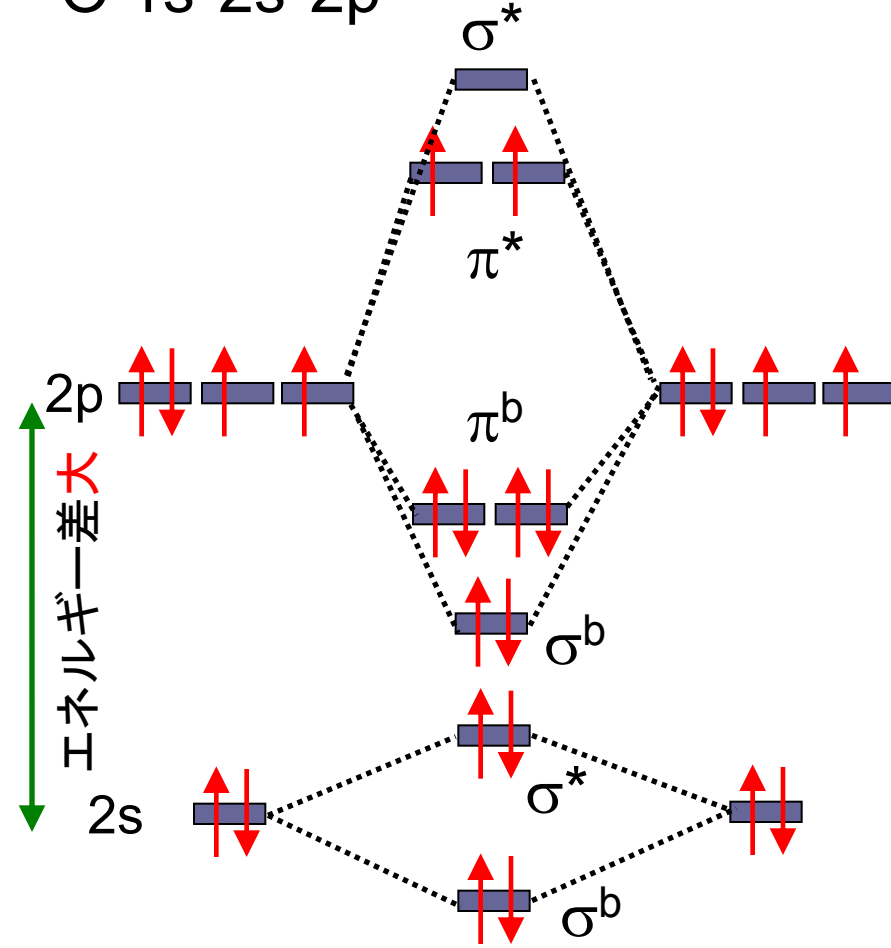
原子価軌道間の相互作用

N $1s^2 2s^2 2p^3$



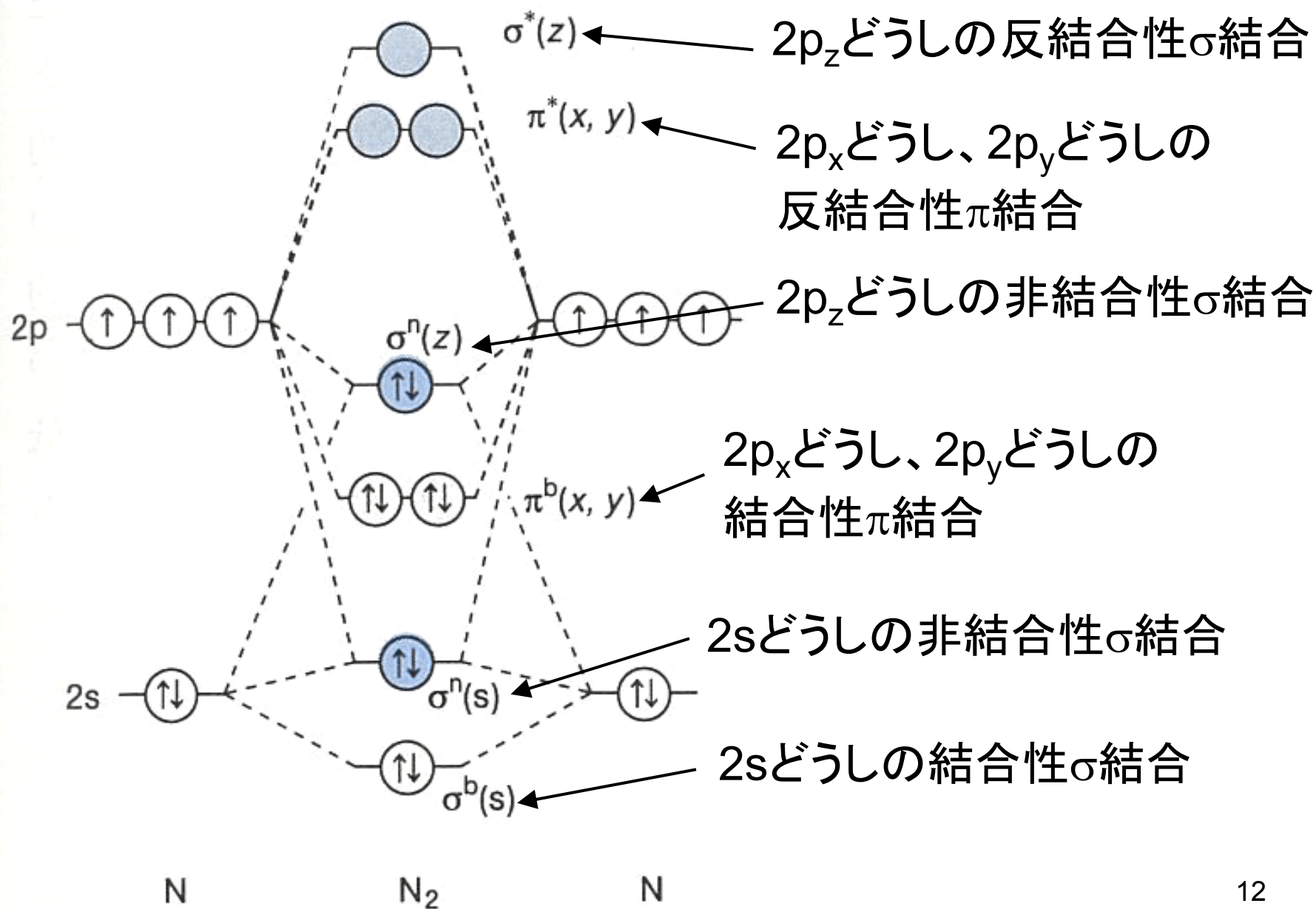
2s-2pの相互作用あり

O $1s^2 2s^2 2p^4$



2s-2pの相互作用なし

4.2 等核二原子分子の分子軌道 (N₂分子)



sp混成軌道

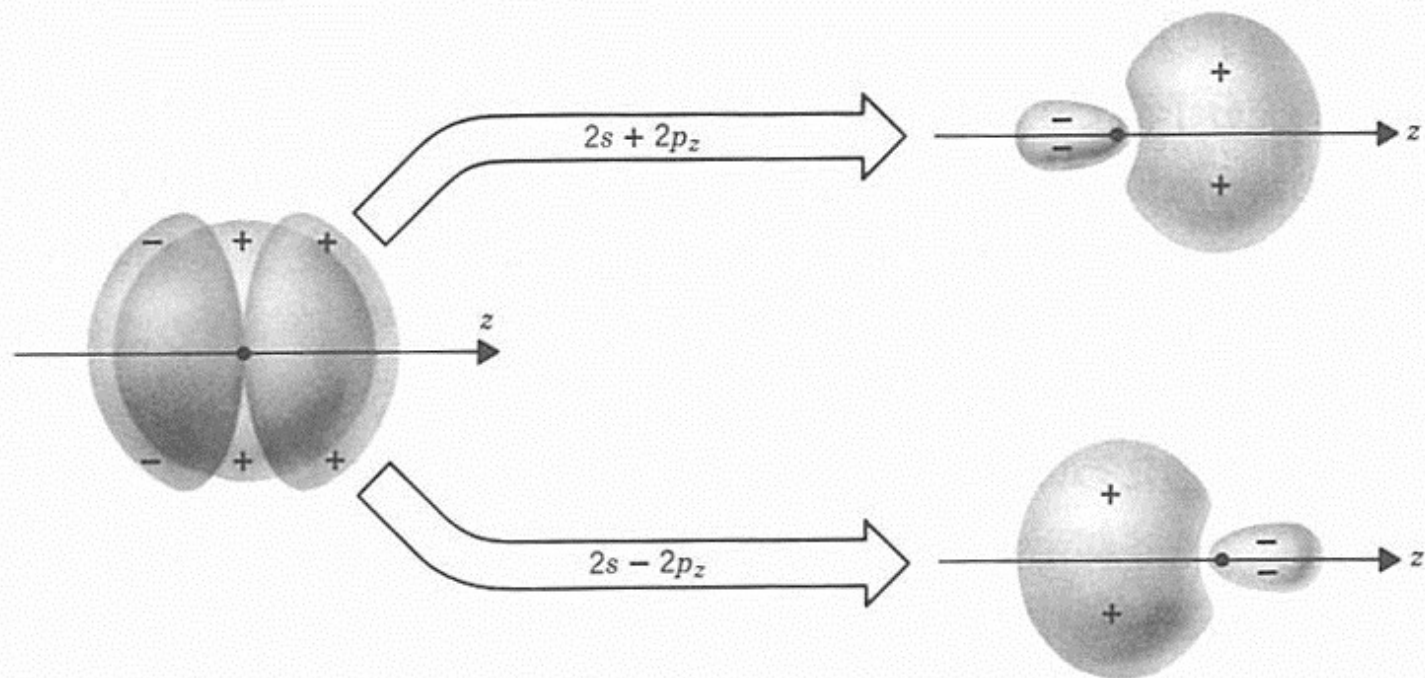
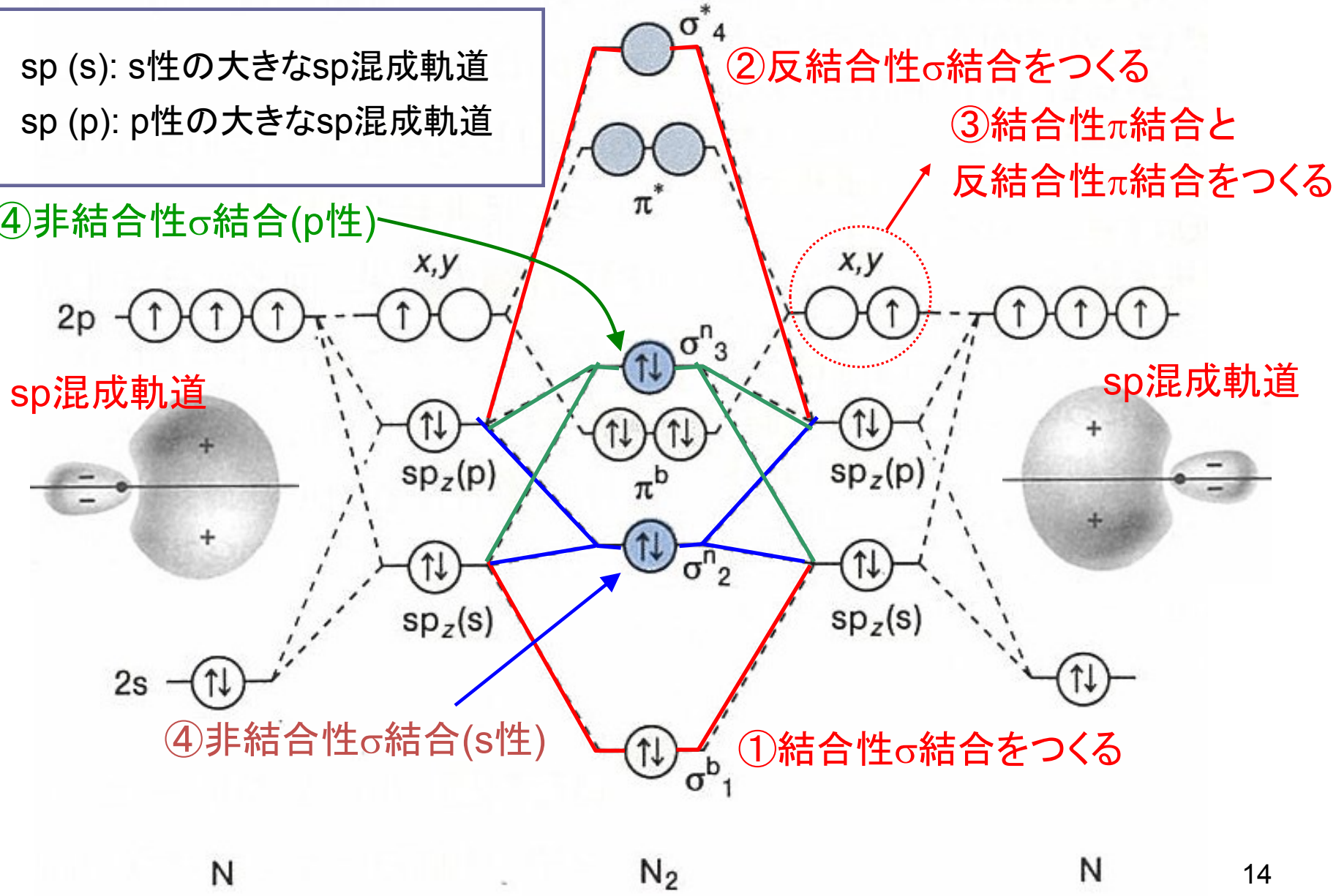


図 3-2 一つの $2s$ および一つの $2p_z$ 原子軌道の線型結合からの二つの等価な sp 混成軌道の生成。 z 軸上の点は、混成が組立てられる原子の位置を示す。二つの混成の方向(たがいに 180° をなす)は、二つの線型結合に用いられる符号の違いから生ずる

4.2 等核二原子分子の分子軌道 (N₂分子: sp混成考慮)

sp (s): s性の大きなsp混成軌道
 sp (p): p性の大きなsp混成軌道

④非結合性σ結合(p性)



②反結合性σ結合をつくる

③結合性π結合と
反結合性π結合をつくる

④非結合性σ結合(s性)

①結合性σ結合をつくる

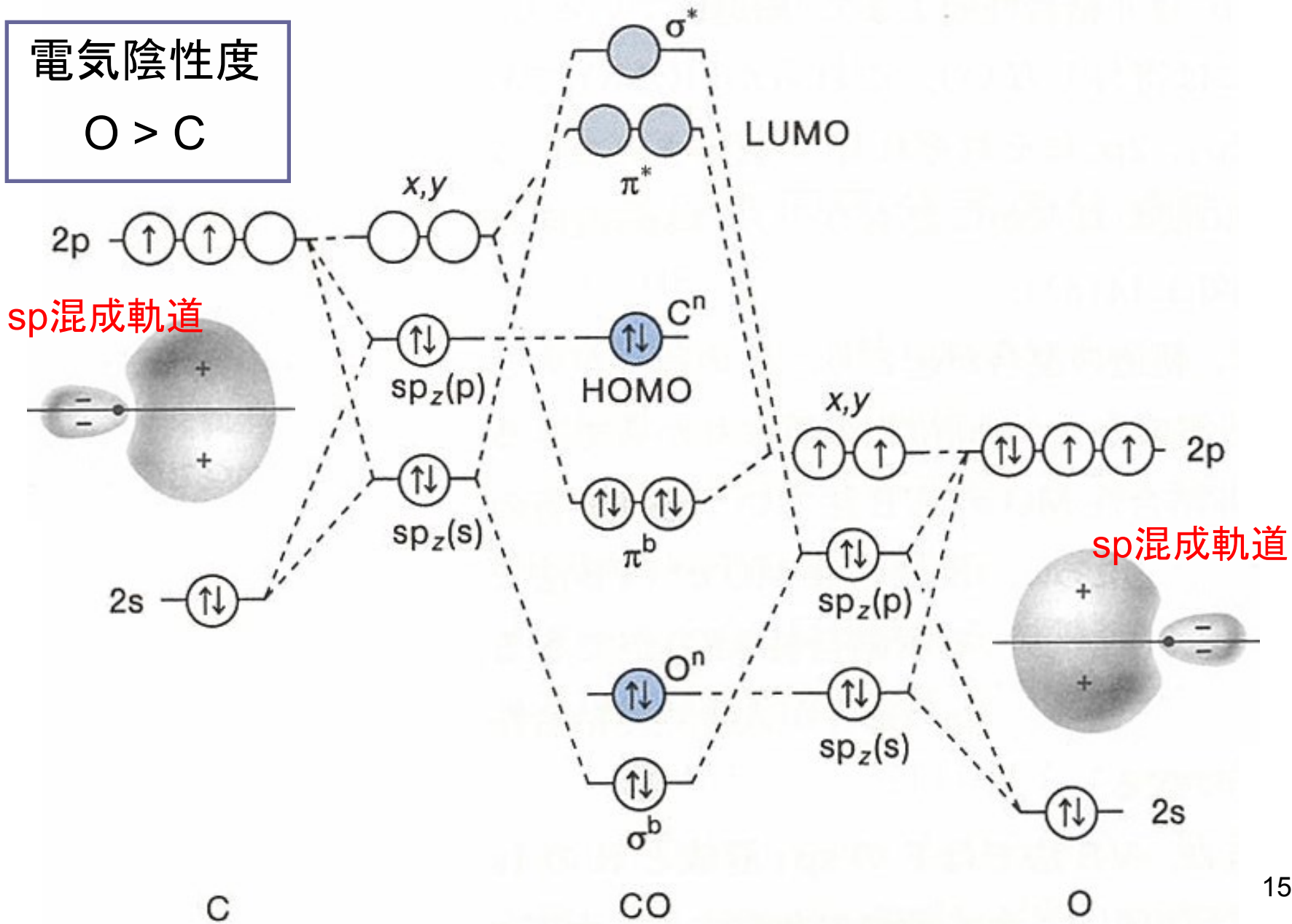
N

N₂

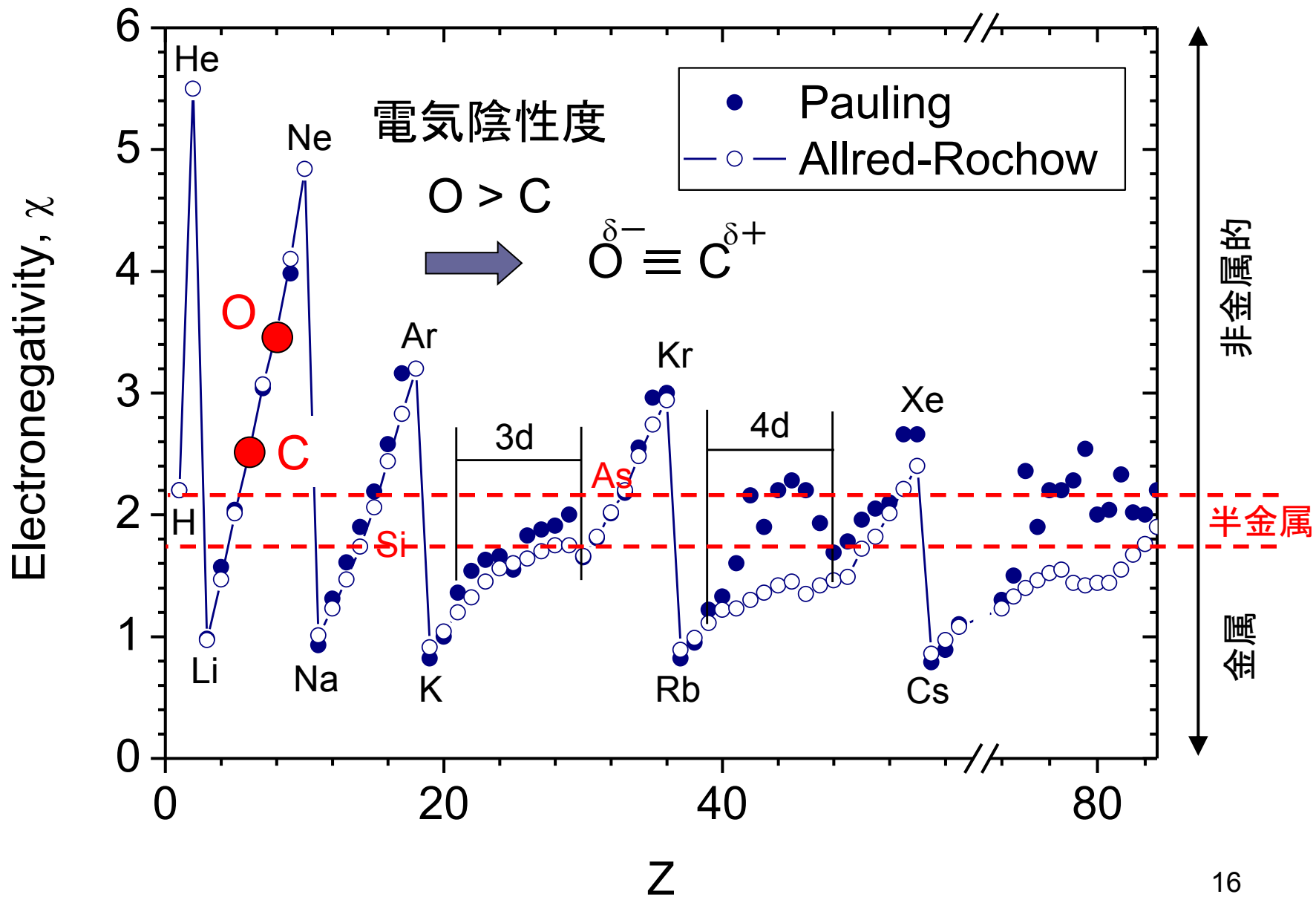
N

4.3 異核二原子分子の分子軌道 (CO分子)

電気陰性度
O > C



2.3.2 電気陰性度と単体の結合性



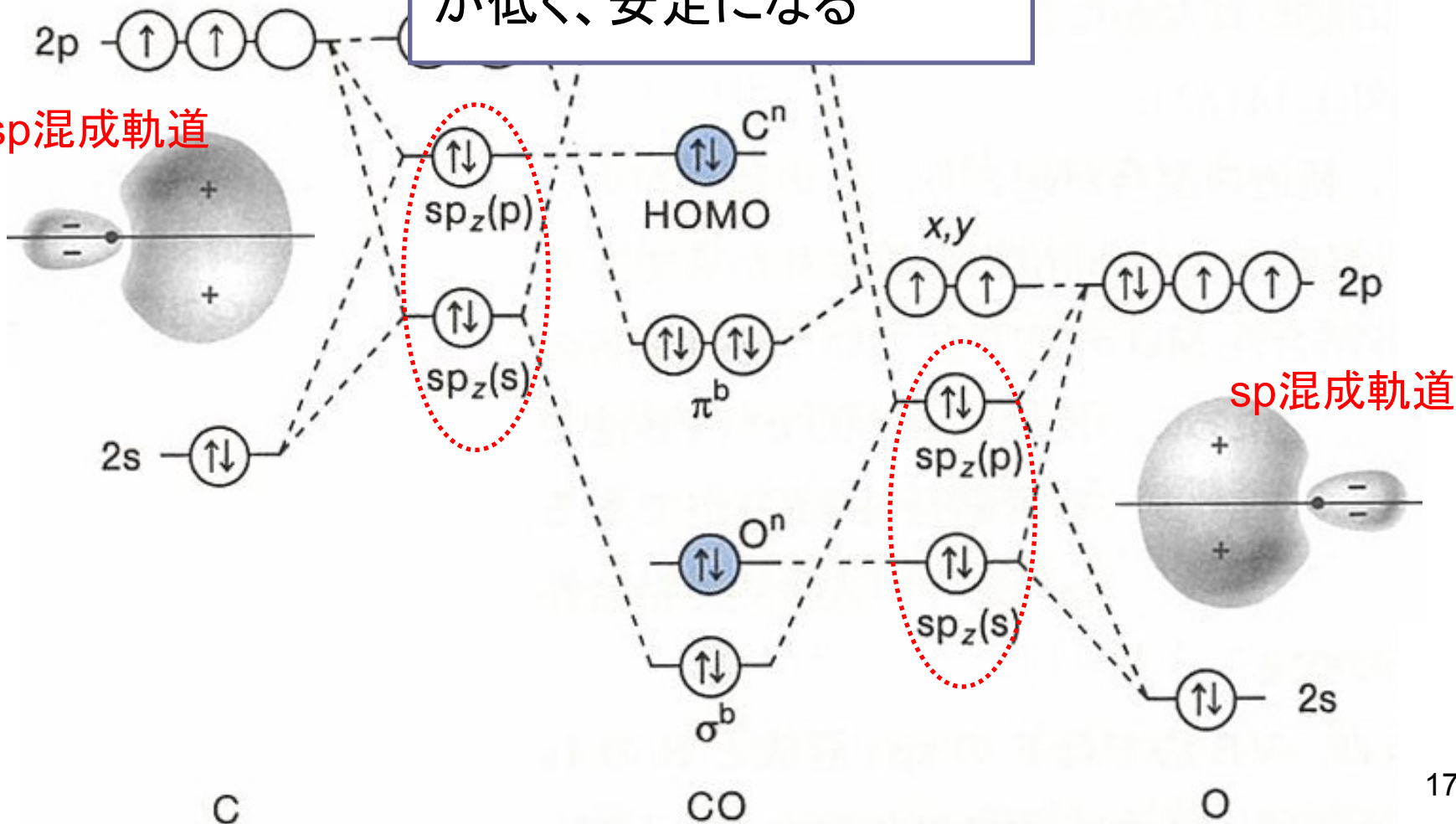
4.3 異核二原子分子の分子軌道 (CO分子)

電気陰性度

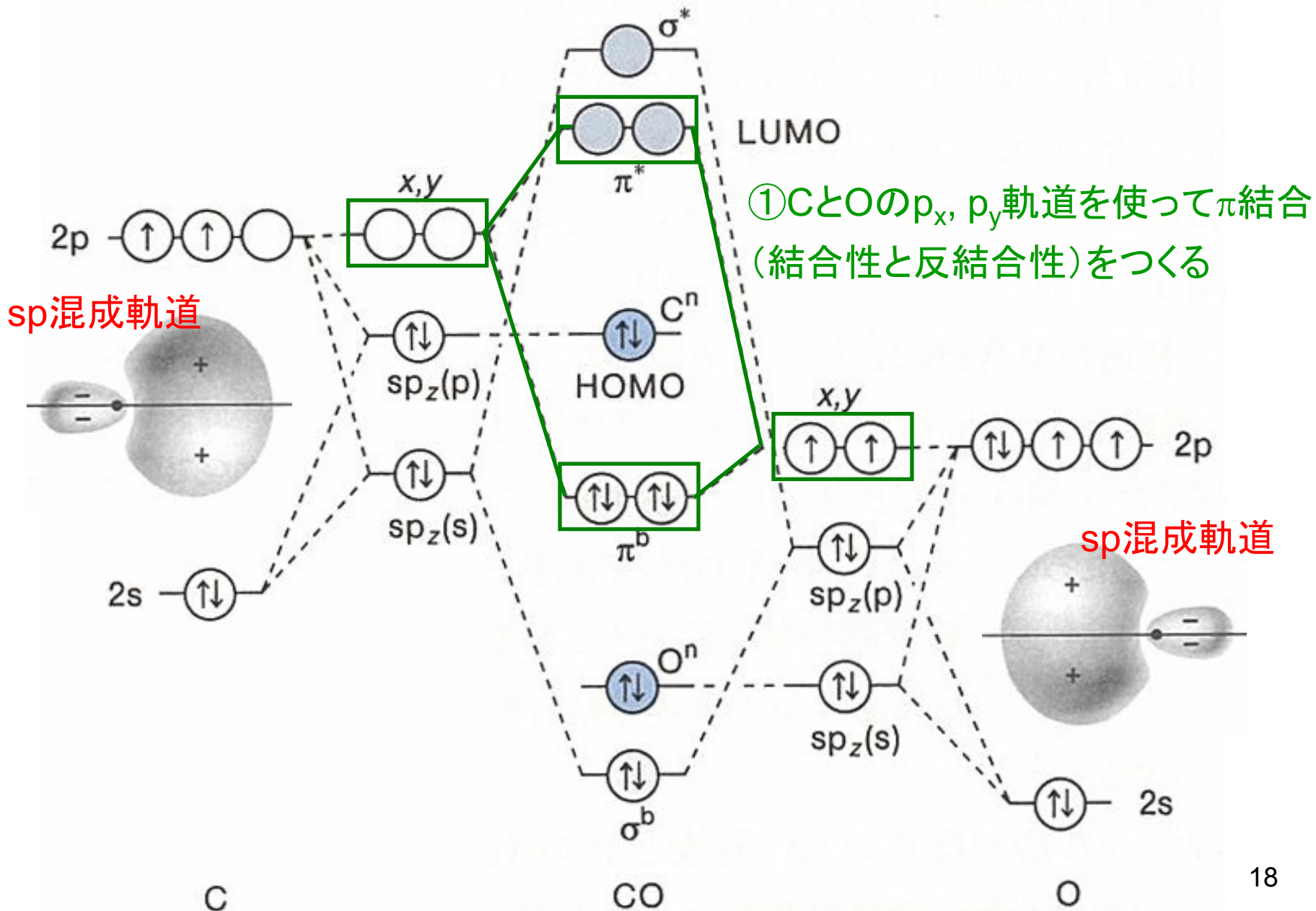
$$O > C$$

O側に電子が偏っていて、
OはCよりもエネルギー
が低く、安定になる

sp混成軌道



4.3 異核二原子分子の分子軌道 (CO分子)



4.3 異核二原子分子の分子軌道 (CO分子)

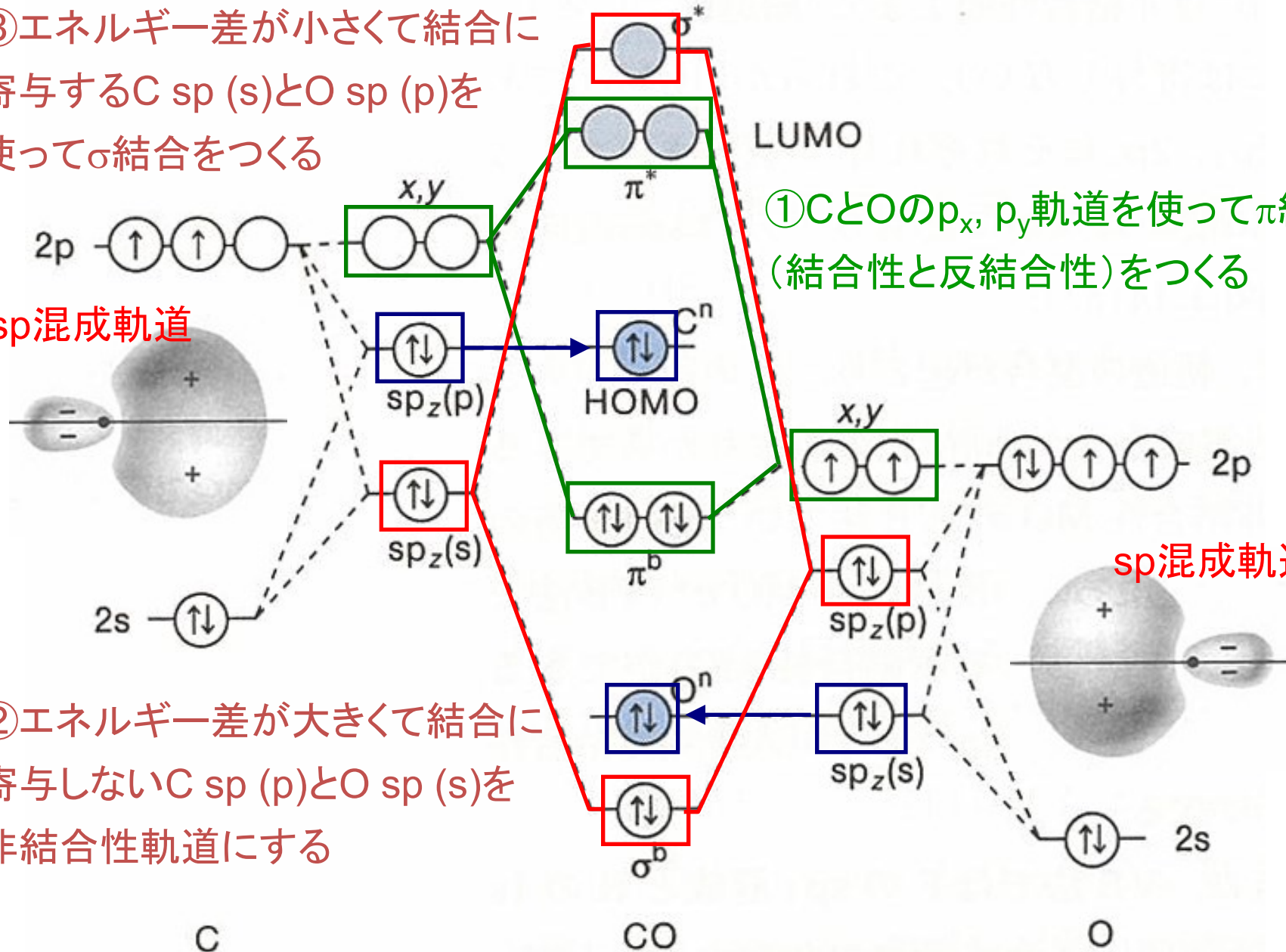
③ エネルギー差が小さくて結合に寄与するC sp (s)とO sp (p)を使ってσ結合をつくる

① CとOの p_x, p_y 軌道を使ってπ結合(結合性と反結合性)をつくる

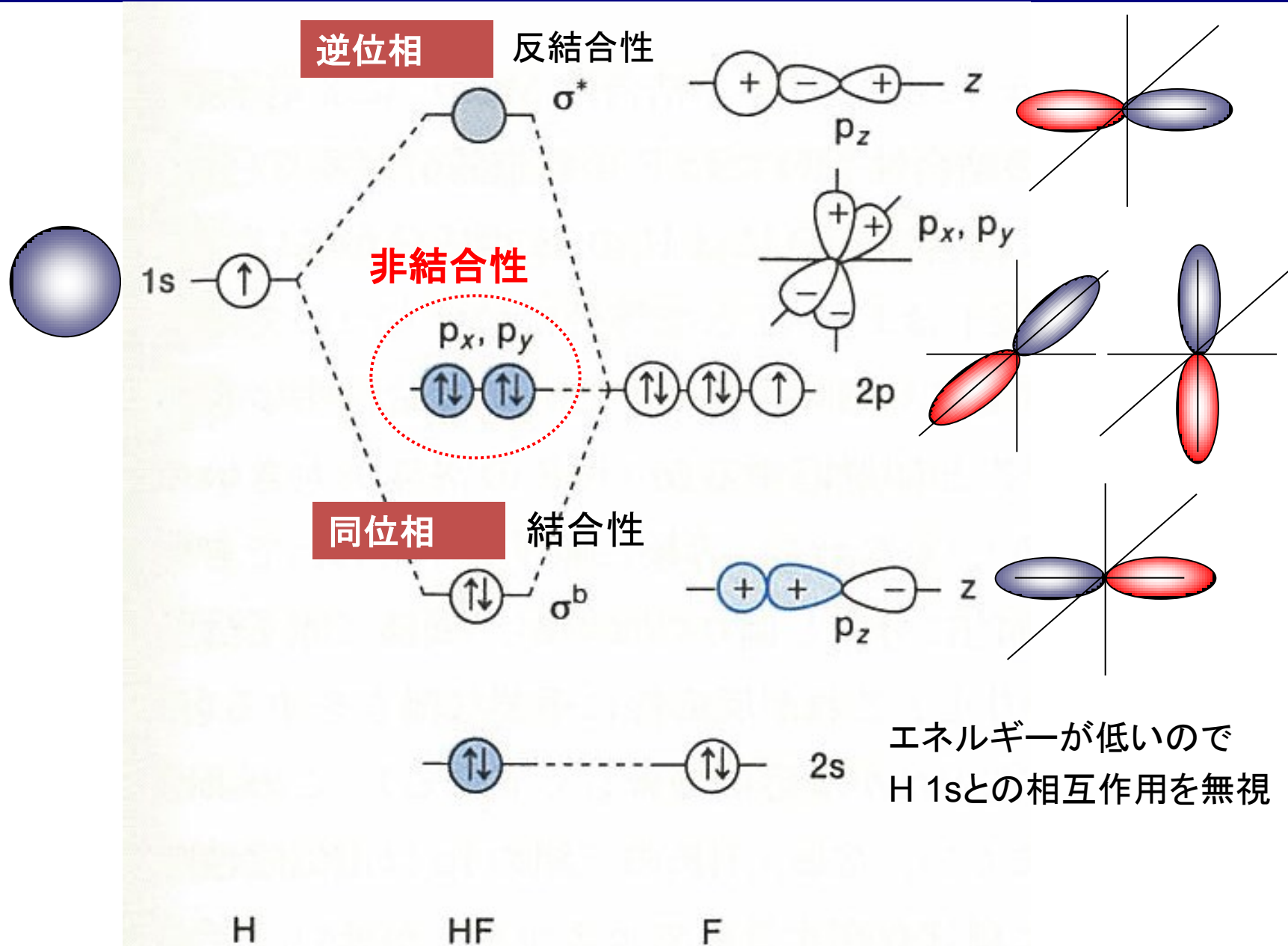
sp混成軌道

sp混成軌道

② エネルギー差が大きくて結合に寄与しないC sp (p)とO sp (s)を非結合性軌道にする



4.3 HFの分子軌道 (HF分子- H 1s- F 2sを無視)



4.3 HFの分子軌道 (HF分子- H 1s- F 2sを考慮する場合)

1sの寄与が大きい

