

14. 分子構造

ボルン-オッペンハイマー近似

原子核は固定 電子だけの波動関数を考慮

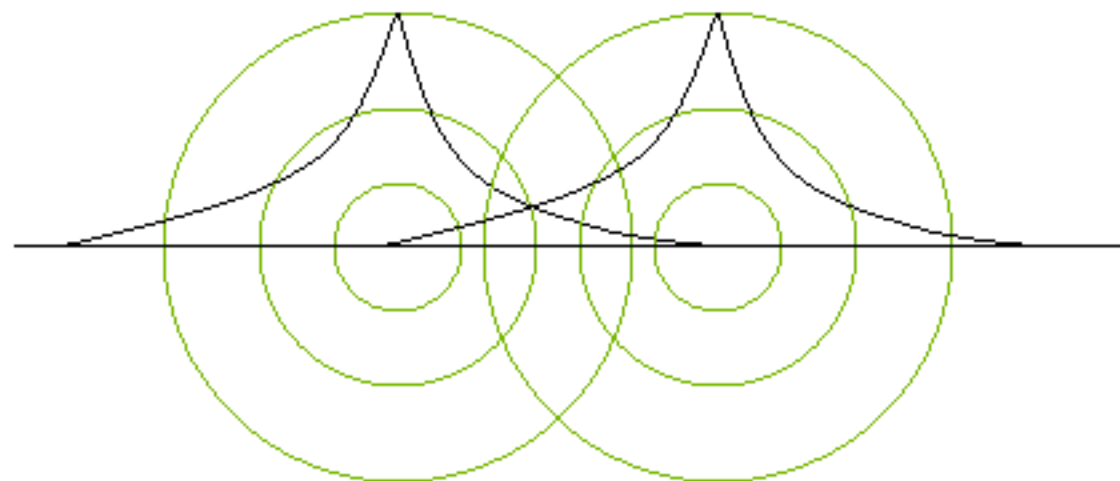
原子価結合法 価電子 共有電子対

H_2 分子の波動関数

電子1が原子Aにあり、電子2が原子Bにあるとき

$$\psi = \psi_{H1sA}(r_1)\psi_{H1sB}(r_2)$$

$$\psi = A(1)B(2) + A(2)B(1)$$

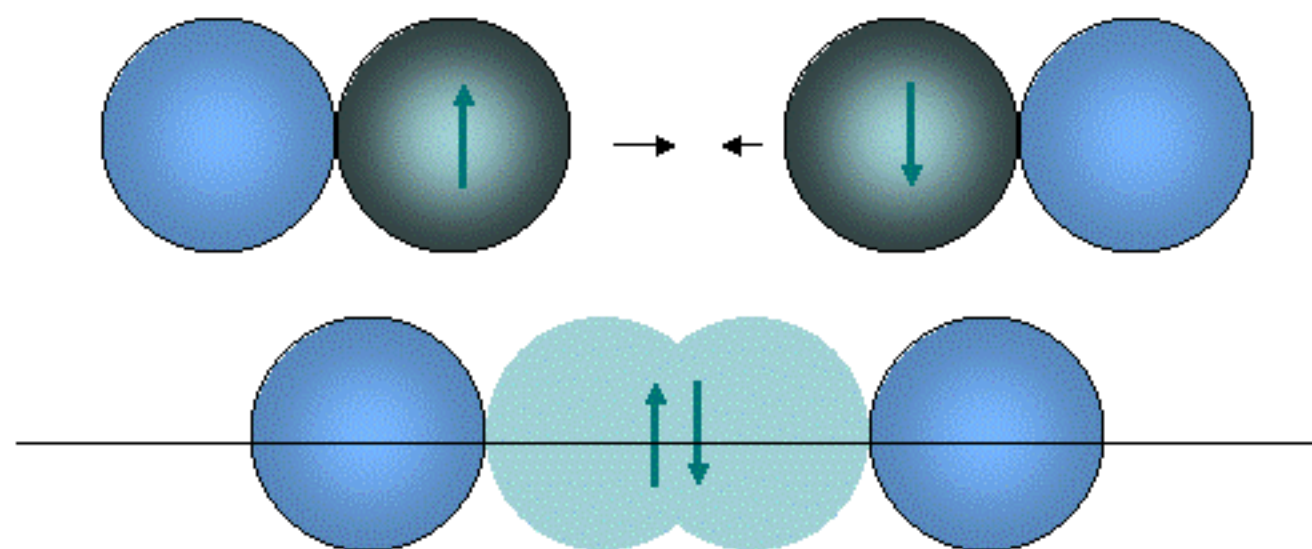


結合軸

σ 結合

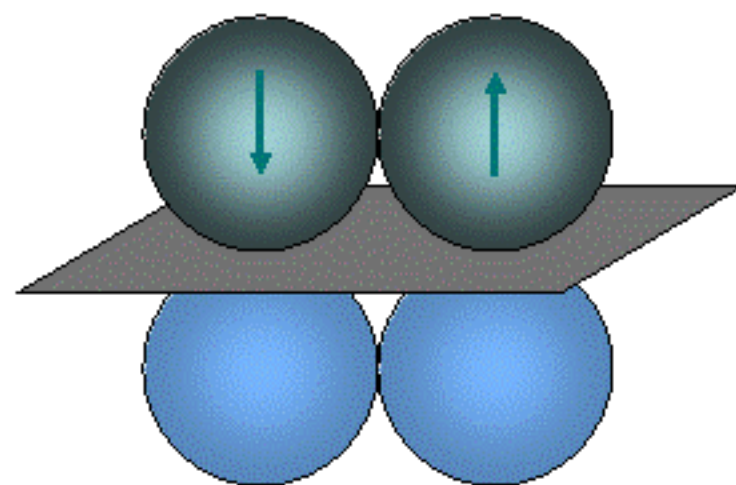
軸まわり円筒対称

電子のスピンは対になる



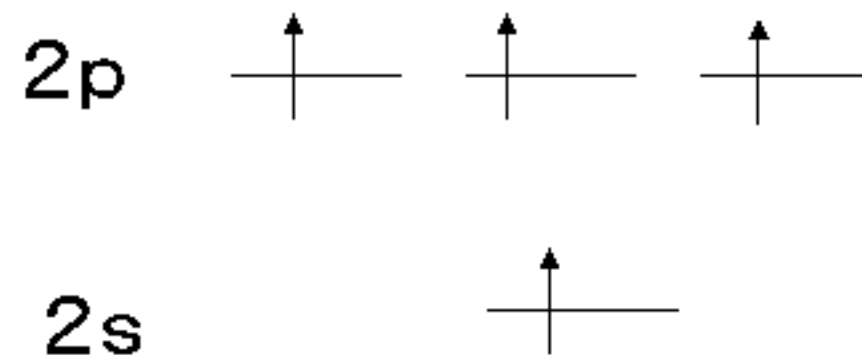
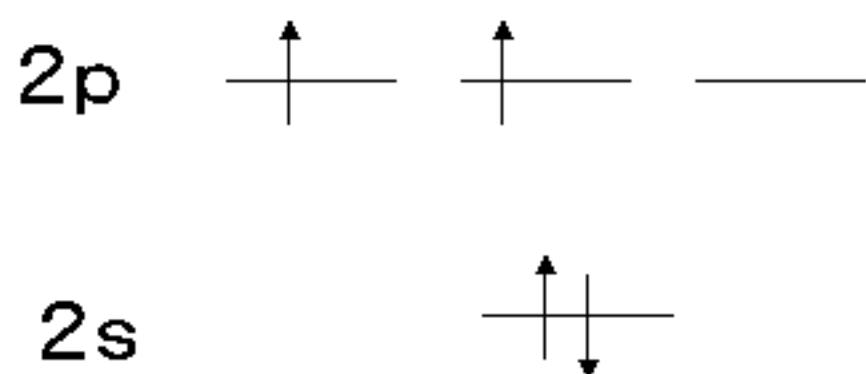
π 結合

pオービタルが側面同士近づく

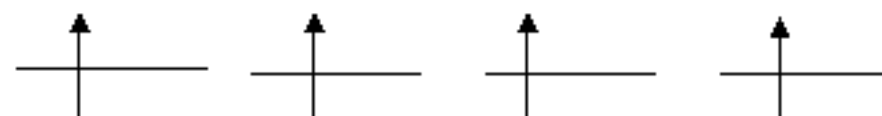
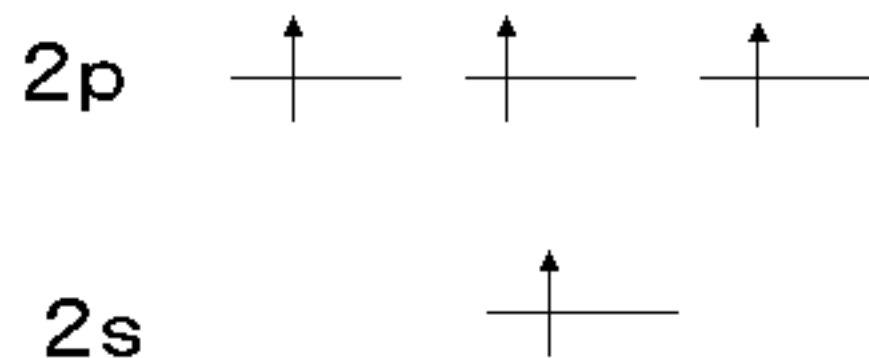


昇位 電子を励起させ不対電子の数を増やす

C $1s^2 2s^2 2p^2$



混成 混成オービタル



sp^3 混成