

分子軌道法(MO法)

水素分子イオン 1電子2原子核

分子オービタル

原子オービタルの1次結合 LCAO-MO

σ オービタル

$$\psi_{\pm} = N(A \pm B)$$

$$\psi_{+}^2 = N^2(A^2 + B^2 + 2AB)$$

重なり密度

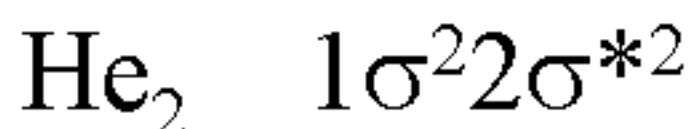
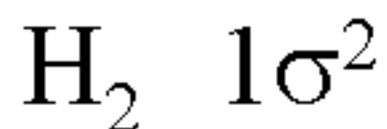
結合オービタル 1σ σ 電子

反結合オービタル $2\sigma^*$

$$\psi_{-}^2 = N^2(A^2 + B^2 - 2AB)$$

二原子分子の構造

分子オービタルエネルギー準位図



結合次数 $b = \frac{1}{2}(n - n^*)$

結合次数が大きい

結合が短い

結合強度が大きい

第二周期の二原子分子

σ オービタル

$$\psi = c_{A2s}\psi_{A2s} + c_{B2s}\psi_{B2s}$$

$$\psi = c_{A2p_z}\psi_{A2p_z} + c_{B2p_z}\psi_{B2p_z}$$

π オービタル

2個のpオービタルが重なり合って、結合
及び反結合 π オービタルを作る

$$1\pi, 2\pi^*$$

重なり積分 2個のオービタルの重なり度合い

$$S = \int \psi_A^* \psi_B d\tau$$

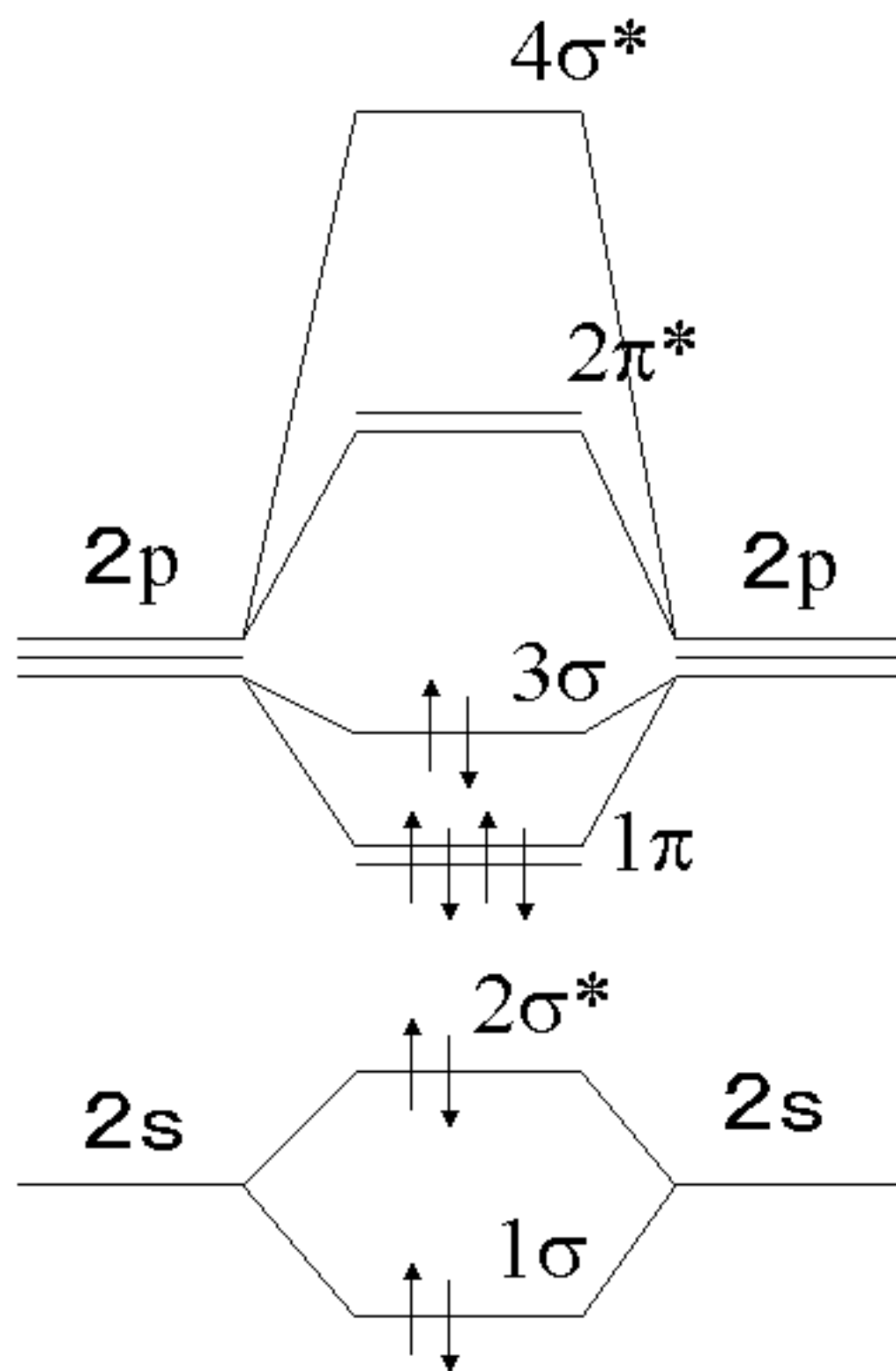
等核二原子分子の構造

N_2 の基底状態の配置 $1\sigma^2 2\sigma^{*2} 1\pi^4 3\sigma^2$

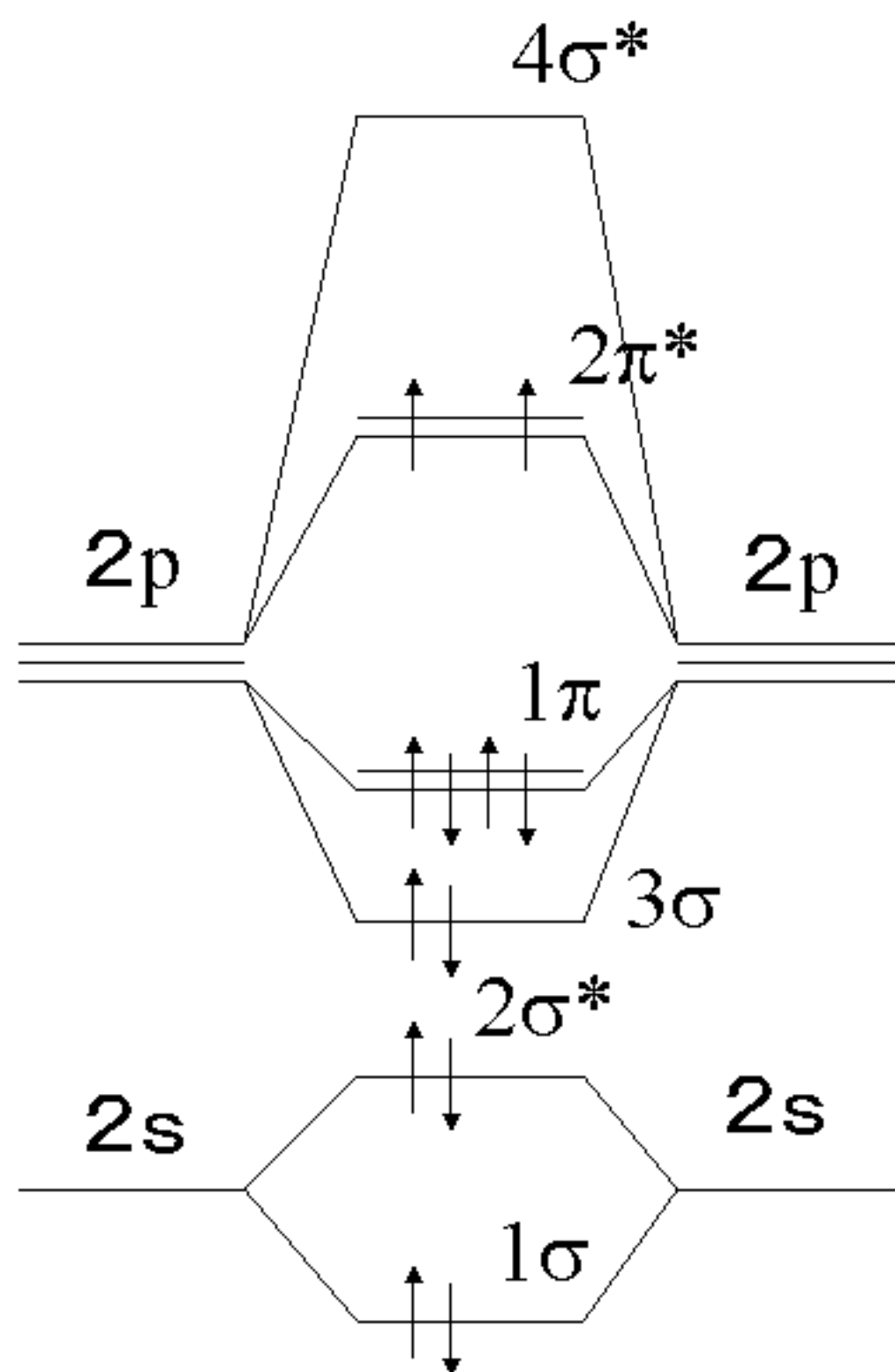
パリティ 反転

g 同符号

u 反対符号



N_2 まで



O_2 と F_2