化学第二　第8回

東京工業大学大学院
電子物理工学専攻

真島豊

8-0　本日のメニュー

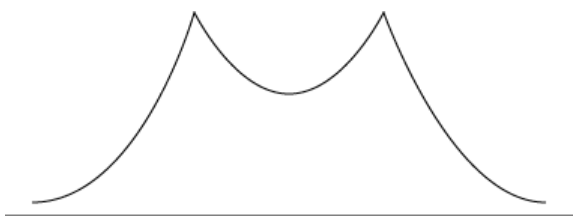
「 異核2原子分子」

8-1　水素分子H2の結合性軌道と反結合性軌道
8-2　異核2原子分子(VB法)
8-3　異核2原子分子(MO法)(電子1コ)
8-4　原子a、b上の電子の割合(MO法)
8-5　どちらの原子に電子は偏るか

8-1　水素分子H_2の結合性軌道と反結合性軌道

H_2分子の軌道は、H_2^+イオンの軌道と定性的には同じ

○結合性軌道



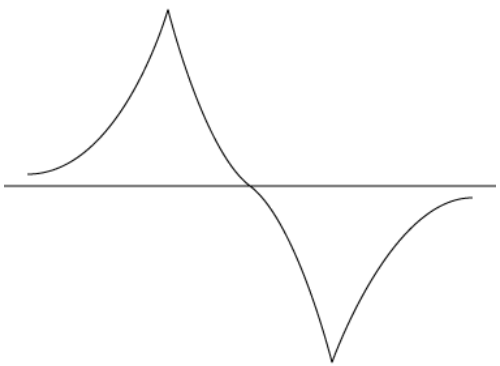
H_2では、H_2^+よりも核間距離　小

→　重なり積分　大

→　軌道の区別が付きにくい

→　電子の非局在化

○反結合性軌道



核間電子の存在確率は小さく中間ではゼロ

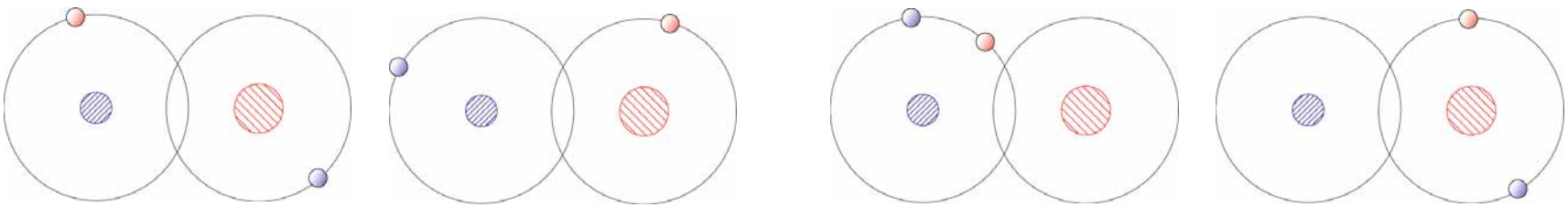
→　接着剤としての電子無し

→　解離

8-2　異核2原子分子　VB法

特徴：極性を持つ(双極子モーメント)

4つの状態　(VB法)



$\Psi_{a(1)}\Psi_{b(2)}$　　$\Psi_{a(2)}\Psi_{b(1)}$　　$\Psi_{a(1)}\Psi_{a(1)}$ or $\Psi_{b(2)}\Psi_{b(2)}$

$$\Psi_{covalent} = \Psi_{a(1)}\Psi_{b(2)} + \Psi_{a(2)}\Psi_{b(1)} \quad \Psi_{ion} = \Psi_{a(1)}\Psi_{a(2)} \ or \ \Psi_{b(1)}\Psi_{b(2)}$$

異核分子の波動関数は　$\Psi = C_1\left(\Psi_{cov} + \delta\Psi_{ion}\right)$

$\delta = 0$ 100%共有結合

$\delta = 1$　50%共有結合

8-3 異核2原子分子 MO法 (電子1コ)

波動関数 $\Psi = C_2(\Psi_a + \delta\Psi_b)$ Ψ_a, Ψ_b は原子A,Bの波動関数

規格化してC_2を求めると

$$\int \Psi^* \Psi dv = C_2{}^2 \int \{\Psi_a^* \Psi_a + \delta(\Psi_a^* \Psi_b + \Psi_b^* \Psi_a) + \delta^2 \Psi_b^* \Psi_b\} dv \quad = 1$$

$$\therefore C_2 = \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2+2\delta S}}$$

ただしSは重なり積分

$$S = \int \Psi_a^* \Psi_b \, dv$$

8-4　原子a、b上の電子の割合(MO法)

原子a上に電子が存在する割合

$$\frac{c_2{}^2\int\Psi_a{}^2dv}{\int\Psi^2dv}=\frac{1}{1+\delta^2+2\delta S}$$

原子b上に電子が存在する割合

$$\frac{c_2{}^2\delta^2\int\Psi_b{}^2dv}{\int\Psi^2dv}=\frac{\delta^2}{1+\delta^2+2\delta S}$$

したがって、δ>1では原子a上での電子の存在確率は原子b上より小さい
→原子aではプラス、原子bではマイナスの電荷を持つ

0<δ<1では逆に原子a上に電子が存在する確率が大きい