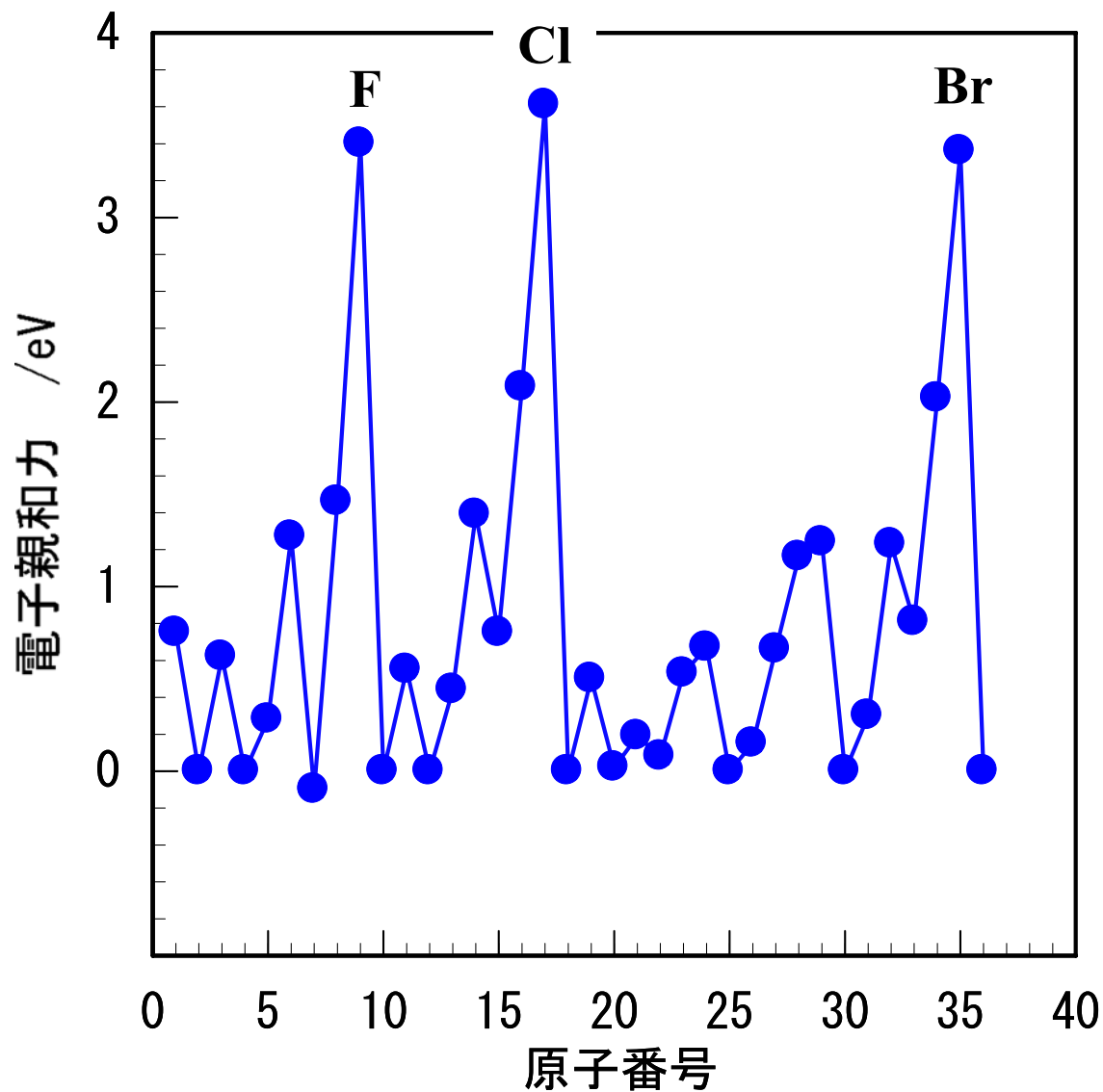


●電子親和力の周期性



電子親和力



\mathbf{M}^- から電子を取り去るのに要するエネルギー

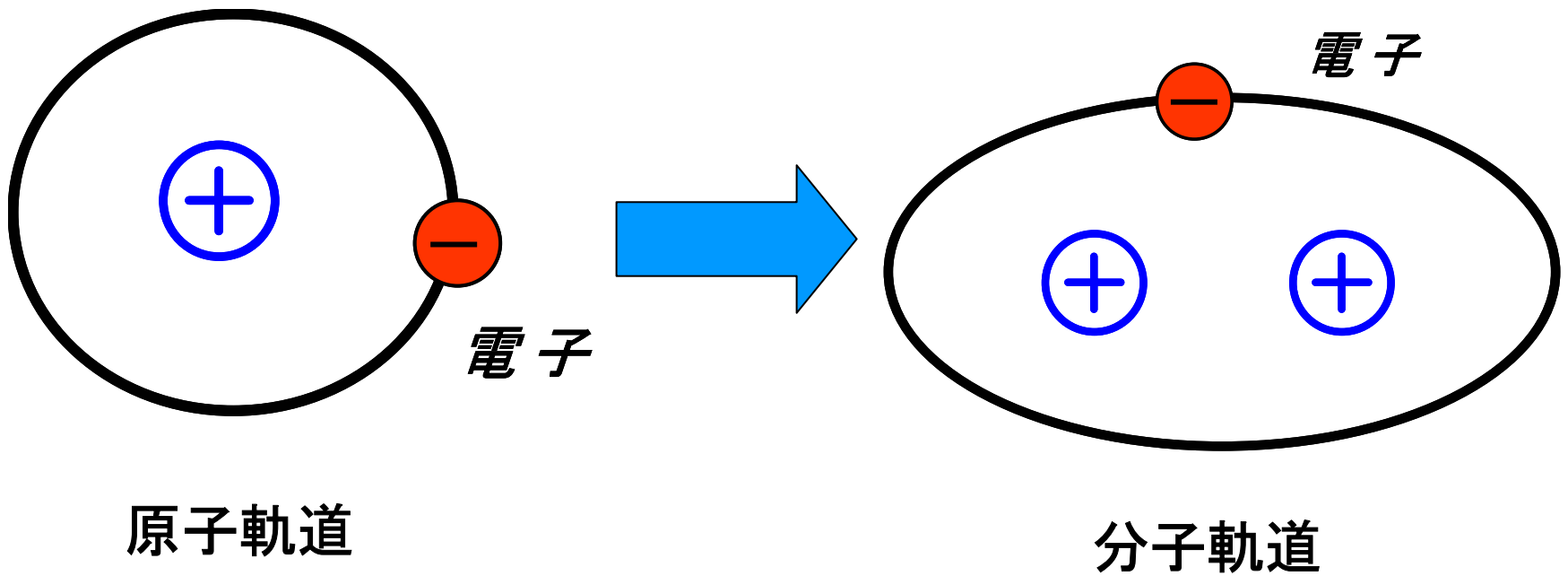
第6章 二原子分子の 共有結合

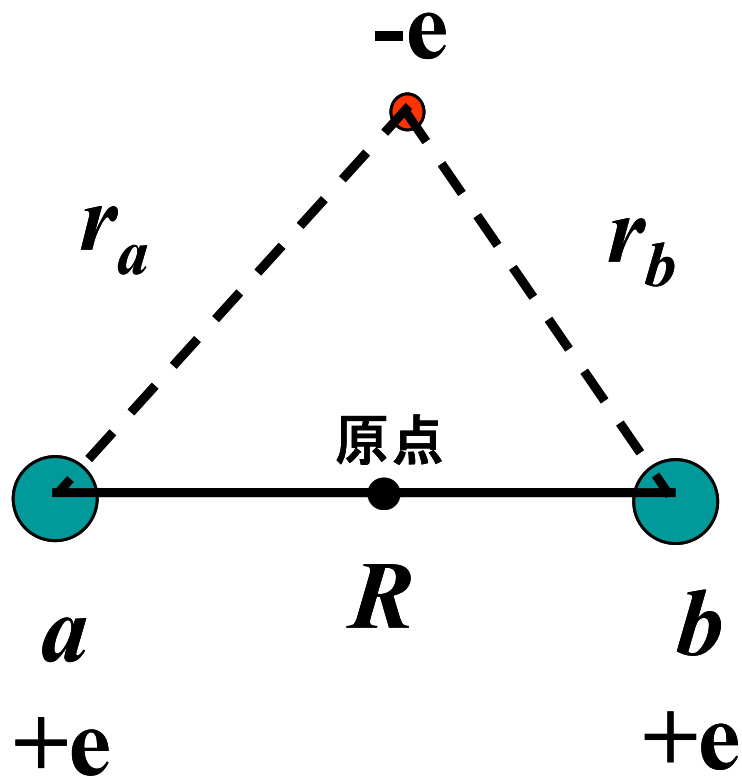
§ 6. 1 水素分子イオン

§ 6. 2 H_2 と He_2

§ 6. 3 等核2原子分子

§ 6. 1 水素分子イオン





$$r_a \ll R \quad \psi_{\text{MO}} \Rightarrow \psi_{1sa}$$

$$r_b \ll R \quad \psi_{\text{MO}} \Rightarrow \psi_{1sb}$$

数式で厳密には解けないので、対称性に着目して考える。波動関数が、原点に対して対称であるためには、

$$\psi(-r) = \psi(r) \quad \cdots (6-1)$$

または、

$$\psi(-r) = -\psi(r) \quad \cdots (6-2)$$

の性質を持たなければならない。

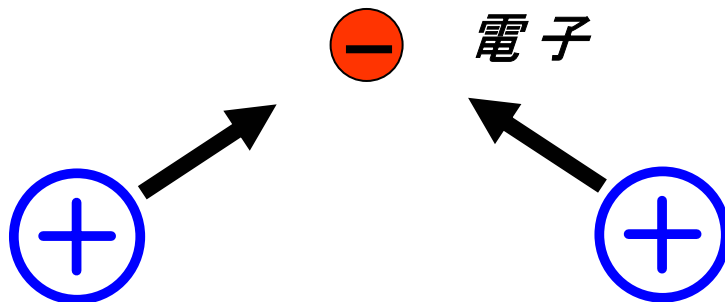
$\psi(-r) = \psi(r)$ を満たす関数

$$\Psi_{\text{MO}} = N_+(\psi_{1sa} + \psi_{1sb}) \equiv \Psi_{\text{MO}}^+ \quad \cdots (6-3)$$

$\psi(-r) = -\psi(r)$ を満たす関数

$$\Psi_{\text{MO}} = N_-(\psi_{1sa} - \psi_{1sb}) \equiv \Psi_{\text{MO}}^- \quad \cdots (6-4)$$

ψ_{MO}^+ : 原子間結合領域に電子の存在確率が増加

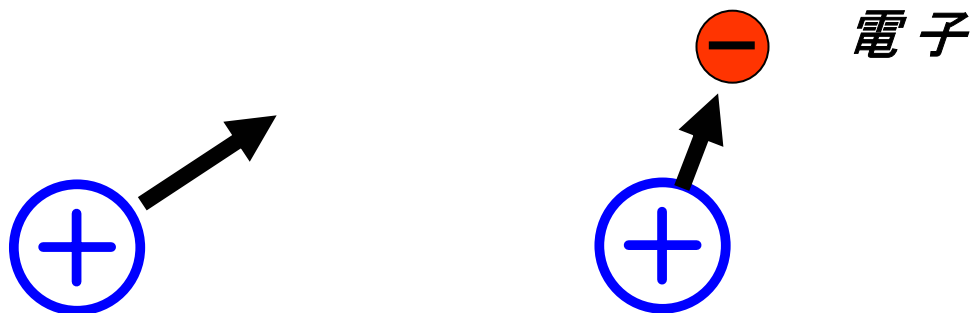


- 電子の遮蔽効果のため、核間反発が弱まる。
- 電子は、a核とb核と結合するため、位置エネルギーがより安定化。

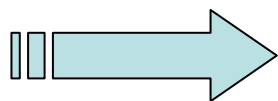


結合性分子軌道

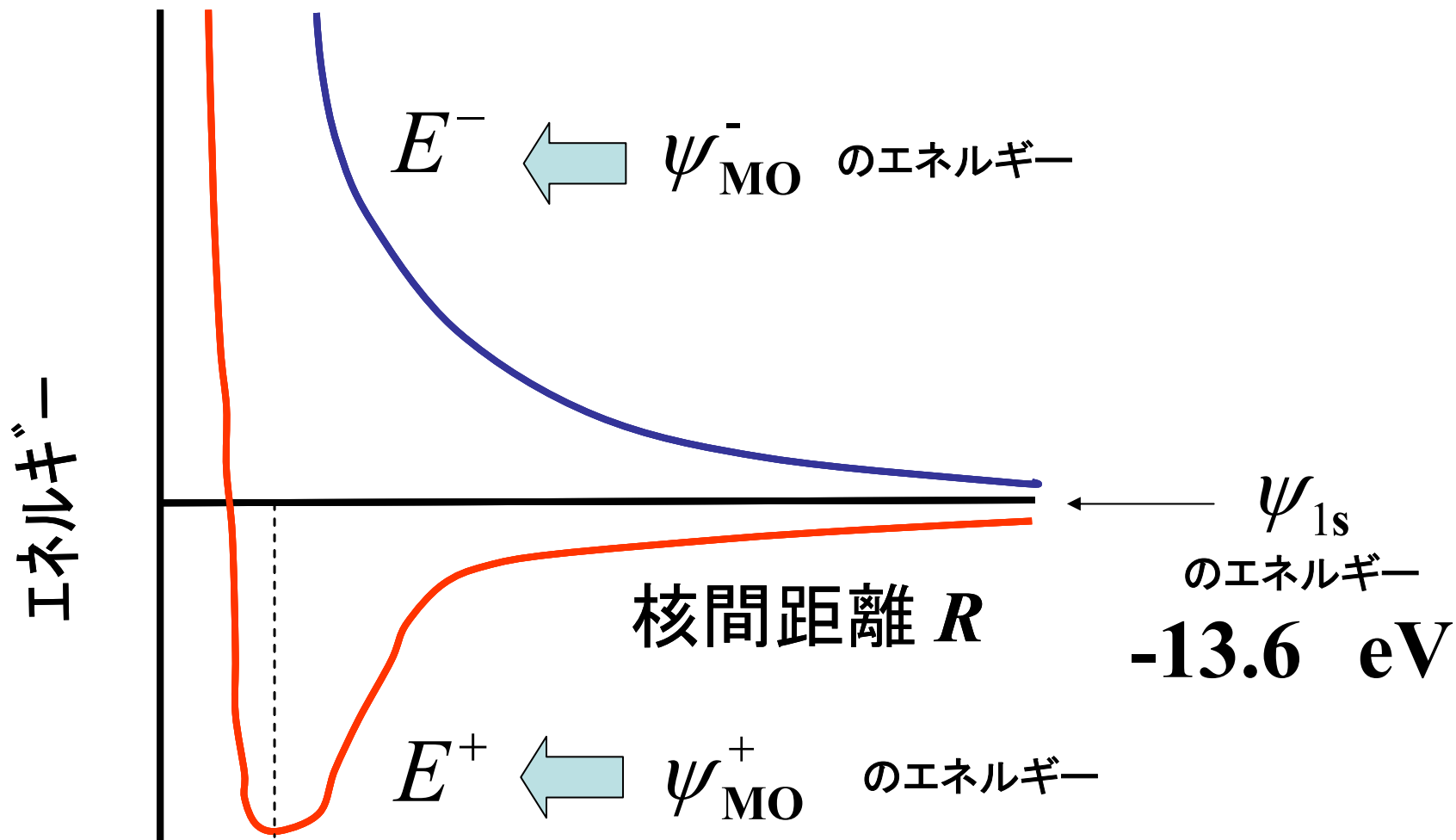
ψ_{MO}^- : 原子間結合領域に電子の存在確率が減少



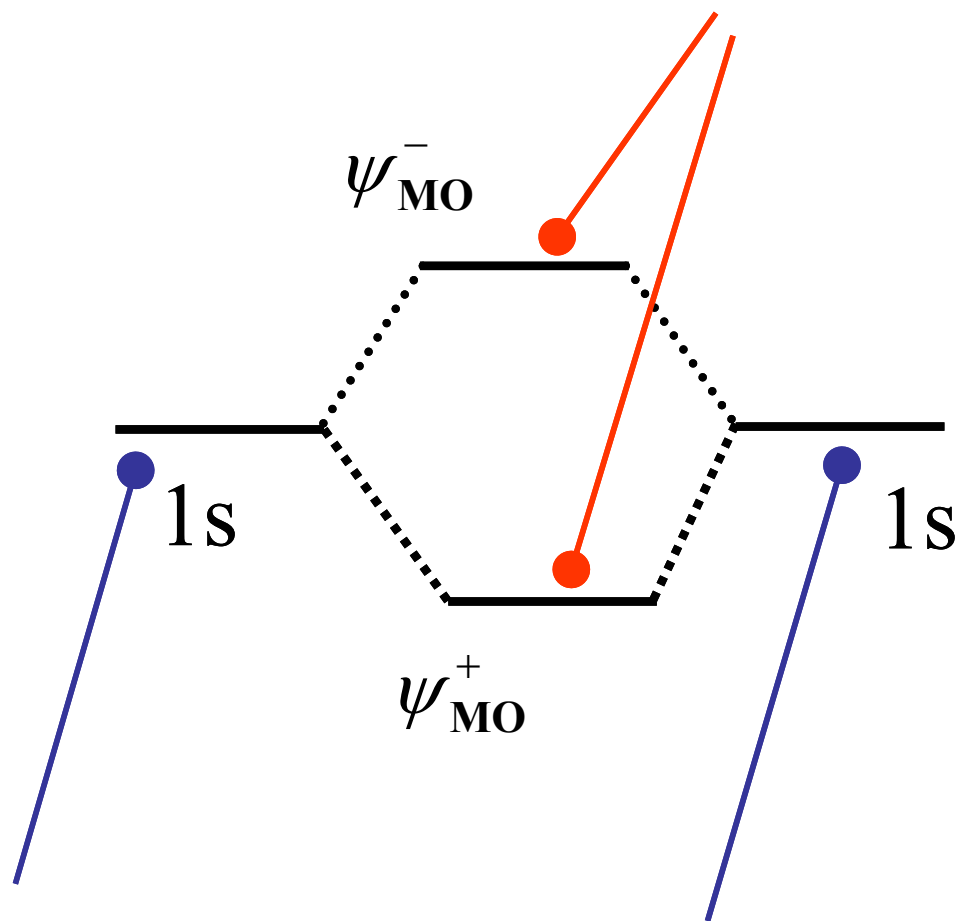
不安定化



反結合性分子軌道

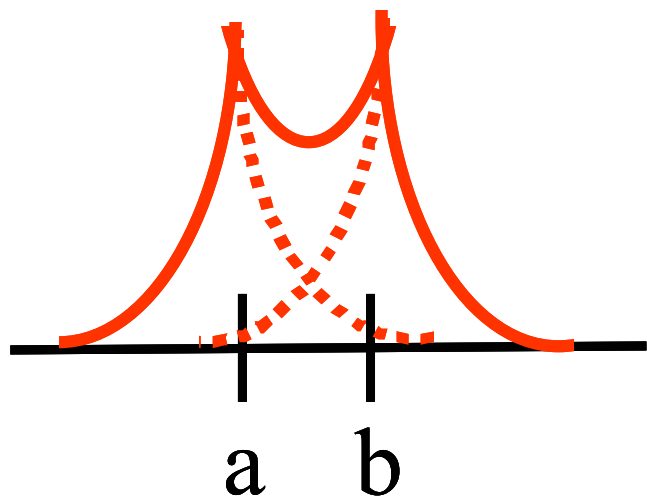


相互作用によってできた2つの分子軌道

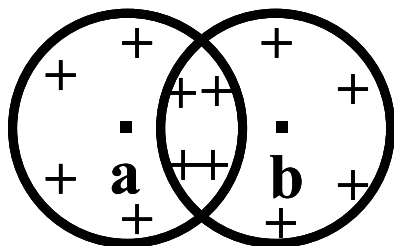


相互作用する前の原子軌道

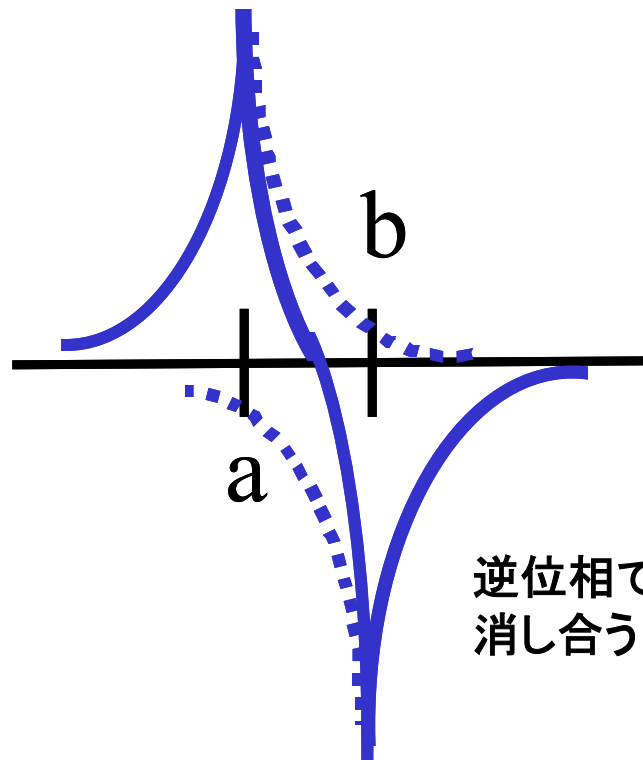
$$\psi_{\text{MO}}^{+}$$



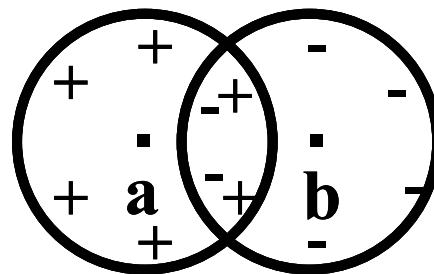
同位相で強め合う



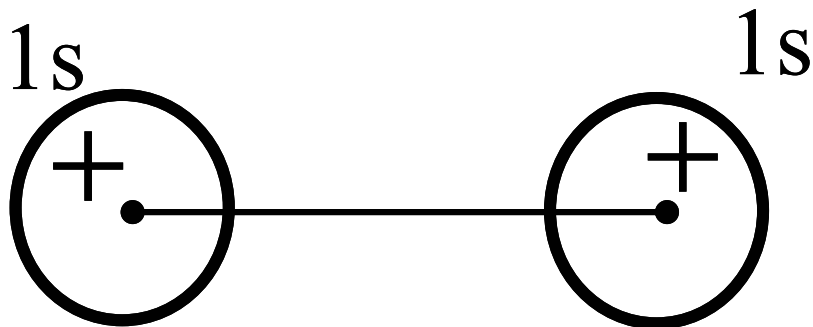
$$\psi_{\text{MO}}^{-}$$



逆位相で打ち
消し合う

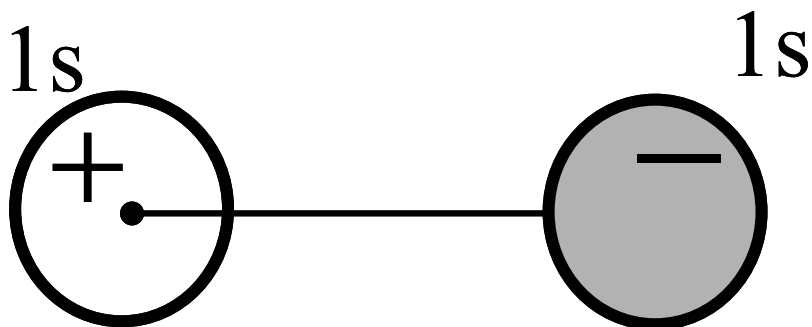


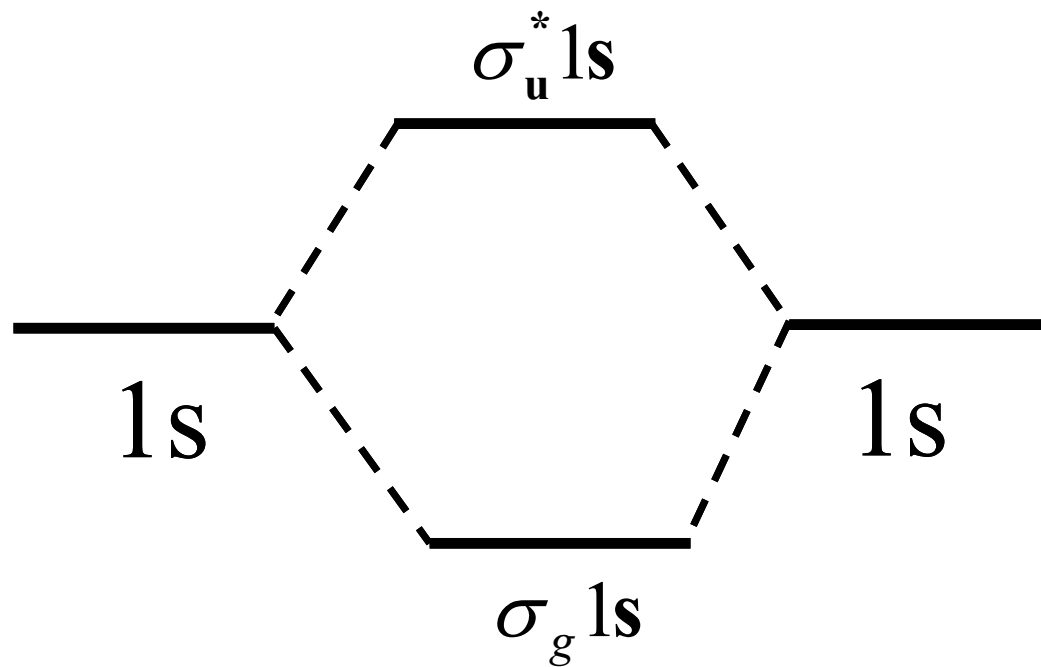
$\sigma_g 1s$



反結合性分子軌道にアスタリスクをつける

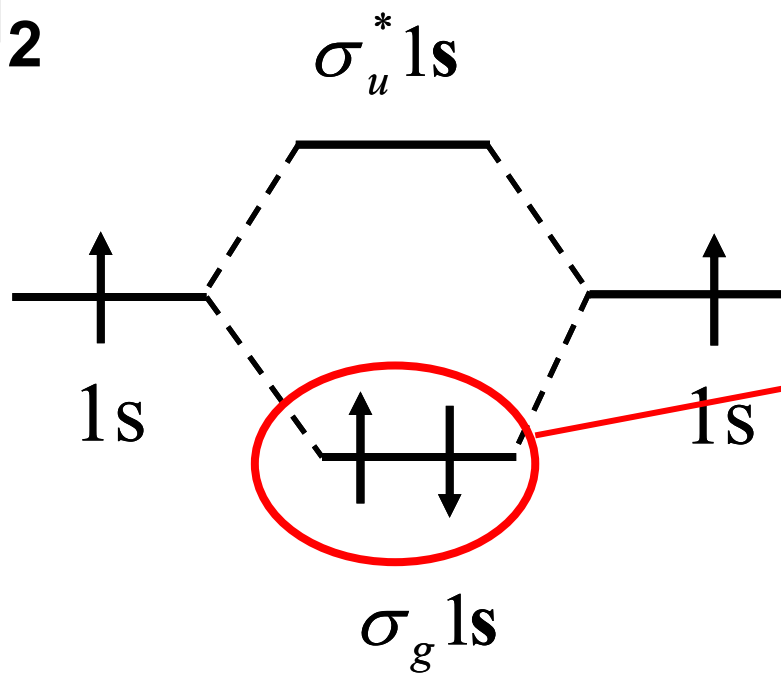
$\sigma_u^* 1s$





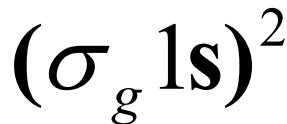
§ 6. 2 H_2 と He_2

H_2



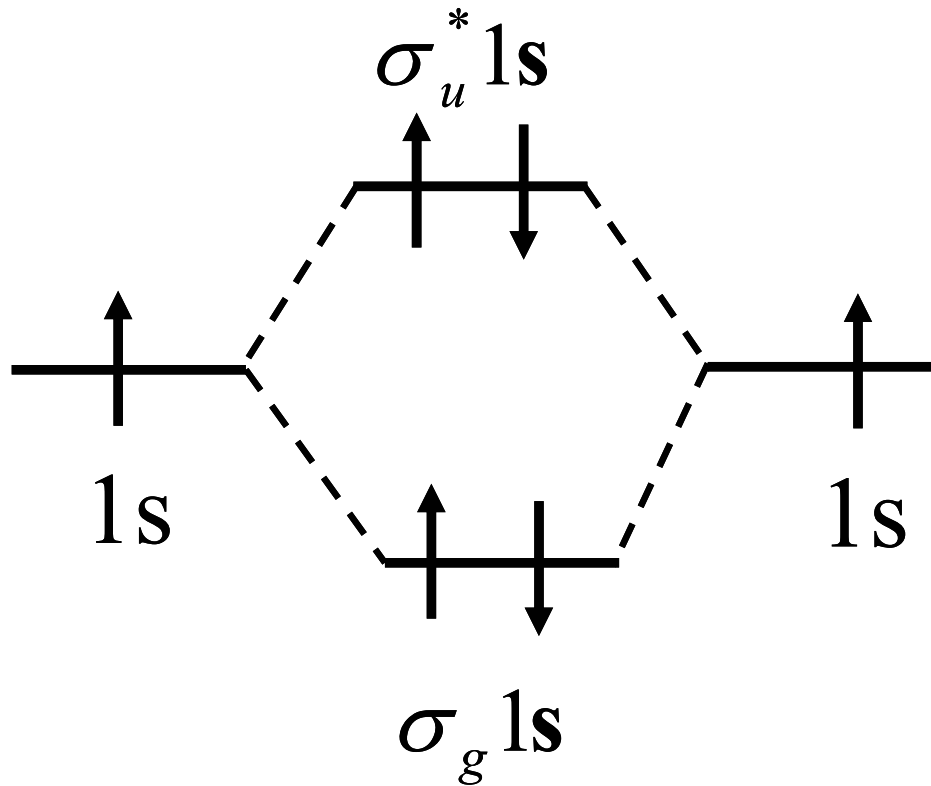
基底状態の H_2 分子の電子配置を

占有電子数



と記述する。

He₂



電子配置は、

$$(\sigma_g 1s)^2 (\sigma_u^* 1s)^2$$