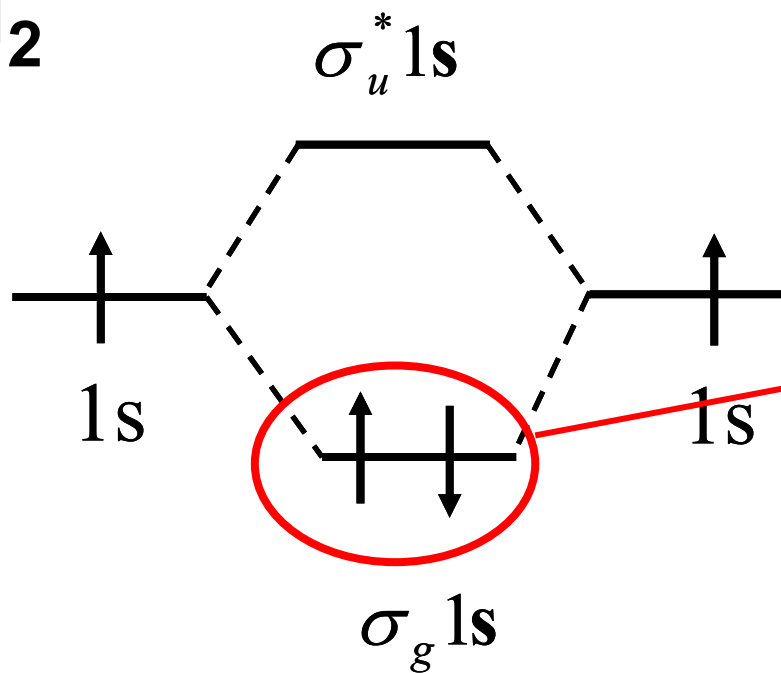


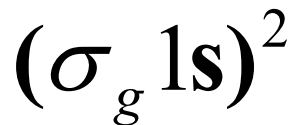
§ 6. 2 H_2 と He_2

H_2



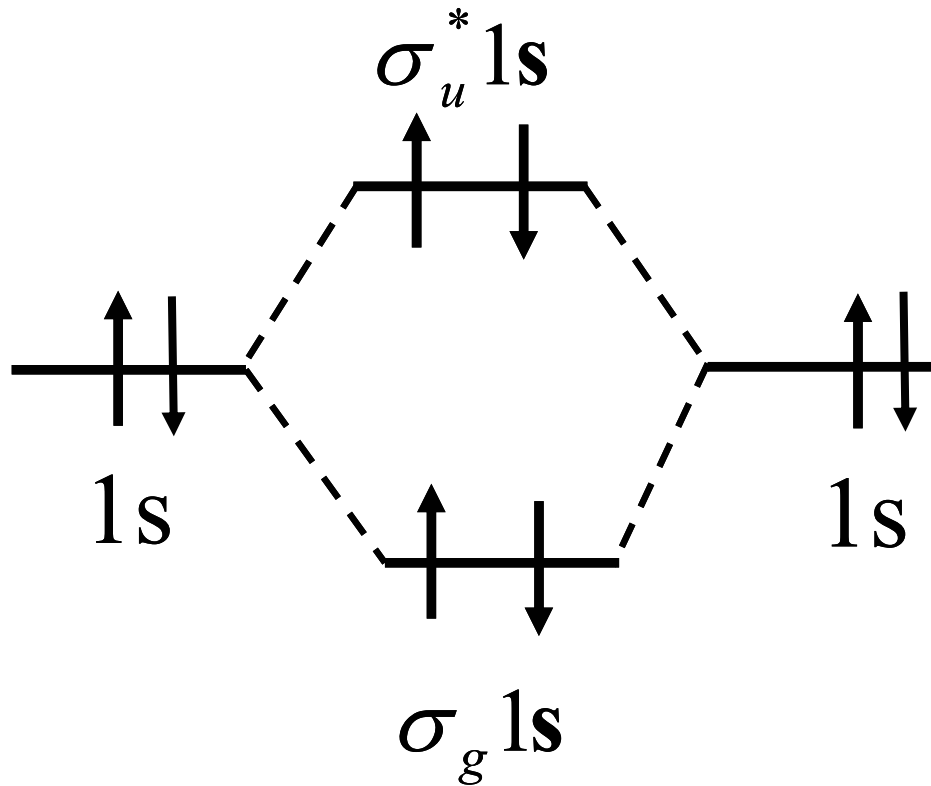
基底状態の H_2 分子の電子配置を

占有電子数



と記述する。

He₂



電子配置は、

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

結合次数 n は、次の式で求められる。

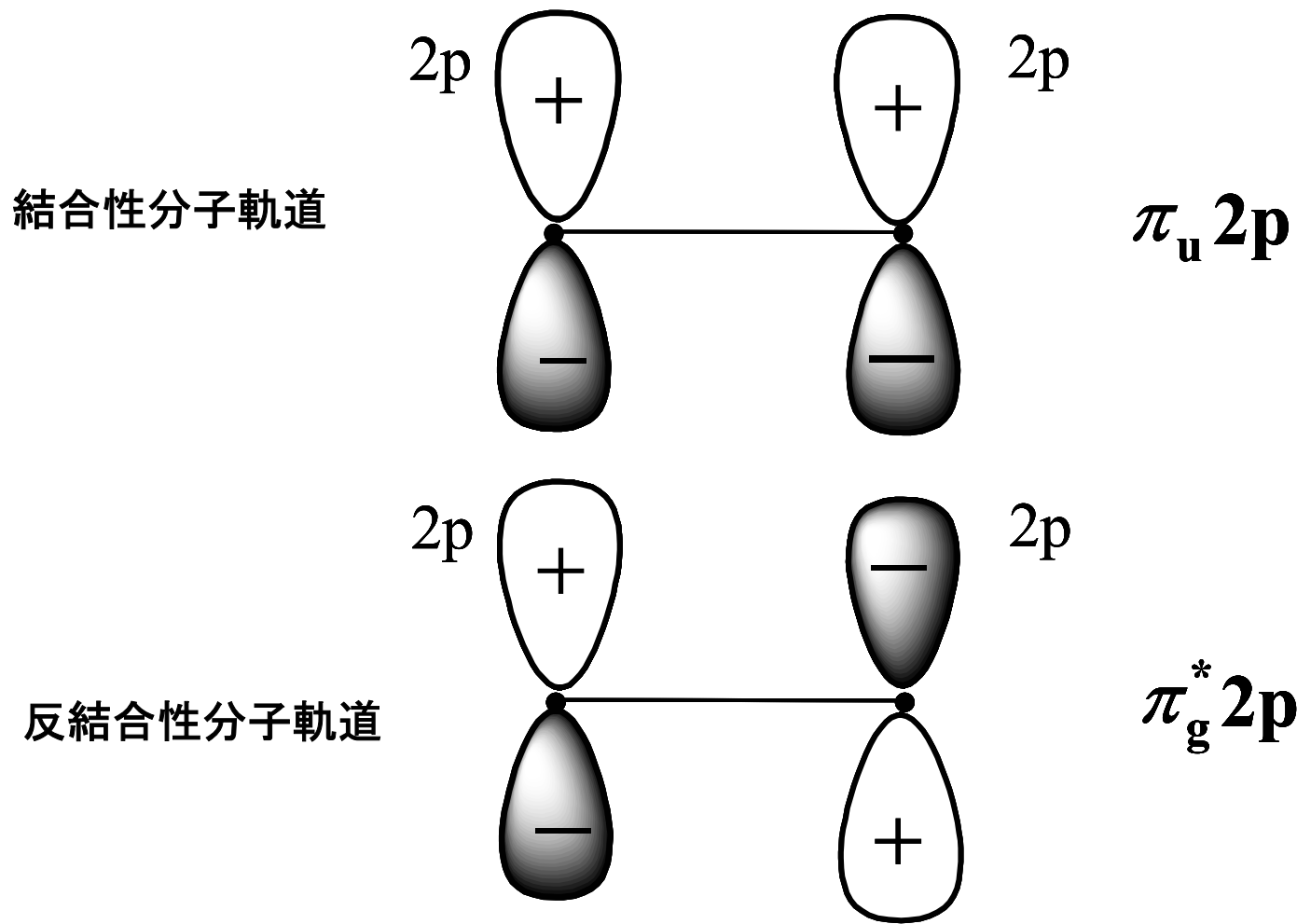
$$n = \frac{(n_{\text{bond}} - n_{\text{anti}})}{2} \quad \cdots (6-5)$$

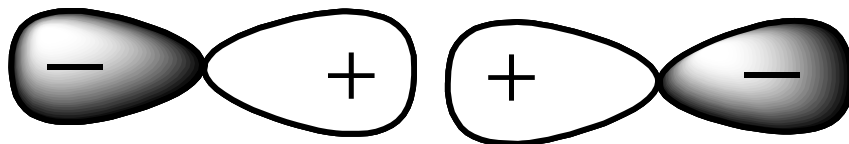
n_{bond} : 結合性軌道の占有電子数

n_{anti} : 反結合性軌道の占有電子数

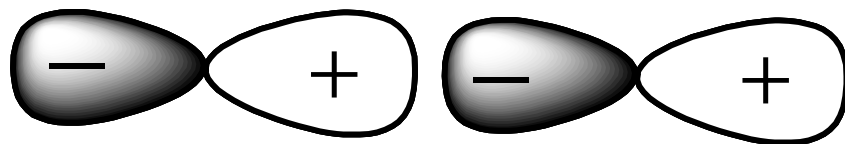
§ 6. 3 等核2原子分子

p軌道どうしの相互作用





$\sigma_g 2p$



$\sigma_u^* 2p$

σ 分子軌道：結合軸方向に延びて形成される分子軌道。

σ 結合： σ 分子軌道によってできる結合。

σ 電子： σ 分子軌道を占める電子。

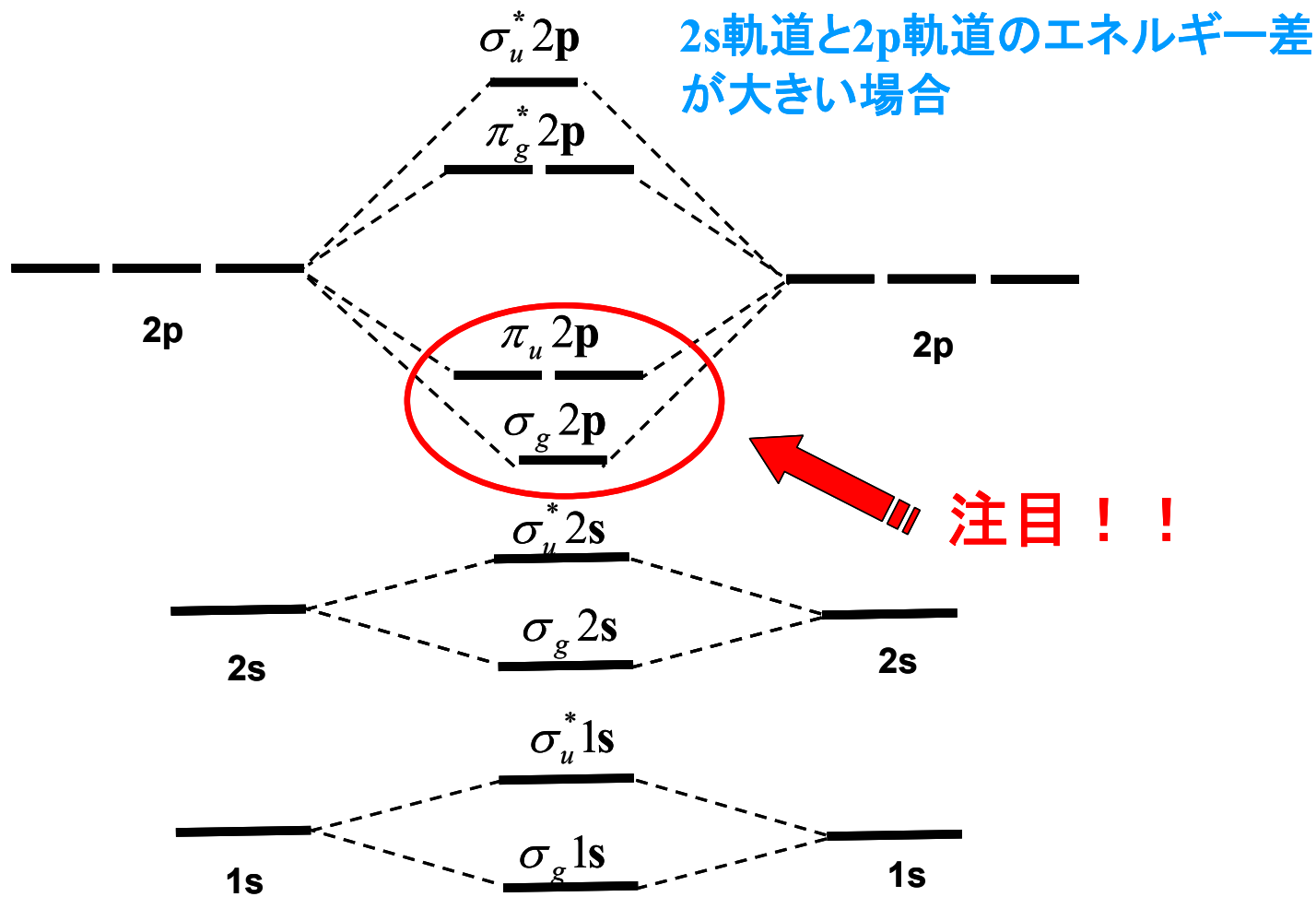
π 分子軌道：原子軌道が結合軸と直角の方向に伸びて形成される分子軌道。

π 結合： π 分子軌道によってできる結合。

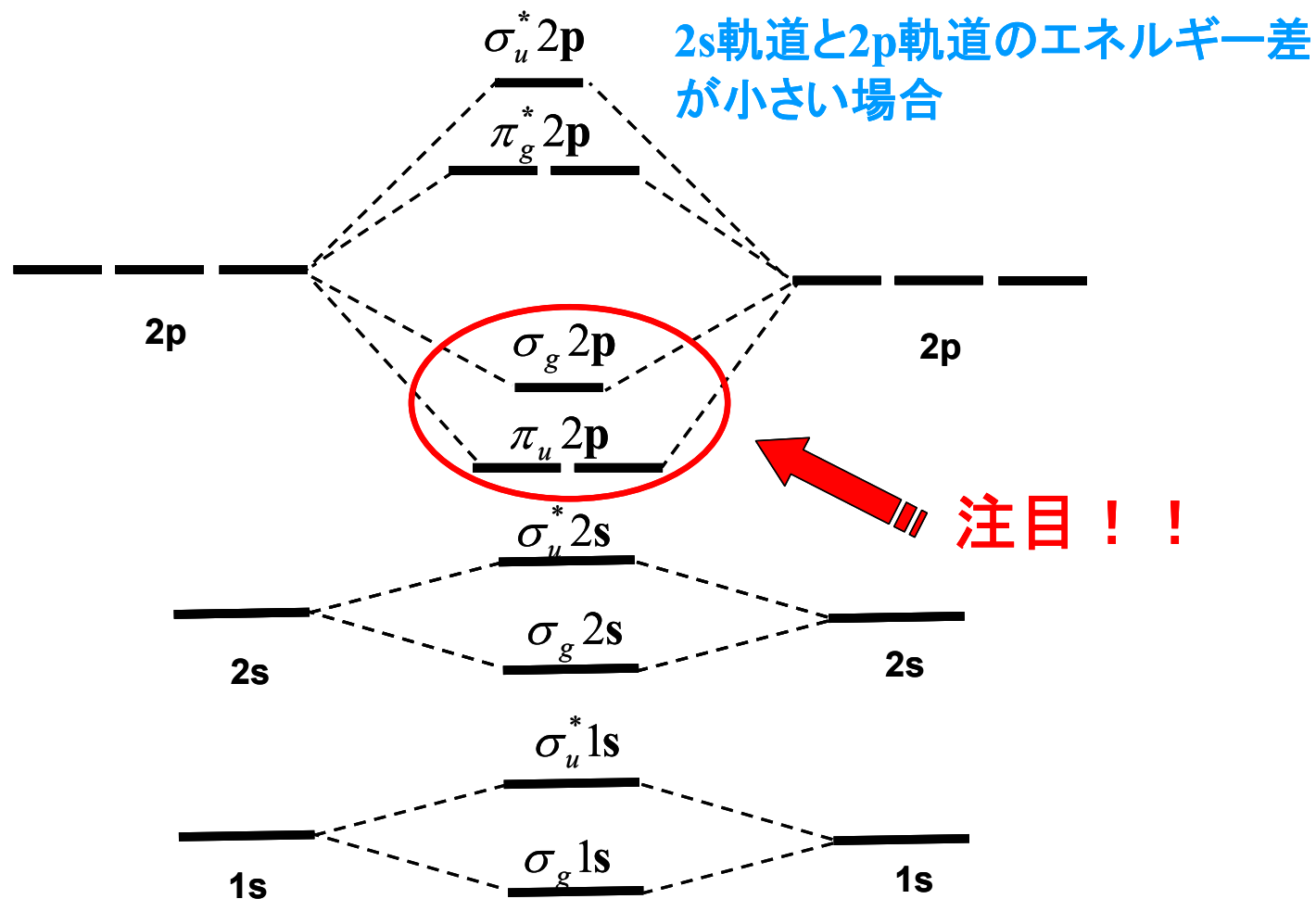
π 電子： π 分子軌道を占める電子。

σ 結合は、より接近できるので
 π 結合にくらべ、安定化、不安
定化の度合いが大きい。

等核2原子分子の分子軌道 ($\text{O}_2 \sim \text{Ne}_2$)



等核2原子分子の分子軌道 ($B_2 \sim N_2$)



2原子分子でも構成原理は成り立つ。

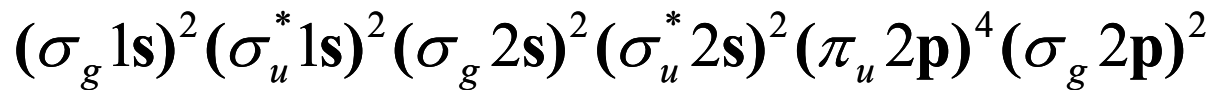
N₂:

授業後の補足:

$n_{\text{bond}}=2+2+4+2=10$ (* の付いていない軌道の電子占有数)

$n_{\text{anti}}=2+2=4$ (* の付いた軌道の電子占有数)

これより結合次数 $n = 3$



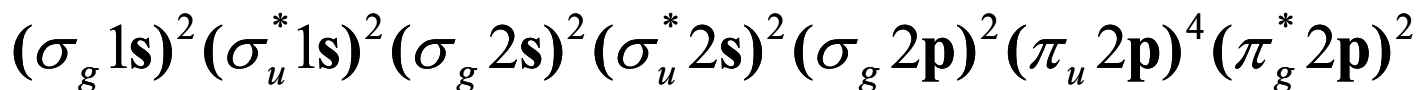
O₂:

授業後の補足:

$n_{\text{bond}}=2+2+2+4=10$ (* の付いていない軌道の電子占有数)

$n_{\text{anti}}=2+2+2=6$ (* の付いた軌道の電子占有数)

これより結合次数 $n = 2$



分子の場合でもエネルギーの低い順に書く

●等核2原子分子の特徴(原子番号1～10)

結合次数が0 → 安定に存在しない。

常磁性を示す → B_2 、 O_2

結合エネルギーが最大 → N_2

結合次数が大きい

→結合エネルギーが大

→結合距離が短くなる

N_2 (結合次数3)

1.09 Å

<

N_2^+ (結合次数2.5)

1.12 Å

O_2 (結合次数2)

1.20 Å

>

O_2^+ (結合次数2.5)

1.12 Å

● N 個の原子軌道の線形結合で N 個の分子軌道ができる。

●結合性分子軌道は安定化し、反結合性分子軌道は不安定化する。

●原子軌道間の重なりが大きいほど、結合性分子軌道は安定化し、反結合性分子軌道は不安定化する。