

10 多原子分子におけるハイブリッド軌道

これまで、分子軌道 ψ を構築するために、原子軌道 ϕ の線形結合を使用してきました。

$$\psi = \sum_{i=1}^N C_i \phi_i$$



分子内のある原子に中心を持つ水素様原子軌道

分子軌道理論では、 ψ は電子が分子全体に分布している（電子が局在化していない）。



追跡が難しい

ハイブリダイゼーションは、各分子軌道が原子および近くの原子に強く結合しているように、分子軌道を簡略化するものです。これは次のように達成できます。

- ① 単一の原子からの原子軌道の線形結合によるハイブリッド軌道の形成
- ② 一对のハイブリッド軌道の単純な組み合わせによる分子軌道の近似

[解釈が容易]

10.1 sp ハイブリダイゼーション

即ち
注意



Be は 2 つの対象と共有結合を形成する必要があります。

↓

Be の 2 つの原子軌道が必要です。

↓

H の 2 つの軌道と共に、4 つの分子軌道が形成されると予想されます
①

$$\psi_{SP} = C_1 2S_1 + C_2 2P_z$$

簡略な予想

$$\psi_{SP} = \frac{1}{\sqrt{2}} (2S \pm 2P)$$

↗
B に中心を持つ 2 つの軌道 (±)
sp ハイブリダイゼーションにより

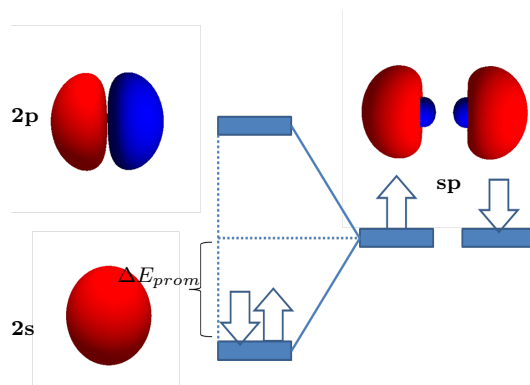


Figure 29: sp ハイブリダイゼーション

ハイブリダイゼーション前の安定化 E

$$2 \times E_{H_{1s}} + 2E_{Be_{2s}}$$

ハイブリダイゼーション後の昇進

$$2 \times E_{H_{1s}} + 2 \times E_{Be_{2s}} + 2 \times \overbrace{\left[\frac{1}{2} (E_{2p} - E_{2s}) \right]}^{E_{prom}}$$

合計エネルギー
は保存されなければなりません

化学結合形成後

$$\textcircled{1} \cdots 2 \times E_{H_{1s}} + 2 \times E_{Be_{2s}} + \underbrace{2 \times E_{prom} + 4 \times \Delta E_{Bonding}}_{\text{結合を形成するためには負でなければなりません}}$$

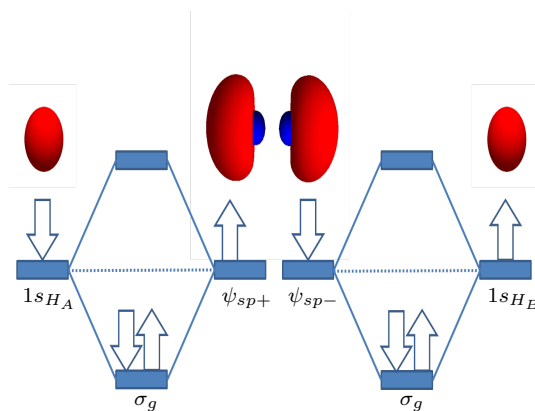
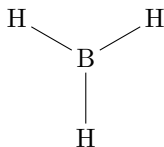


Figure 30: HBeH における sp ハイブリダイゼーション

実験 7
付録を参照

10.2 sp^2 ハイブリダイゼーション

即ち BH_3



B は 3 つの対象と結合を形成する必要があります



B の 3 つの軌道が必要です



6 つの分子軌道が期待されます

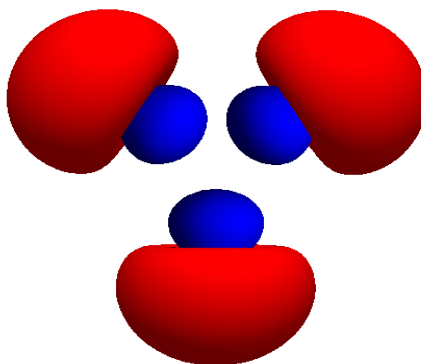


Figure 31: sp^2 ハイブリダイゼーション

$$\begin{cases} \psi_{SP'_2} &= \frac{1}{\sqrt{3}}2S + \sqrt{\frac{2}{3}}2P_y \\ \psi_{SP''_2} &= \frac{1}{\sqrt{3}}2S - \frac{1}{\sqrt{6}}2P_y + \frac{1}{\sqrt{2}}2P_x \\ \psi_{SP'''_2} &= \frac{1}{\sqrt{3}}2S - \frac{1}{\sqrt{6}}2P_y - \frac{1}{\sqrt{2}}2P_x \end{cases}$$

HW

$\{\psi_{SP_2}\}$ の直交性を確認してください。

$\int (\psi_{SP'_2} + \psi_{SP''_2} + \psi_{SP'''_2})^2 dr$ を試して、結果を確認してください。

$$E = \int \psi_{SP'_2} \hat{H} \psi_{SP'_2} dr \quad \& \quad \text{昇進エネルギーを求めます}$$

SP'_2
 SP''_2

SP^2 に対応する①として対応する式を得る。

10.3 sp^3 ハイブリダイゼーション

即ち CH_4

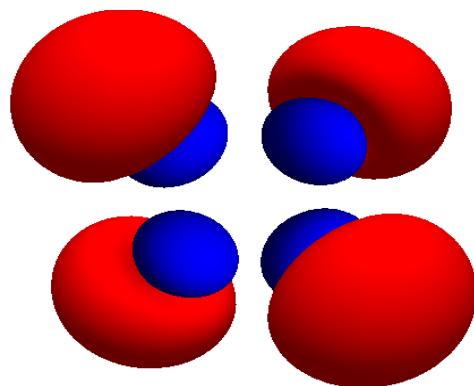


Figure 32: sp^3 ハイブリダイゼーション

$$\begin{cases} \psi_{sp_3}' &= \frac{1}{2} (2s + 2p_x + 2p_y + 2p_z) \\ \psi_{sp_3}'' &= \frac{1}{2} (2s - 2p_x - 2p_y + 2p_z) \\ \psi_{sp_3}''' &= \frac{1}{2} (2s + 2p_x - 2p_y - 2p_z) \\ \psi_{sp_3}'''' &= \frac{1}{2} (2s - 2p_x + 2p_y - 2p_z) \end{cases}$$

HW $\{\psi_{sp^3}\}$ の直交性を確認してください。

実験 7-1 (オプション) sp 、 sp^2 、 sp^3 ハイブリダイゼーション軌道をプロットしてください。