



化学 IA

担当 佐藤 しのぶ

6・9 分子軌道理論

分子は原子のある配置を含み、
ひと組の分子軌道がこれらの核の周りに従う。
分子の電子構造は、
原子軌道に電子を入れるときに用いた
規則に従って、これらの分子軌道に
適当な数の電子を与えることによって得られる。

分子軌道

結合性軌道

二つの波(軌道)が加わる時、その結果出来る分子軌道は、電子密度が二つの核の間に集まっている様な形になる。

→ そのような軌道中の電子は核を寄せ合わせ、分子を安定させる
1s軌道の σ 結合の場合、 σ_{1s} と書く。

反結合性軌道

二つの波(軌道)が打ち消し合うような場合、その結果出来る分子軌道は、電子密度が二つの核の間の外側にあるような形になる。

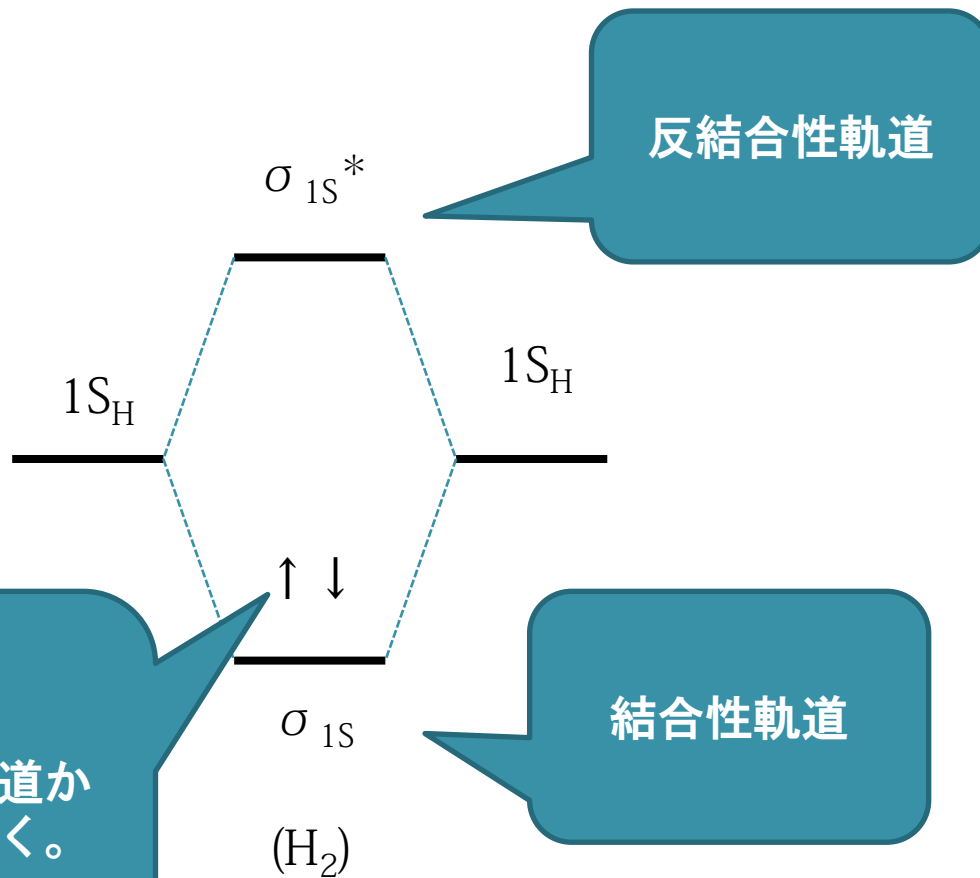
→ そのような軌道中の電子は核を寄せ合わす役には立たない。
1s軌道の σ 結合の場合、 σ_{1s}^* と書く。

原子の軌道の組み合わせ

<黒板で説明：1s軌道の組み合わせ>

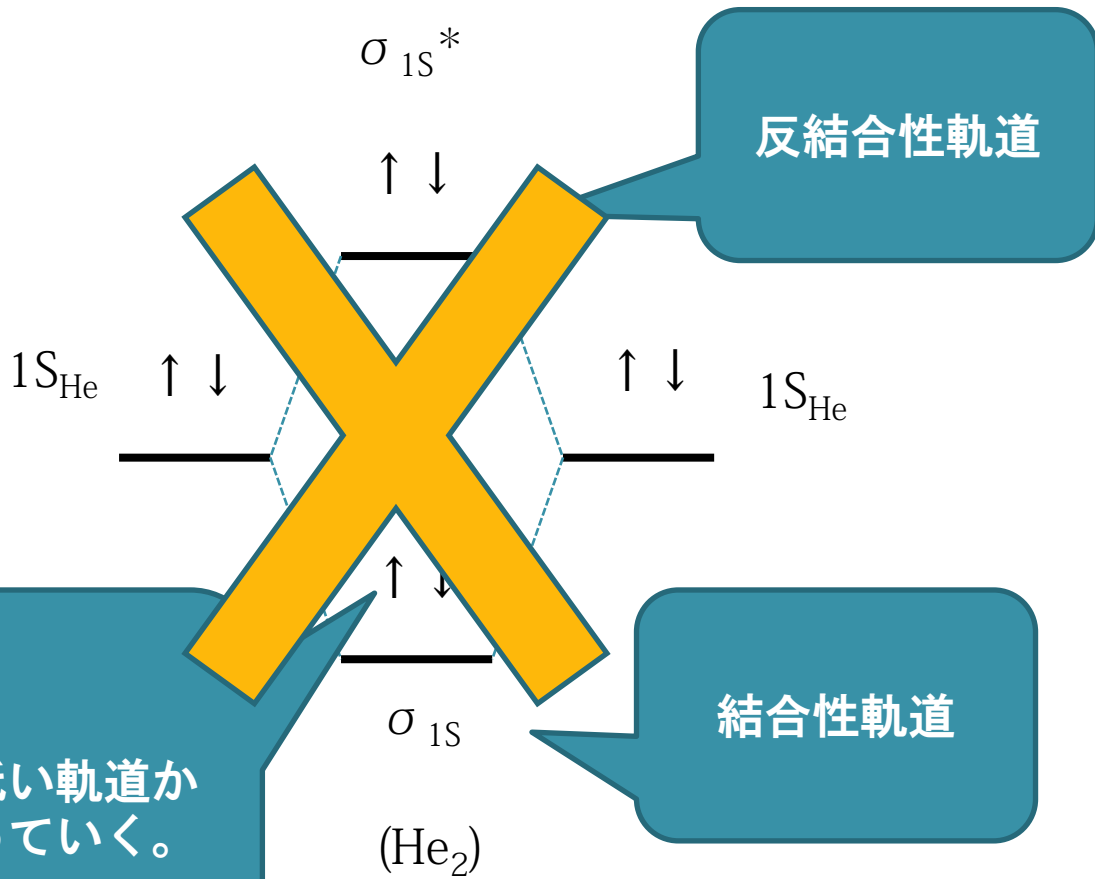
<黒板で説明：p軌道の組み合わせ>

水素分子の分子軌道は??



電子は低い軌道から埋まっていく。

He₂が存在しない理由



電子は低い軌道から埋まっていく。

反結合性の軌道に入った電子と結合性の軌道に入った電子が、互いに打ち消しあう。

全体の結合次数

結合次数を計算すると、存在可能かどうかがわかる。

$$\text{全体の結合次数} = \frac{\text{結合性分子軌道中の電子の数} - \text{反結合性分子軌道中の電子の数}}{2}$$

ゼロの場合、存在できない

問1 二原子分子において、二つの原子の核がp軌道のy軸上にあるとした場合、二原子分子で $n=2$ の原子軌道から形成される分子軌道のエネルギーを図示せよ。(図6・33 aを参考に。)

<黒板で説明>

問2 二つの原子の核がp軌道のy軸上にあるとした場合、N₂の分子軌道の電子配置を図示せよ。

<黒板で説明>

期末試験

試験日：8/4 木曜日 |限

範囲：ブラディ 一般化学(上) 5章・6章

※5, 6章に関連した3, 4章の内容も含む。

電卓持ち込み可。

持参しない場合の不利益は考慮しません。

<九州工業大学 竹中研究室>で検索

研究グループ>佐藤しのぶ (Shinobu Sato)で以下のページを確認しておくこと。

<http://takenaka.che.kyutech.ac.jp/2015/member/sato.html>