

XXXV 分子の電子状態

【LCAO (linear combination of atomic orbital) MO法】

$$\phi(n) = c_{n1} \chi_1(n) + c_{n2} \chi_2(n) \quad (3.5.1)$$

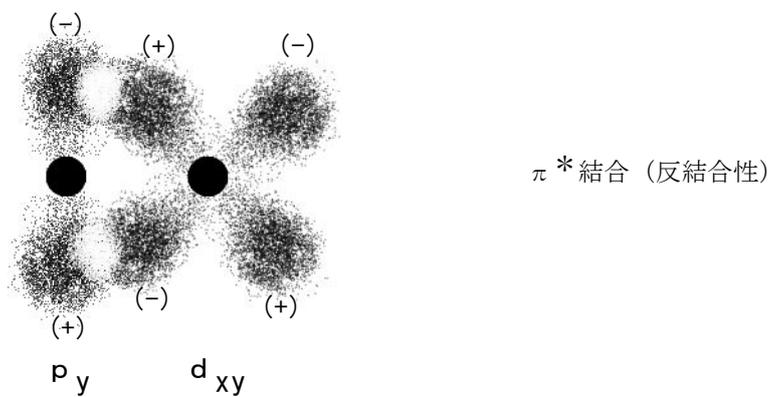
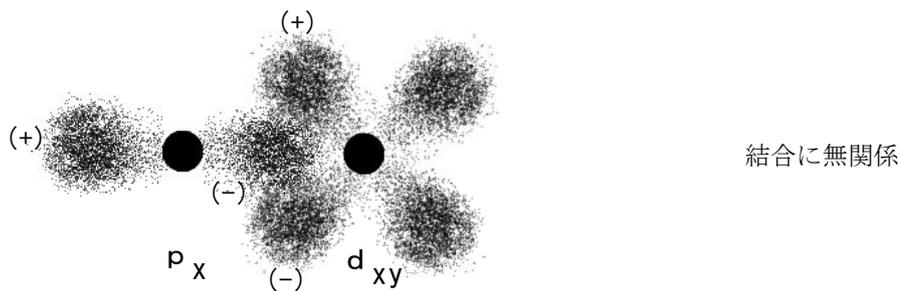
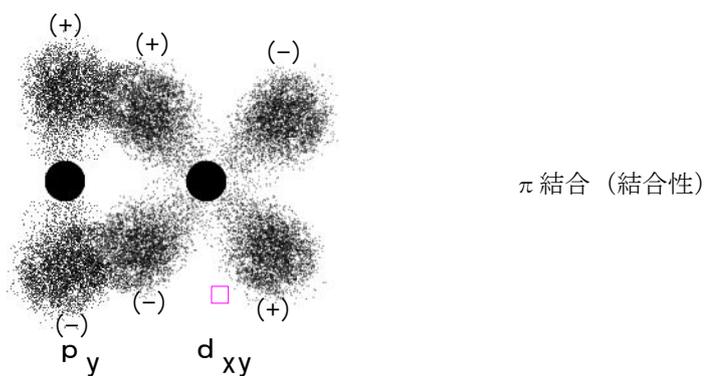
$\chi_i(n)$: n 番目の分子波動関数を表すために選ばれた i 番目の原子の波動関数

$$\mathbf{h} \phi(n) = \epsilon \phi(n) \quad (3.5.2)$$

\mathbf{h} : 1 電子(1 個の電子についての)Hamiltonian

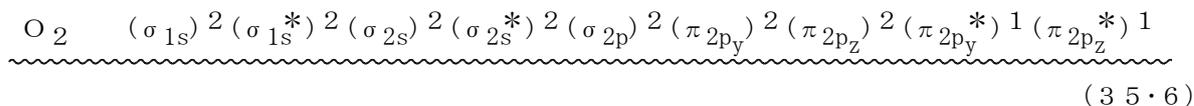
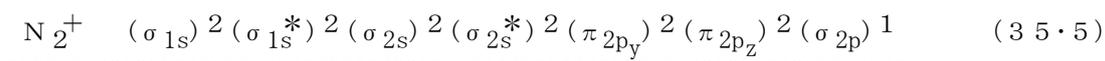
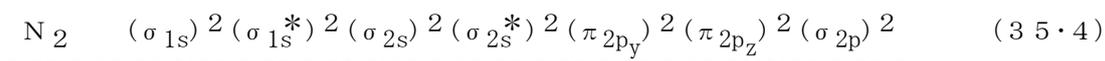
$$\epsilon = \frac{\int \phi(n) \mathbf{h} \phi(n) d\tau}{\int (\phi(n))^2 d\tau} \quad (3.5.3)$$

[結合性と半結合性のMO]



σ , σ*
 π , π*
 δ , δ*

[二原子分子のMO]



[問35・1] フッ素のMOのエネルギー順序は、酸素と同じである。F₂、F₂⁻ および F₂⁺ のMOを描け。

【混成軌道関数】

[s p³ 混成軌道]

$$\phi_1 = \frac{1}{2} \chi_{2s} + \frac{\sqrt{3}}{2} \chi_{2p_x} \quad (35.7)$$

$$\phi_2 = \frac{1}{2} \chi_{2s} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \chi_{2p_x} + \sqrt{\frac{2}{3}} \chi_{2p_z} \quad (35.8)$$

$$\phi_3 = \frac{1}{2} \chi_{2s} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \chi_{2p_x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{2p_y} - \frac{1}{\sqrt{6}} \chi_{2p_z} \quad (35.9)$$

$$\phi_4 = \frac{1}{2} \chi_{2s} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \chi_{2p_x} - \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{2p_y} - \frac{1}{\sqrt{6}} \chi_{2p_z} \quad (35.10)$$

[s p² 混成軌道]

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \chi_{2s} + \sqrt{\frac{2}{3}} \chi_{2p_x} \quad (35.11)$$

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \chi_{2s} - \frac{1}{\sqrt{6}} \chi_{2p_x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{2p_y} \quad (35.12)$$

$$\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \chi_{2s} - \frac{1}{\sqrt{6}} \chi_{2p_x} - \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{2p_y} \quad (35.13)$$

[s p 混成軌道]

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{2s} + \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{2p_x} \quad (35.14)$$

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{2s} - \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{2p_x} \quad (35.15)$$

[問35・2] それぞれの混成軌道関数の概形を描け。