

ちがうもの同士 (同軌道でもエネルギーが異なってくる)

### 4.8. 異核二原子分子

分子軌道

足し合わせ

不安定化する

安定化する

分子軌道生成しない

分子軌道生成する

軌道の重なりが大きいとき分子軌道ができる

エネルギーの近い軌道が重なって分子軌道ができる!

図 4.8 軌道間相互作用による軌道の混合

大野公一 量子物理化学

### 4.8. 異核二原子分子

異核2原子分子の軌道生成 2

b. 分子軌道 ができる条件

軌道の重なりが大きいとき分子軌道ができる

エネルギーの近い軌道が重なって分子軌道ができる!

図の出典: <http://rikanel2.jst.go.jp/>

### 4.8. 異核二原子分子

異核2原子分子の軌道生成 1

a. 軌道生成と分極

フッ化水素(HF)、水素化リチウム(LiH)などの異核2原子分子では2つの原子で電子をひきつける力(電気陰性度)が違うため、電子雲はどちらかの原子に偏っている。このような結合を極性があるという。このような現象を分極という。

等核2原子分子: 電子雲は対称

異核2原子分子: 電子雲は非対称(分極)

図の出典: <http://rikanel2.jst.go.jp/>

HFならフッ素寄り  
 $H^{\delta+} F^{\delta-}$   
 分極 という

### 4.8. 異核二原子分子

異核2原子分子の軌道と電子密度 1

a. 水素化リチウム(LiH)

1sと2sで相互作用

電子密度分布

分極

電子はLiからHに流れ、Hの周りに多く集まっている

図の出典: <http://rikanel2.jst.go.jp/>

結合次数

### 4.8. 異核二原子分子

異核2原子分子の軌道と電子密度 2

b. フッ化水素(HF)

電子密度分布

分極

LiHとは逆に電子はHからFに流れ、Fの周りに多く集まっている

軌道の名称

$\sigma$  軌道グループあるいは  $\pi$  軌道グループの中で単にエネルギーの低い順番に番号をつける。

図の出典: <http://rikanel2.jst.go.jp/>

### 4.8. 異核二原子分子

CO分子の光電子スペクトル

$N_2$ と等電子的 (結合次数は3)

図 9-17 COの光電子スペクトル。様々な分子オービルのエネルギーが確認できる。1sおよび5σのオービルのエネルギーはほとんど等しい。また、2πと2σ\*のエネルギーも近い。その電子のイオン化エネルギーが比較的大きいことは、電子が軌道に充填されていて結合に関与していないことを示す。

マッカーリ・サイモン 物理化学