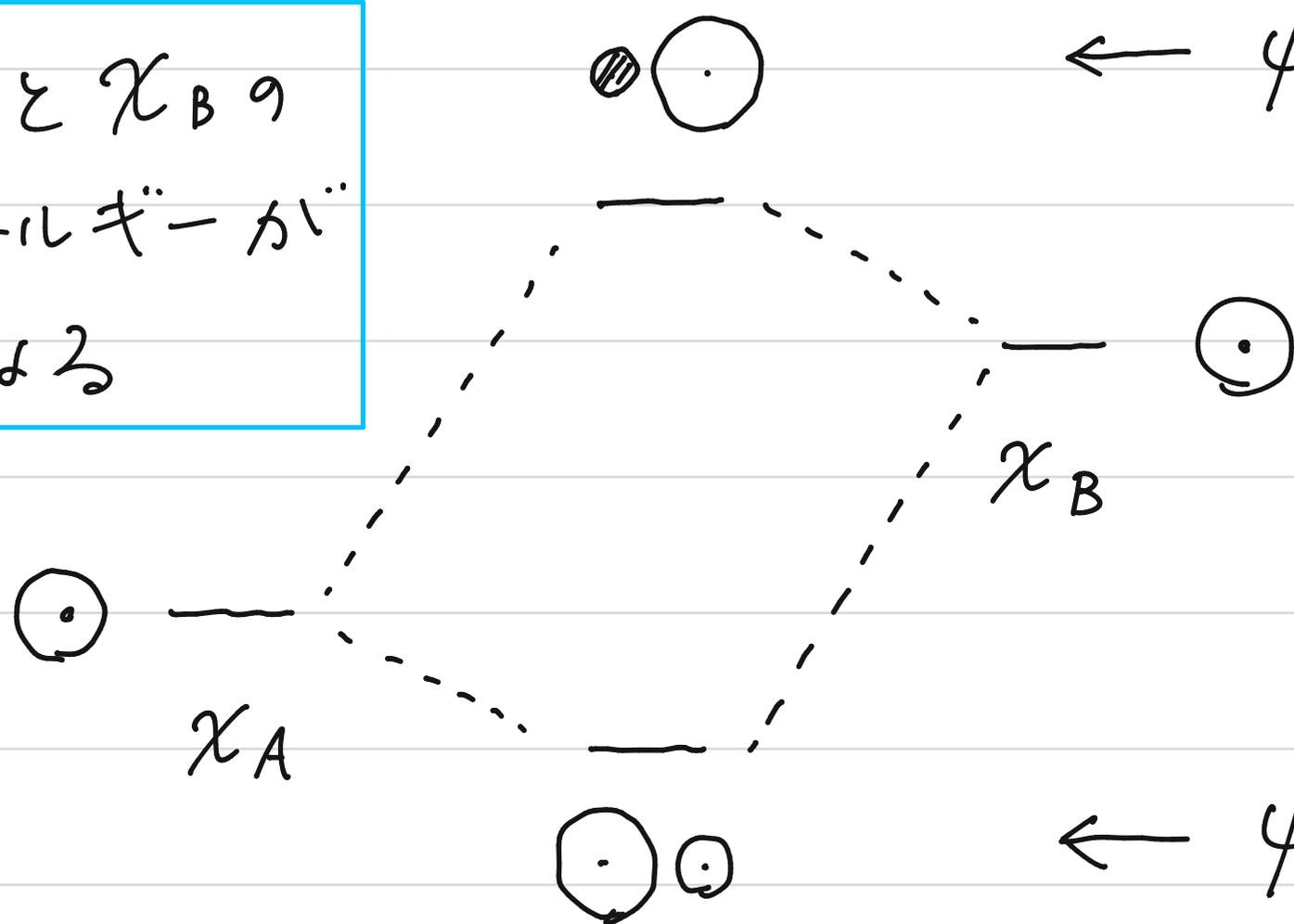


# 化学基礎論 D

## 第7回

# (4) 異核 2原子分子

$\chi_A$  と  $\chi_B$  の  
エネルギーが  
異なる



$$\leftarrow \psi_- = C_- (\chi_B - \lambda \chi_A)$$

$\hbar$

$$C_{\pm} = 1 / \sqrt{1 + \lambda^2}$$

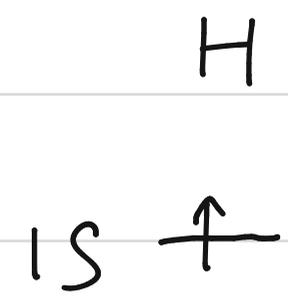
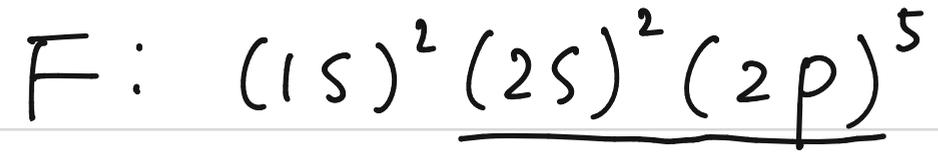
$(0 < \lambda < 1)$

$$\leftarrow \psi_+ = C_+ (\chi_A + \lambda \chi_B)$$

$\hbar$

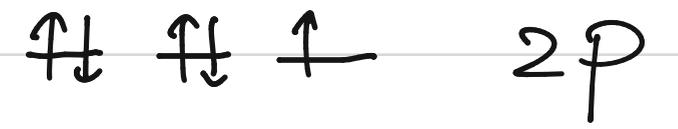
$\chi_A$  と  $\chi_B$  の寄与に偏りが生じる

◦ HF の場合



F

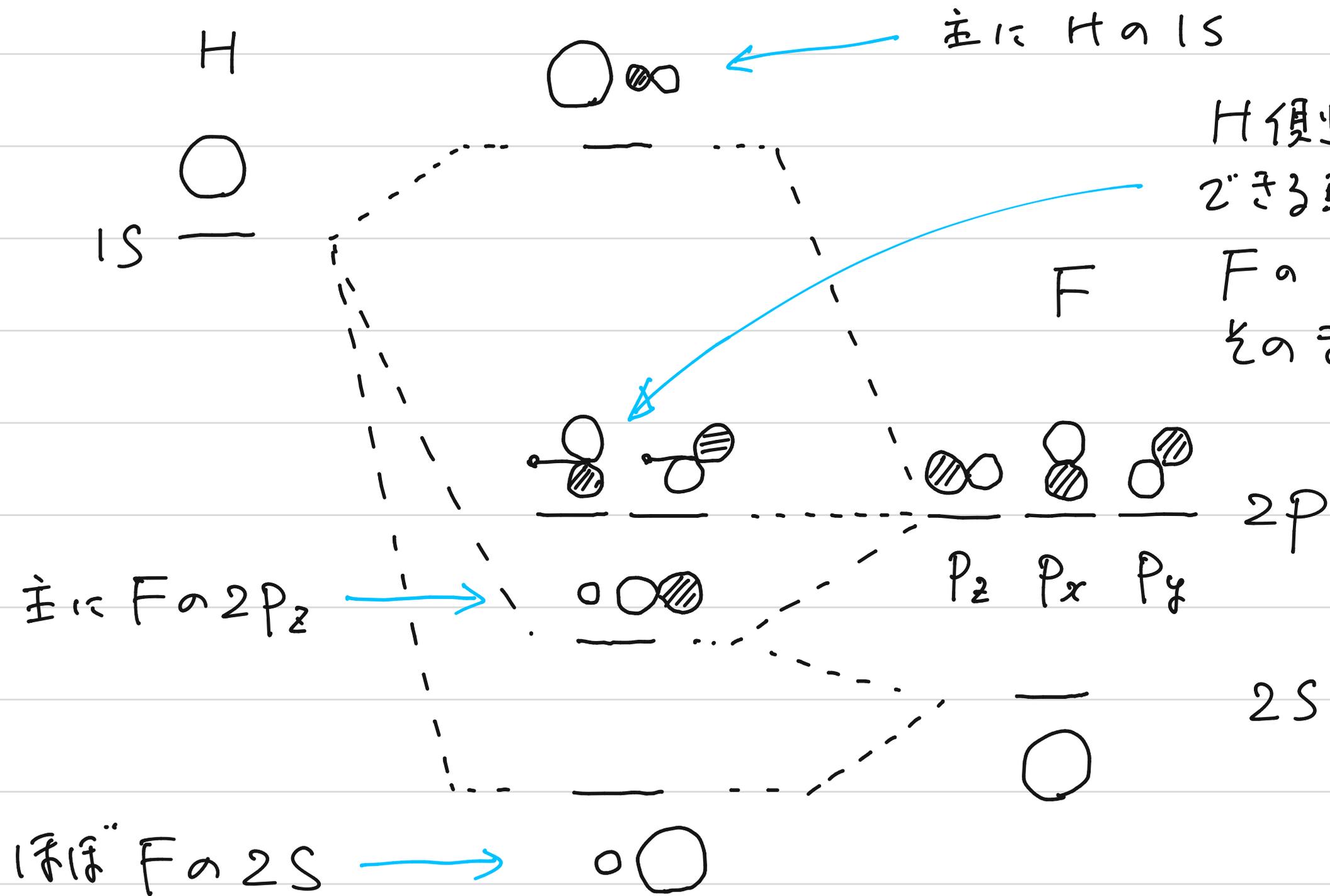
価電子 8 個



⋮

と2も深いの2”  
結合に使われ  
ない





H側にも相互作用  
できる軌道がないの2"  
Fの  $2p_x$  と  $2p_y$  が  
このまま MO になる

# HFのMO

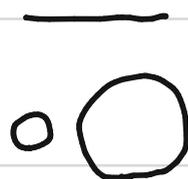
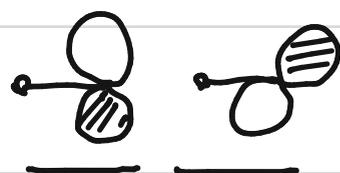


主にF上にあるMOに  
すべての価電子が入る

価電子

8個が

入る



HFの極性の説明

$\delta+$   $\delta-$

H-F

• CO の場合

2p — — —

2s —

C

— — — 2p

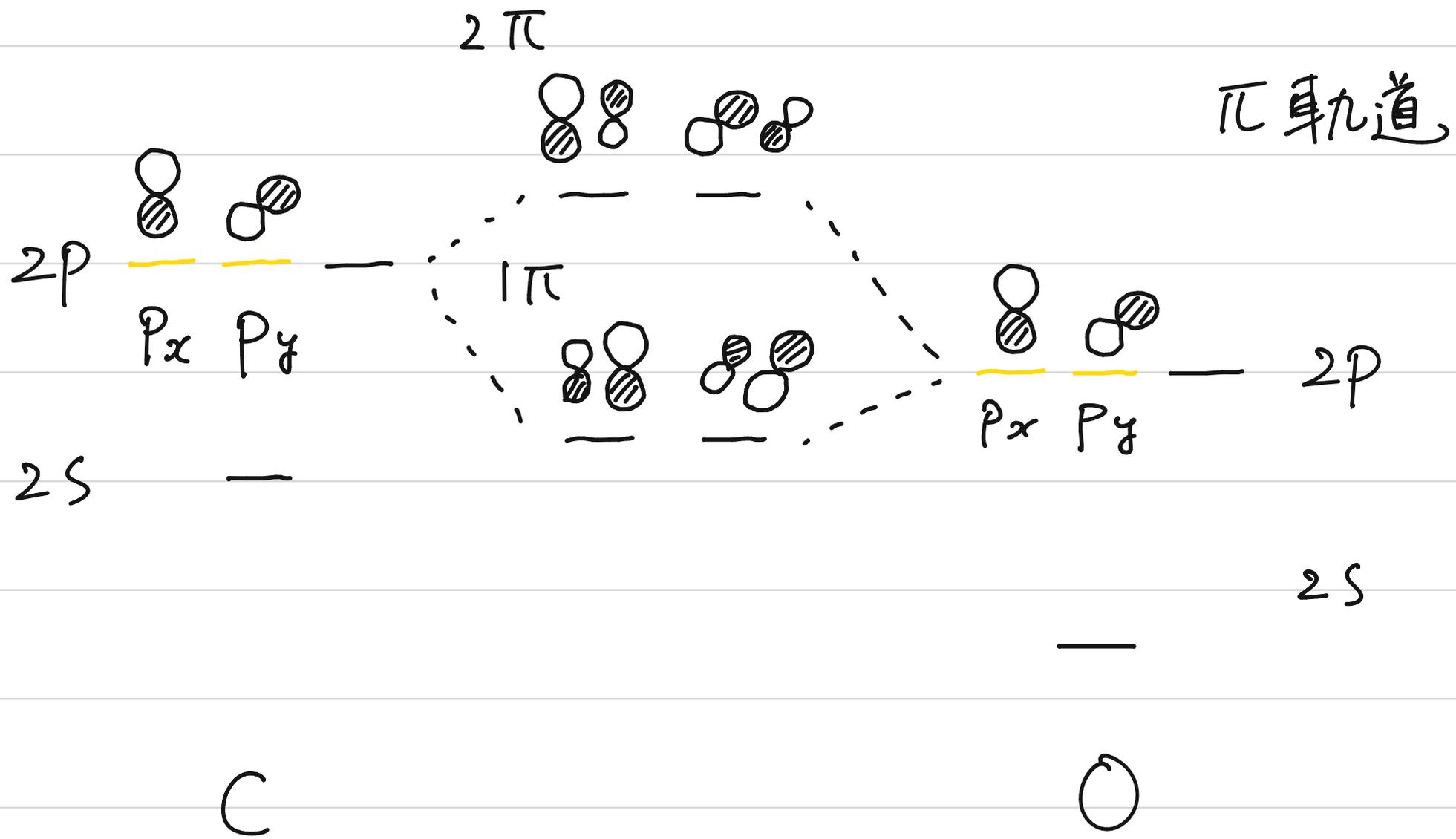
2s

—

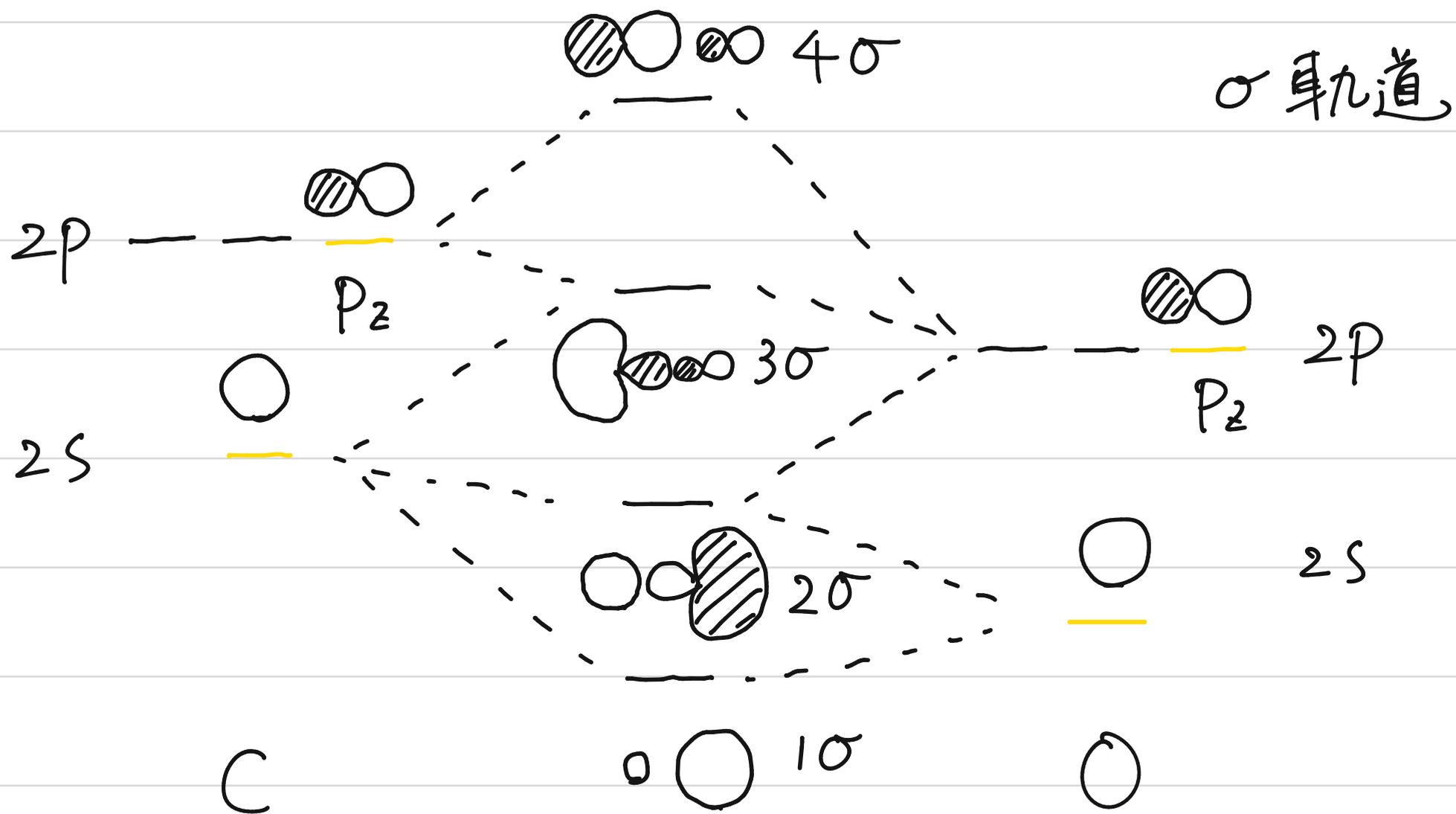
O

全体に原子軌道の  
エネルギーが低い

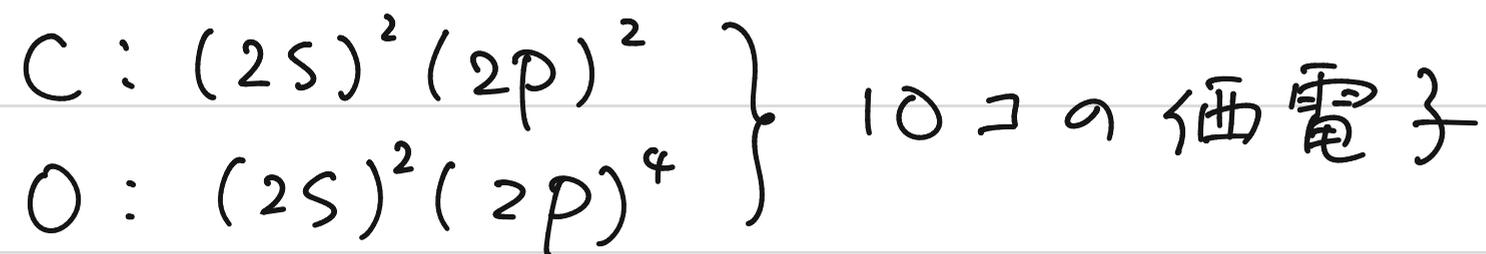
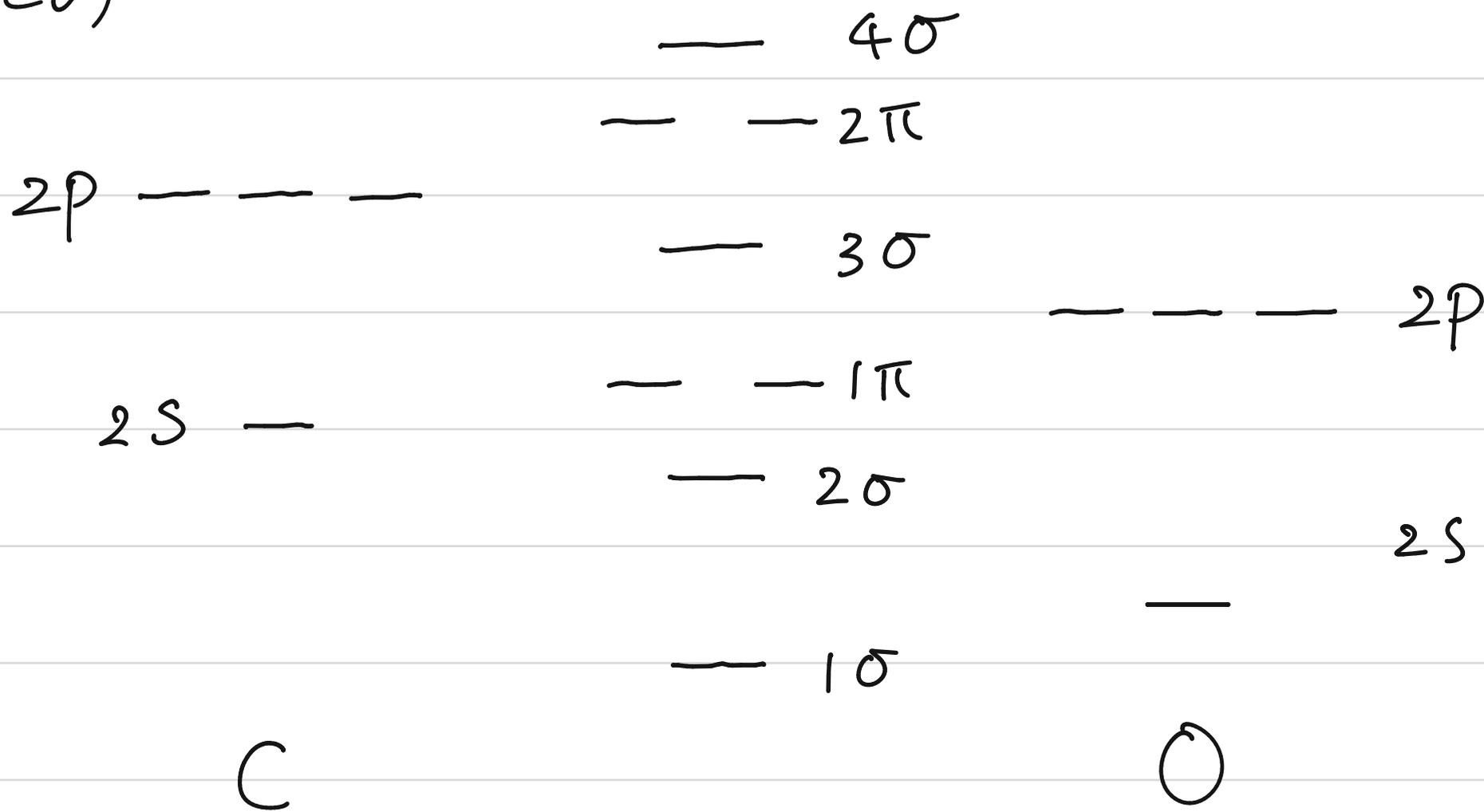




修正後



まとめ

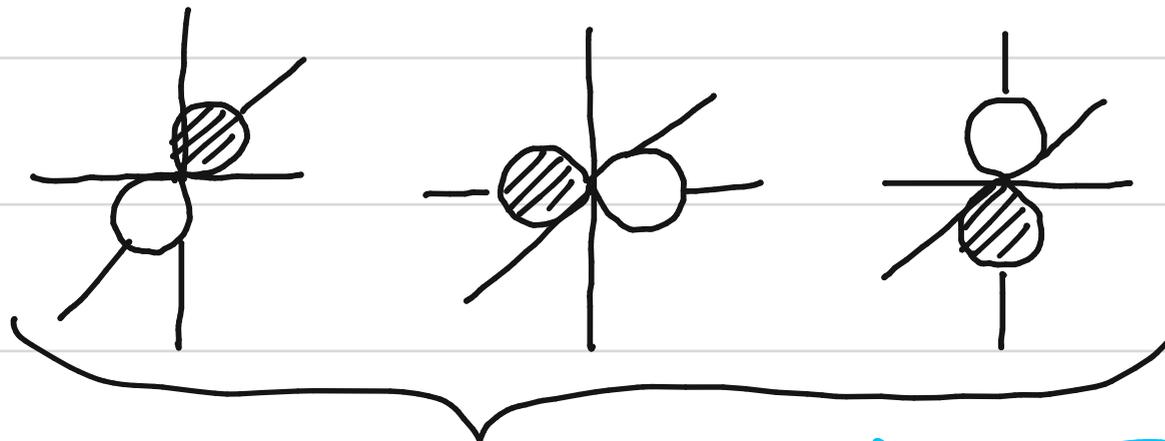
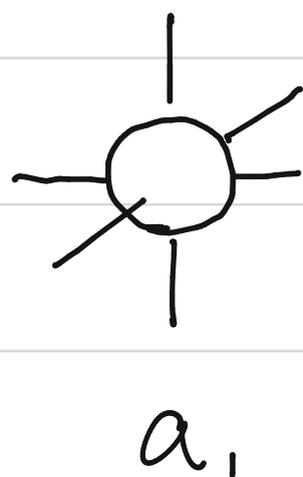
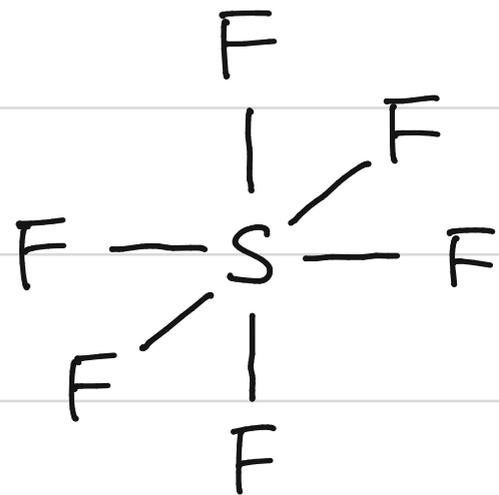


(5) 多原子分子

◦ SF<sub>6</sub>

MO 形成に関する AO

◦ S の価電子が入る軌道

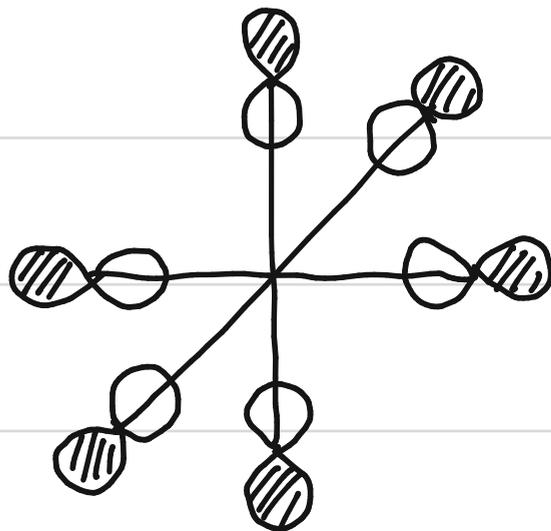


この3つは回転により互いに変換しあう

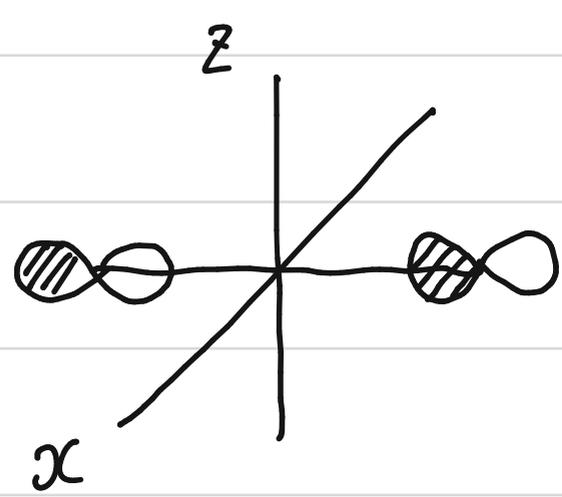
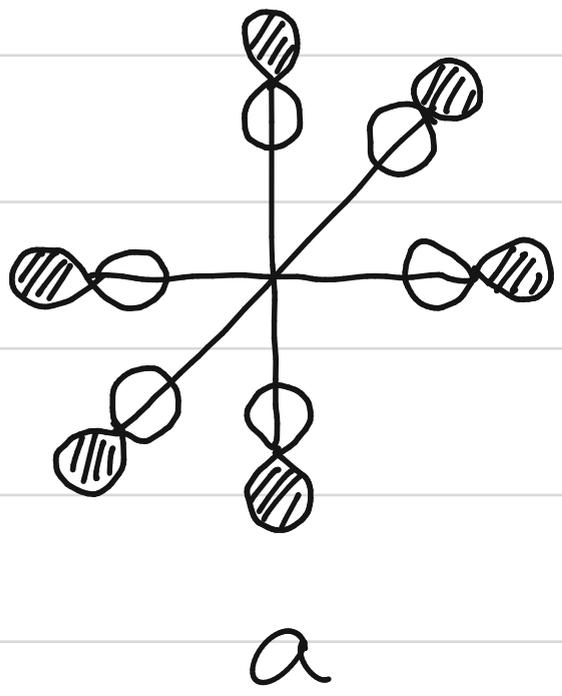
Oh 点群

t = 「三重縮重」を表す

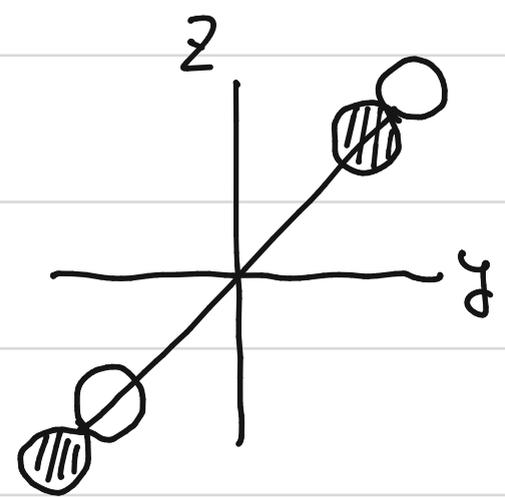
◦ F の S の方に向いた 6 個の p 軌道



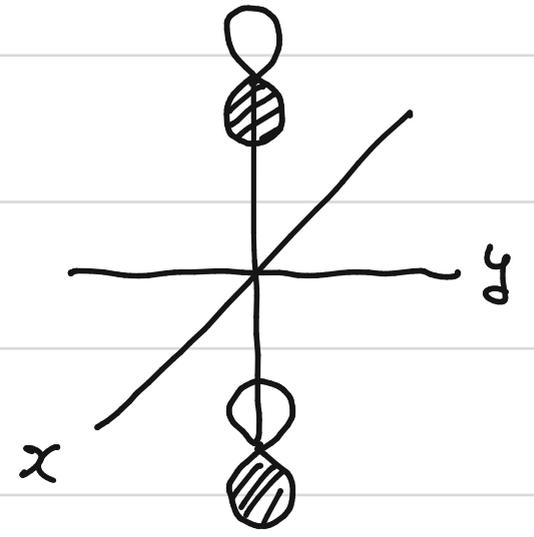
Fの6個のp軌道からできる対称性を満たした組み合わせは



xz面に節



yz面に節



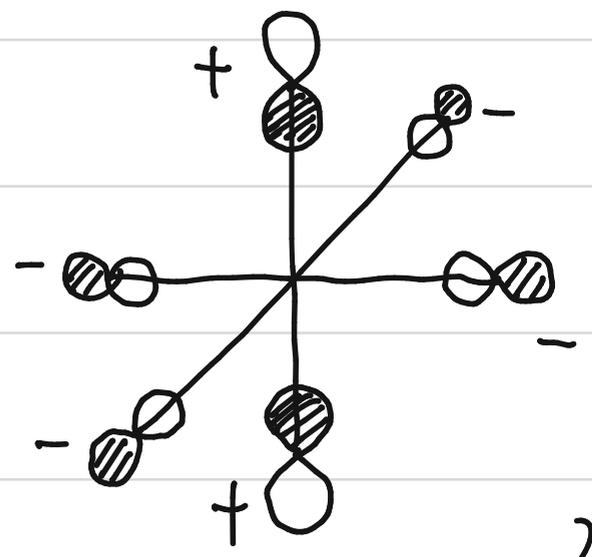
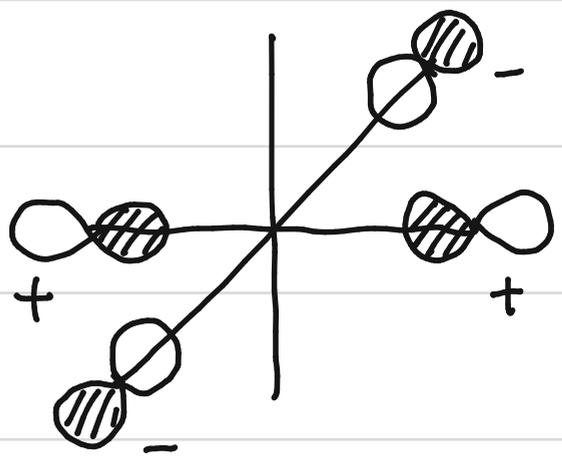
xy面に節



$\tau_1$

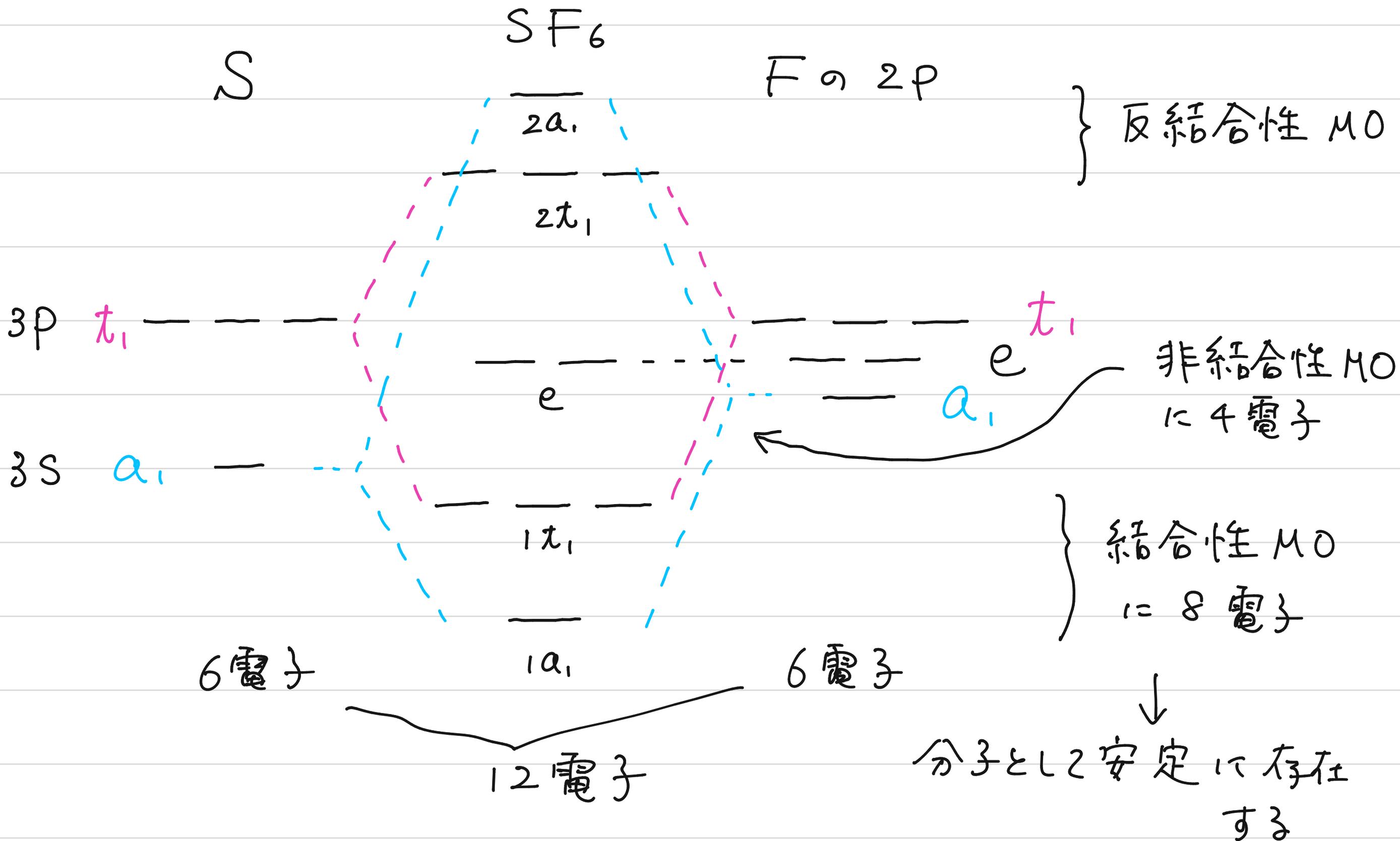
この3つは回転により互いに交換しあう

「三重縮重」

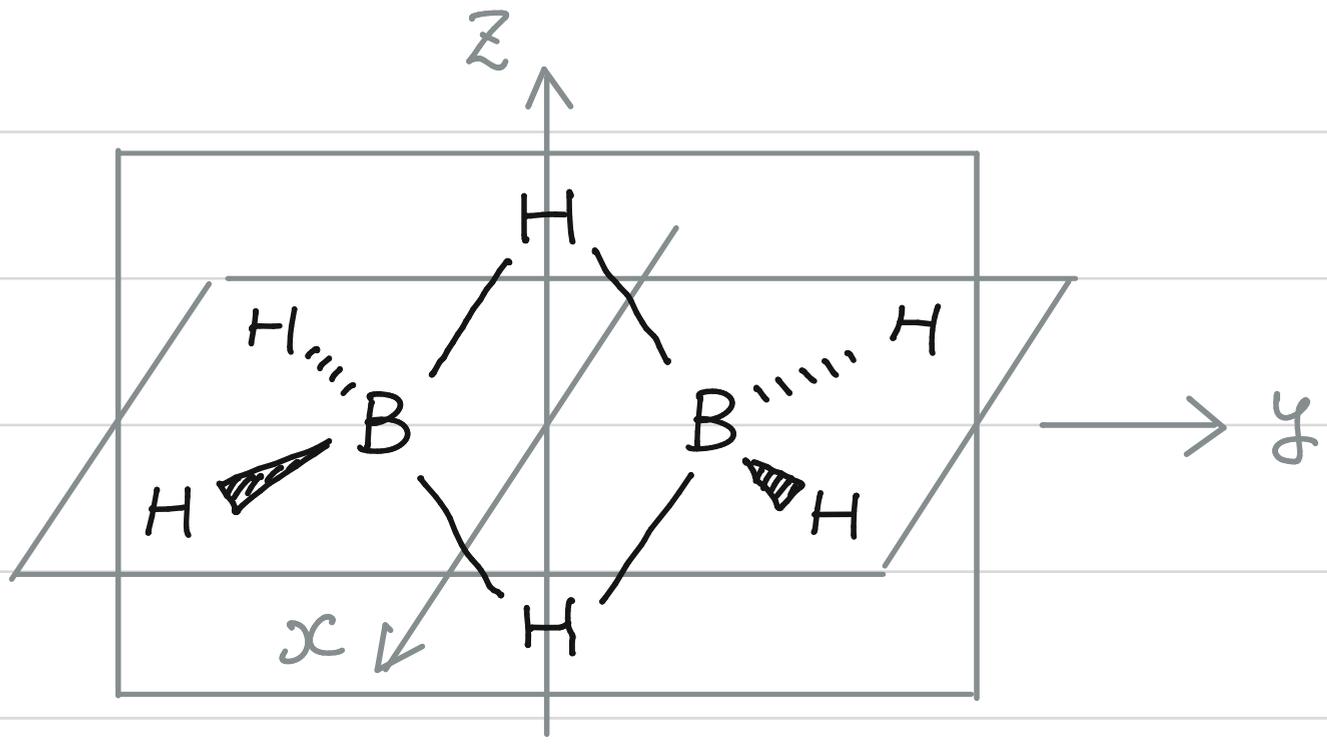


e

この2つの回転によって得られた関数2元の2つの関数の線形結合で表される.

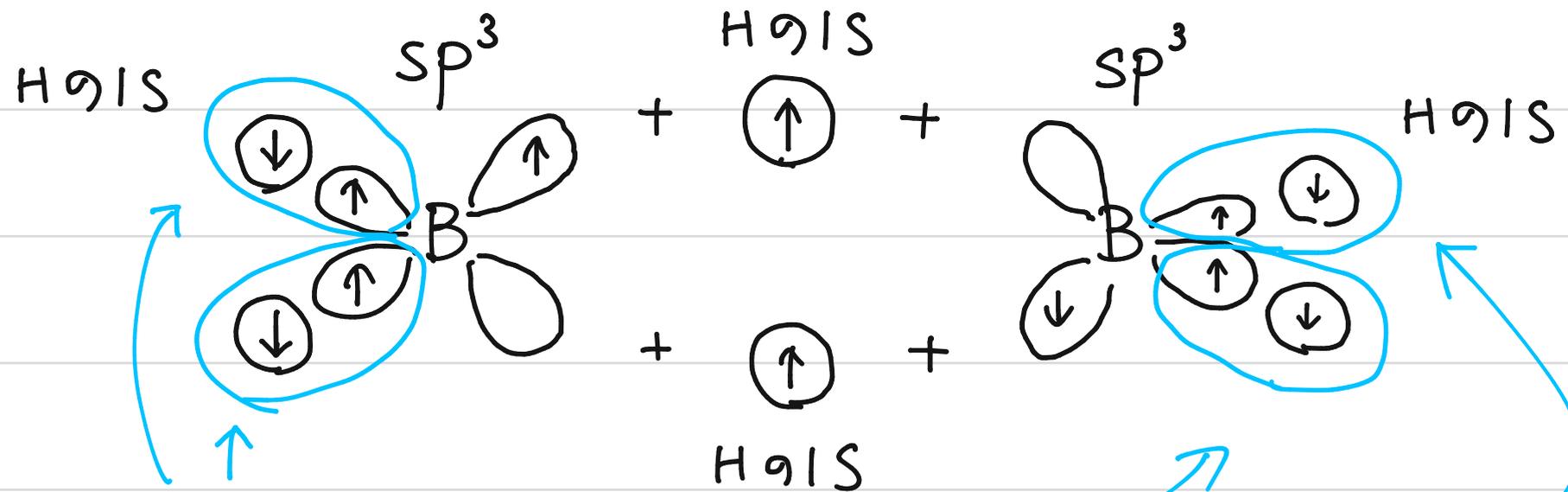
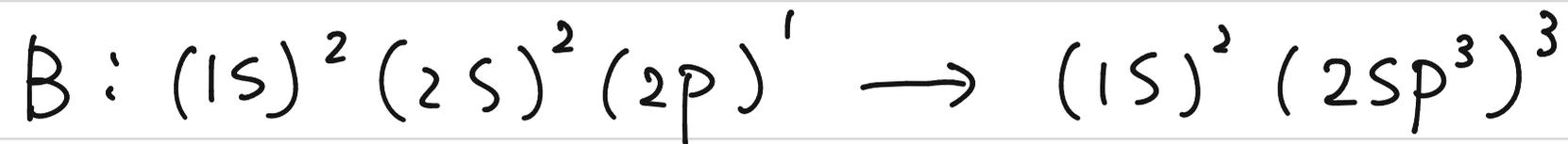


◦  $B_2H_6$  ジボラン

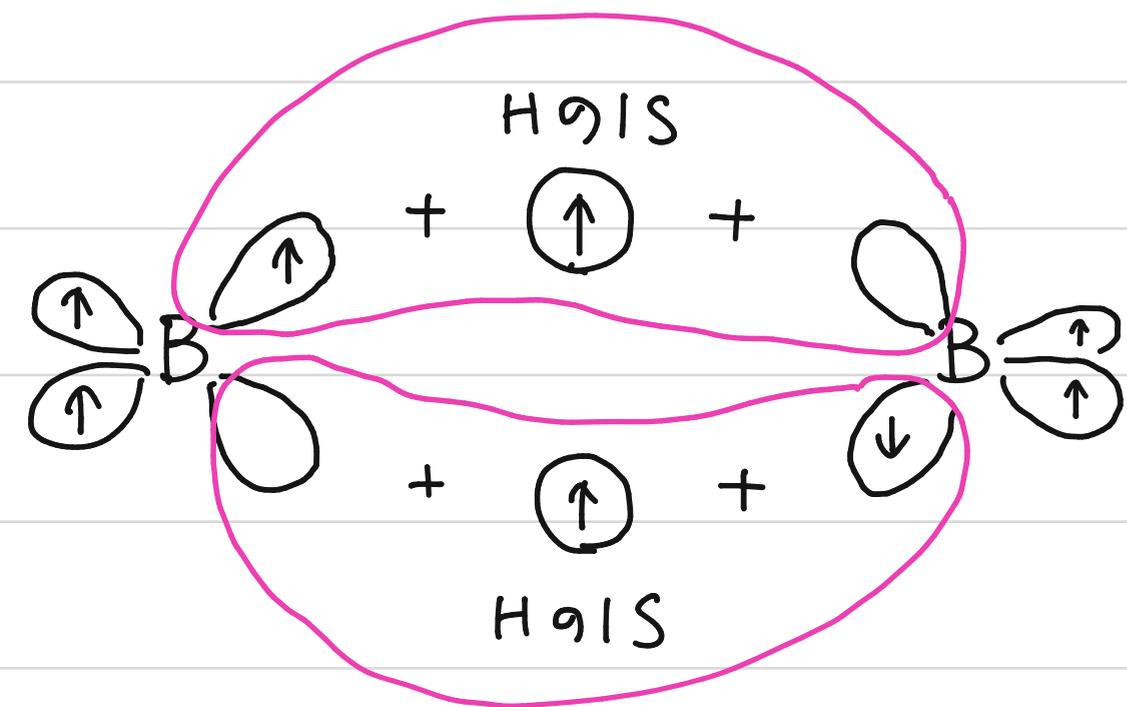


一部をMO法) で扱うこともある  
残りをVB法

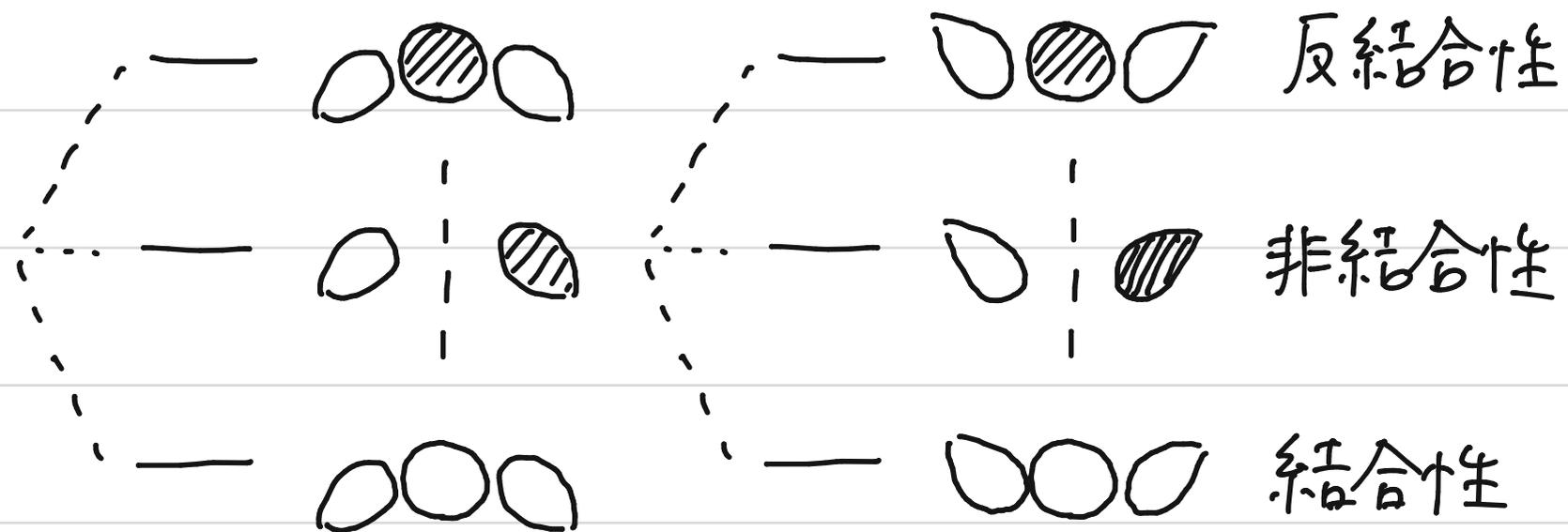
B → sp<sup>3</sup> 混成 (2...) と考える



ここはVB法で  
考える



この2ヶ所は  
MO法で考えろ



2電子

2電子

「三中心二電子結合」 (3c, 2e)

「電子不足化合物」

## 宿題

1 教科書 145 ~ 147 ページを読む

2 復習問題 4.10B, 4.11B

を解き, CLE から提出せよ.

# 次回 期末テスト

範囲 講義 第1回～第7回 あよび  
教科書 第3章と第4章.

教科書中の「例題」と「復習問題」と  
良く復習してください.