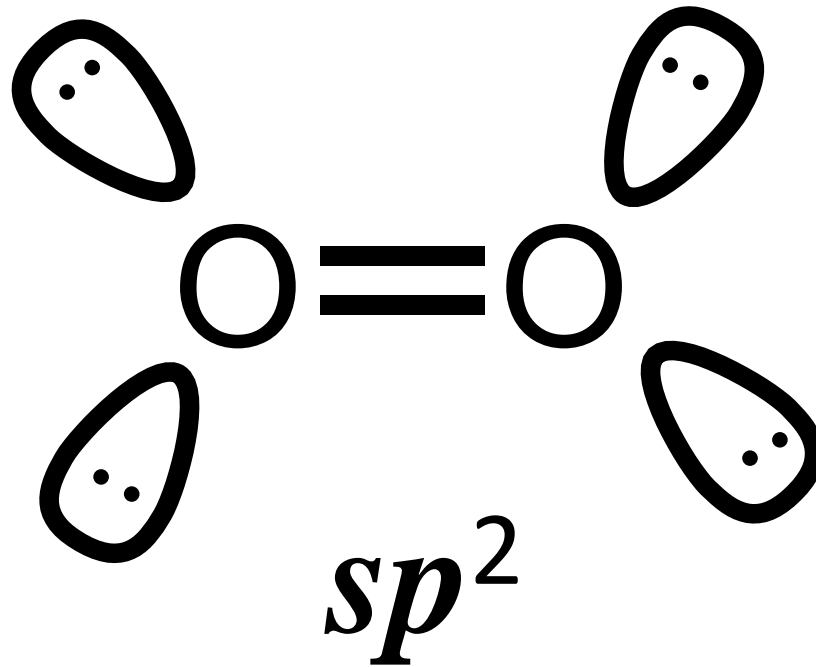


# 分子軌道理論

## Molecular orbital theory

テキストp.62~





## 原子価 結合法

- 電子が一つずつ入った原子軌道が互いに重なり合うことで結合が形成される、という考え方

原子価結合法

テキストp.57

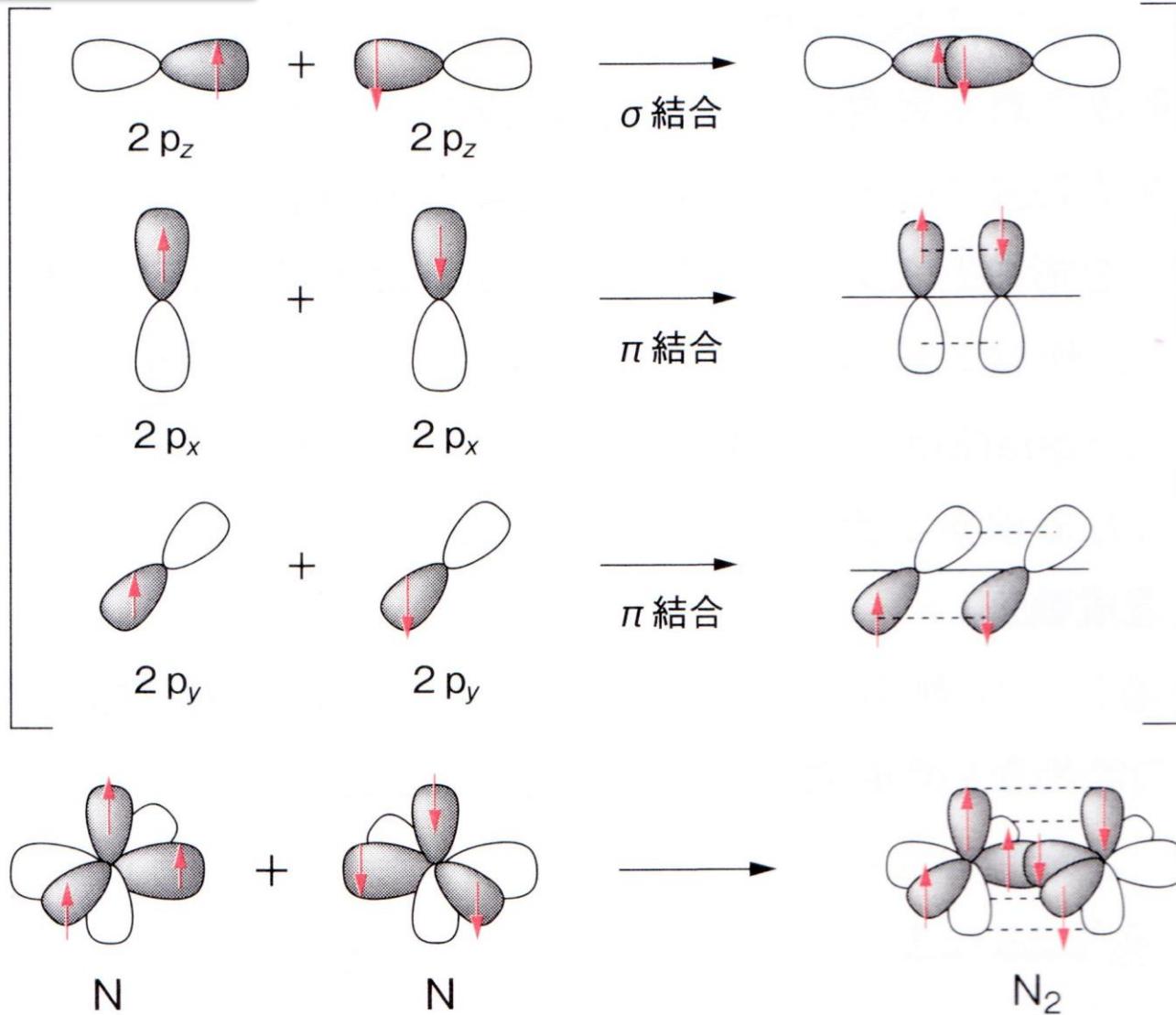


図 3.27

$N_2$  分子の形成と原子価結合法による軌道図

# CH<sub>4</sub> メタン 多原子分子

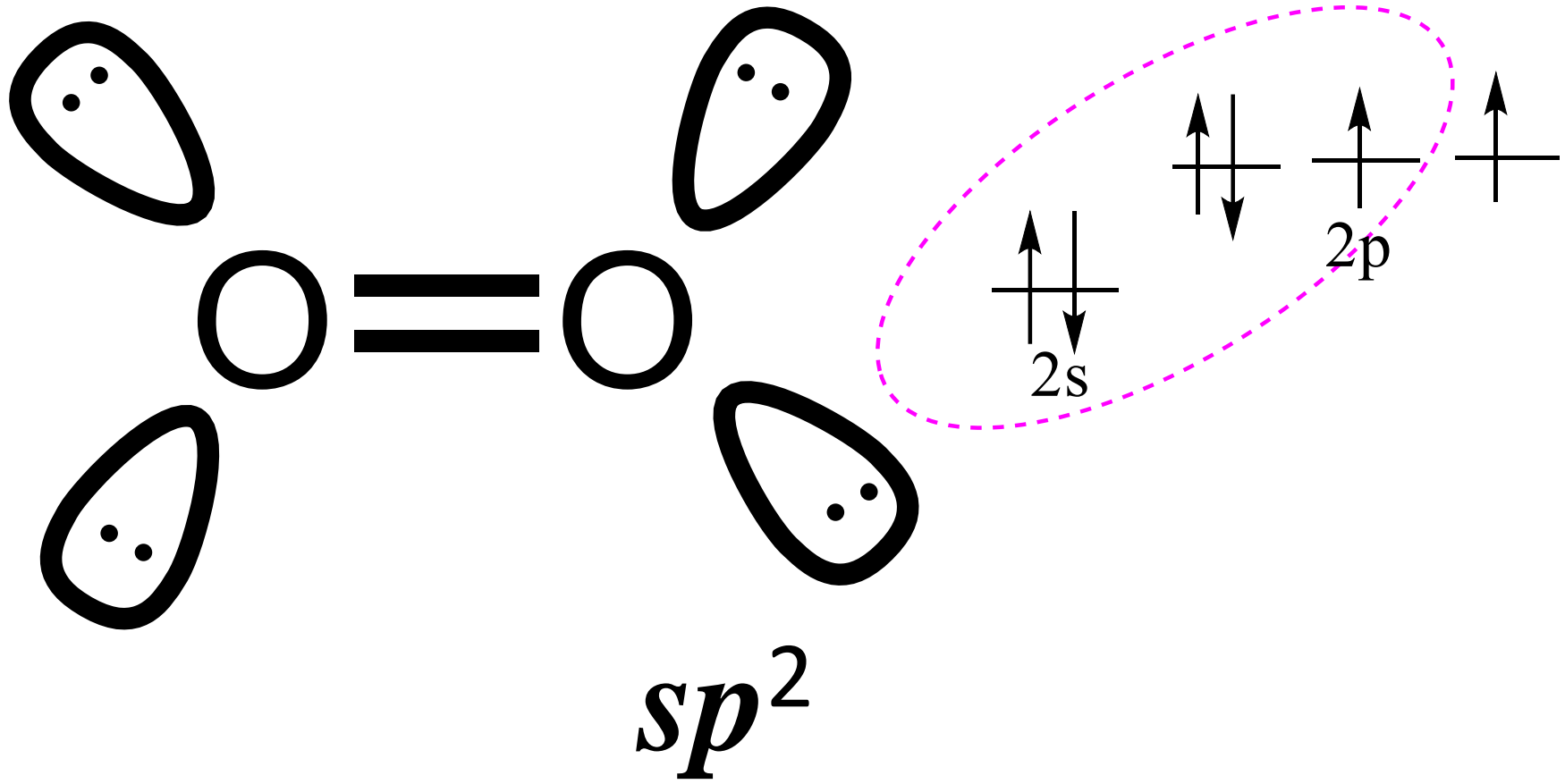
## 原子価 結合法

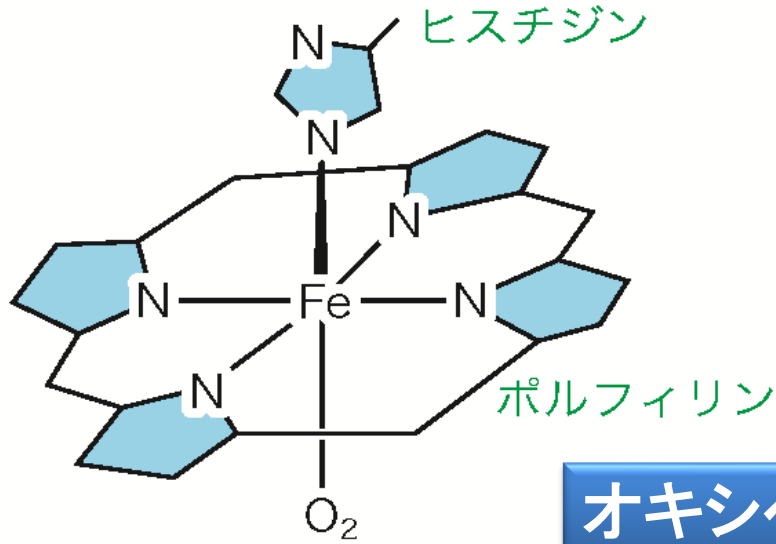
- 電子が一つずつ入った原子軌道が互いに重なり合うことで結合が形成される、という考え方

## 混成 軌道

- 原子軌道を混成させ、新たな等価な軌道を形成する、という考え方

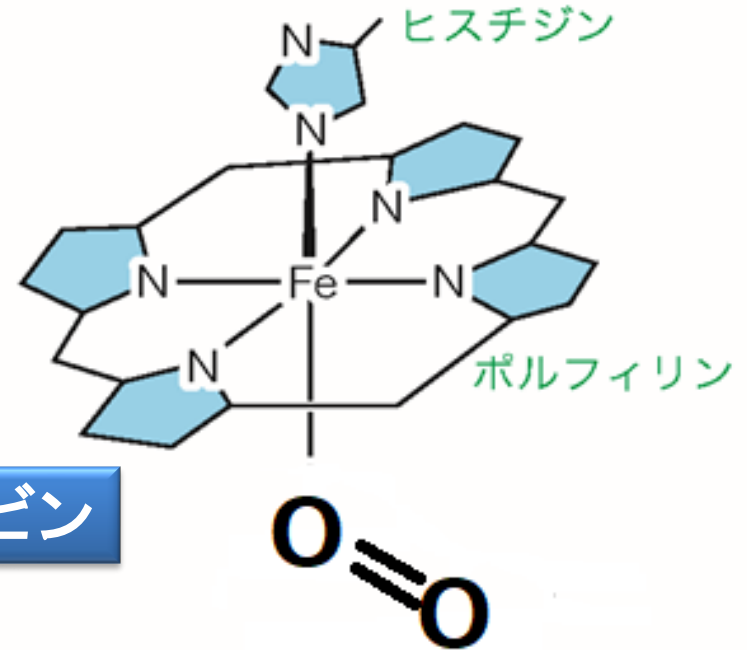
# 混成軌道





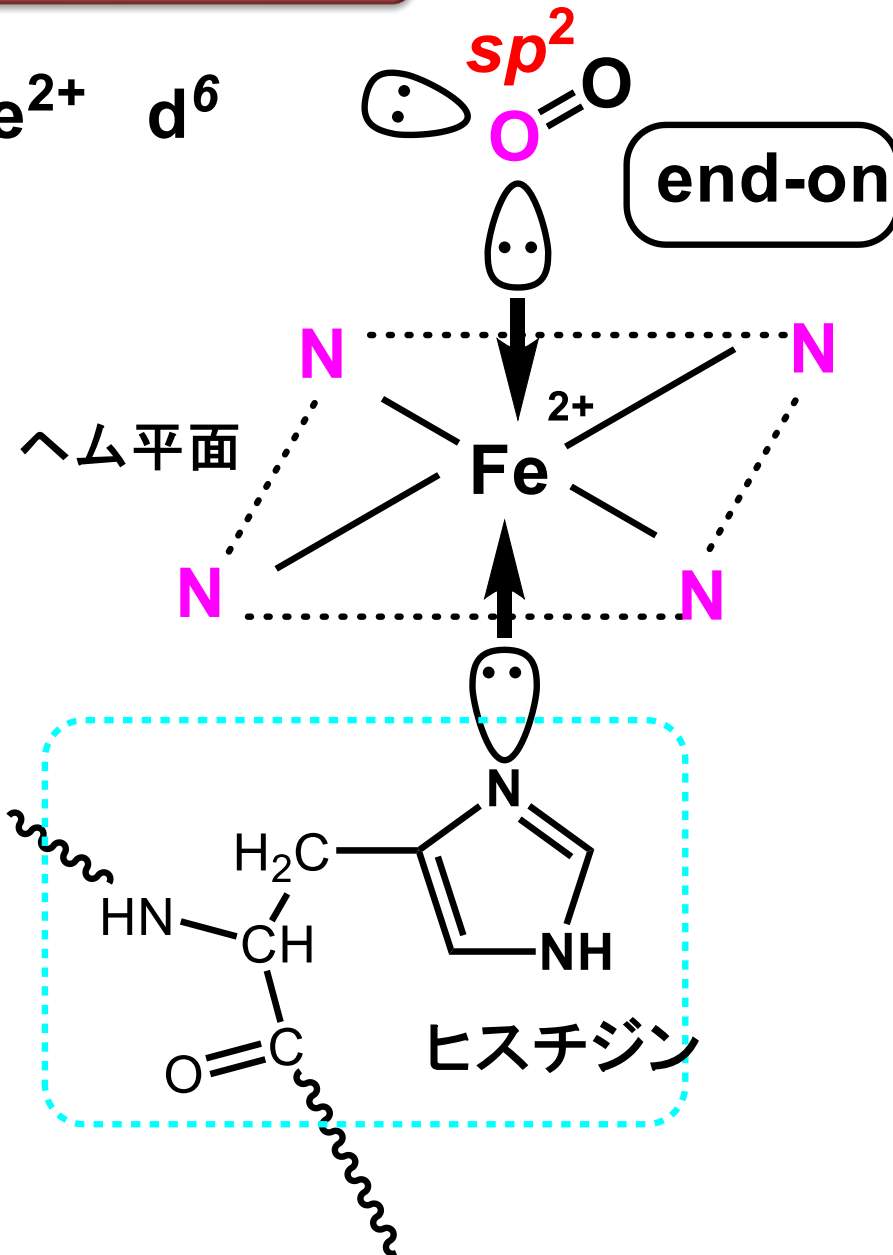
**オキシヘモグロビン**

ヘムの構造

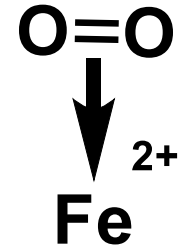


# オキシヘモグロビン

$\text{Fe}^{2+}$   $d^6$

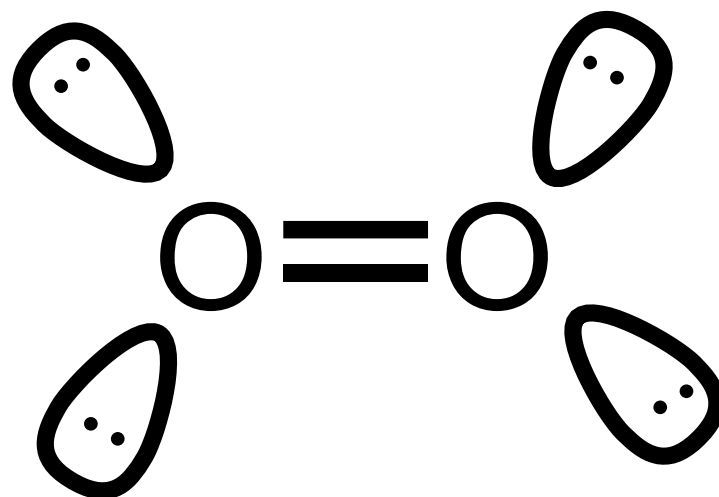


side-on



# 分子軌道理論

## Molecular orbital theory



テキストp.62~

反応性高い → ビラジカル(biradical)  
 常磁性 → (不対電子が存在)



## 原子価 結合法

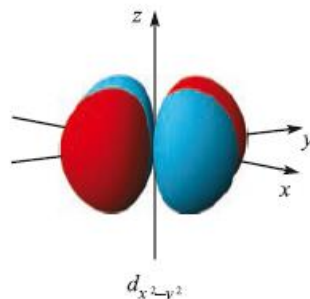
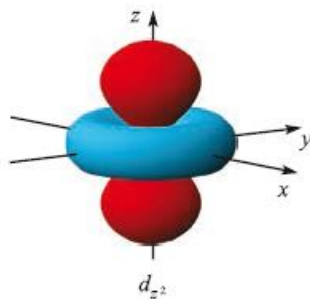
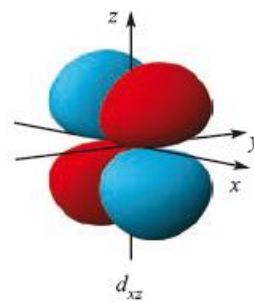
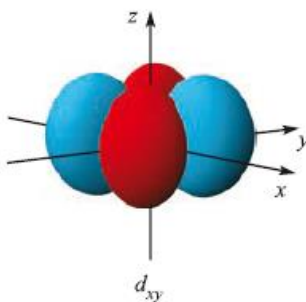
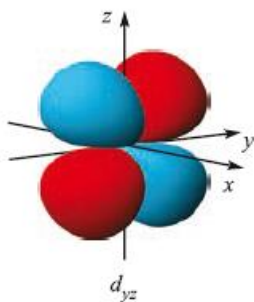
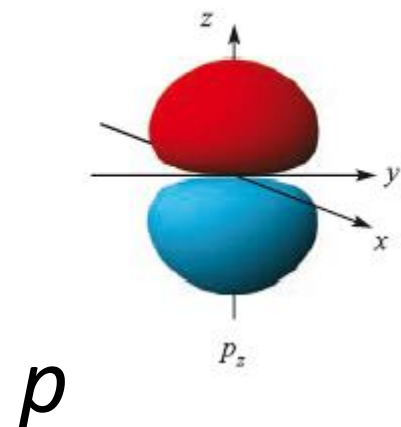
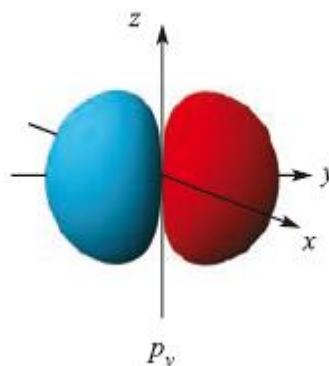
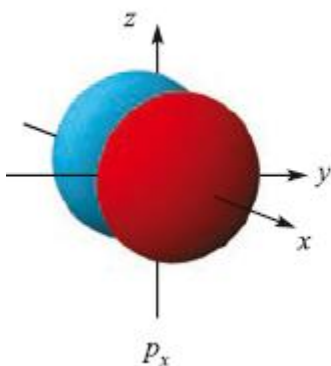
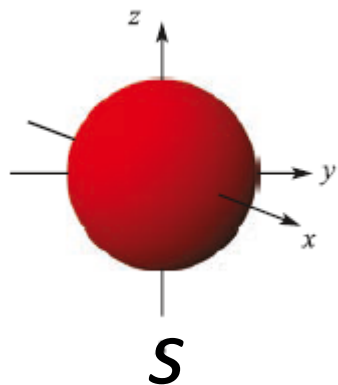
- 電子が一つずつ入った原子軌道が互いに重なり合うことで結合が形成される、という考え方

## 分子軌 道法

- 分子全体に広がった“分子軌道”に電子が配置される、という考え方

# 位相

+, - に絶対的な意味はない



$d$

# 原子軌道間の相互作用



## 分子軌道

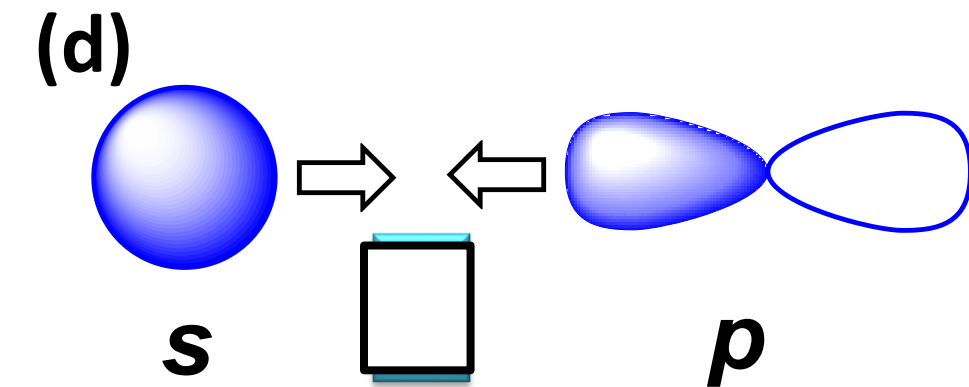
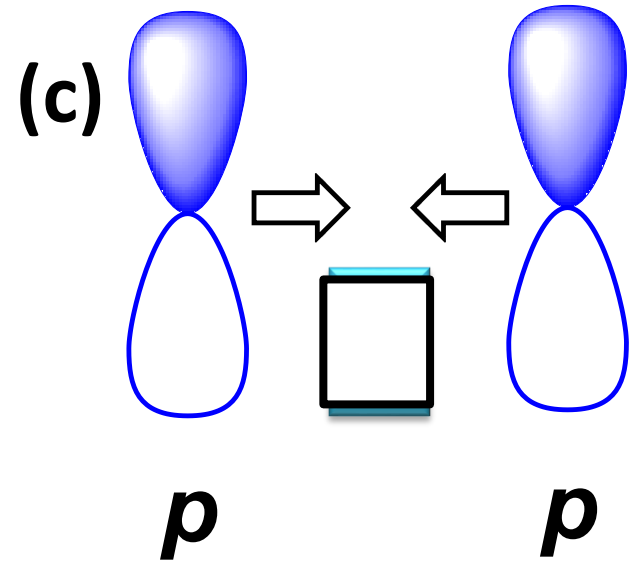
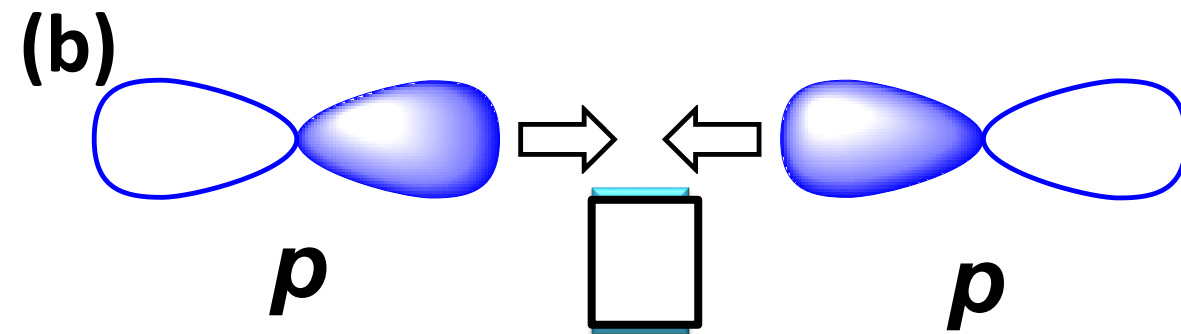
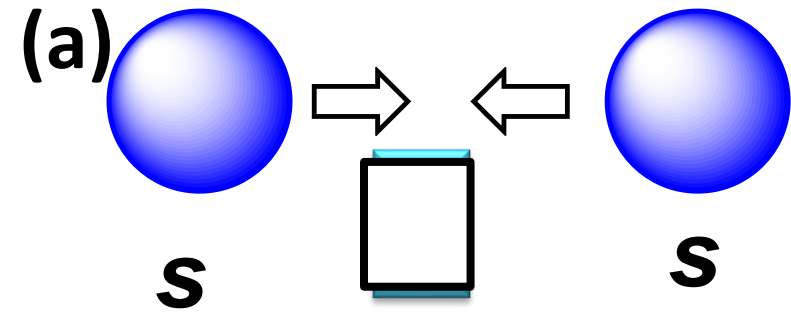
### 1) 結合性軌道

位相で重なる → エネルギーが  
低くて安定

### 2) 反結合性軌道

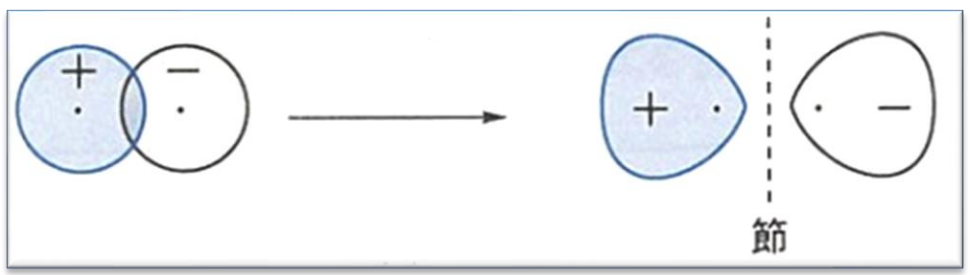
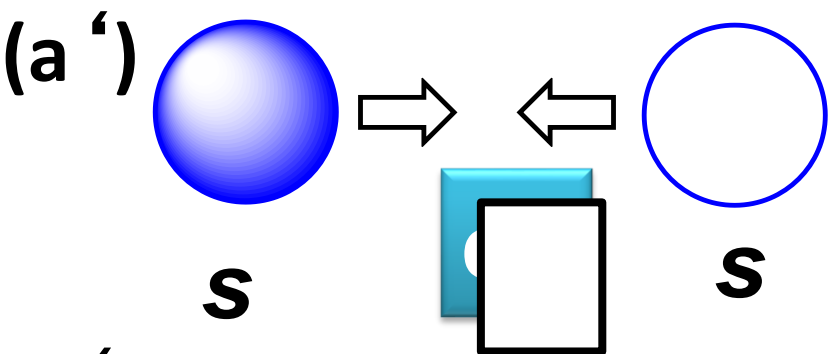
位相で重なる → エネルギーが  
高くて不安定

# 相互作用する組み合わせ(同位相)

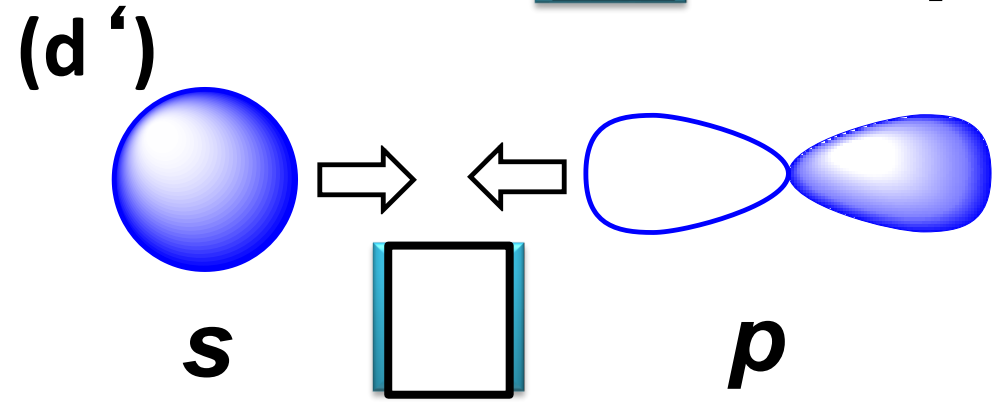
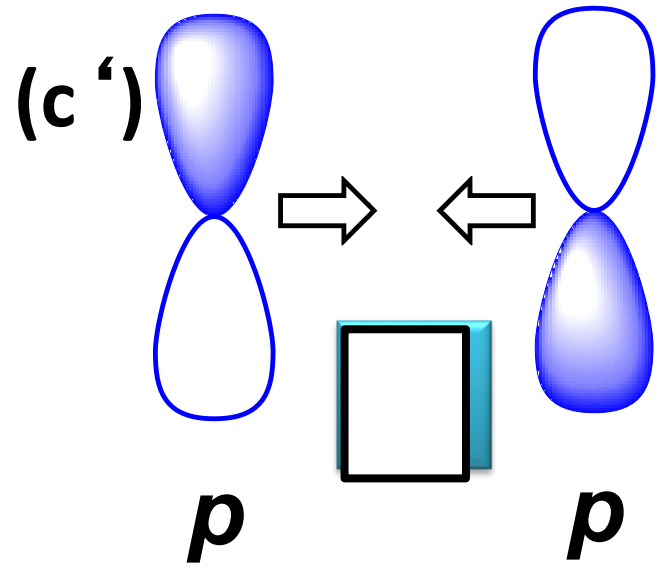
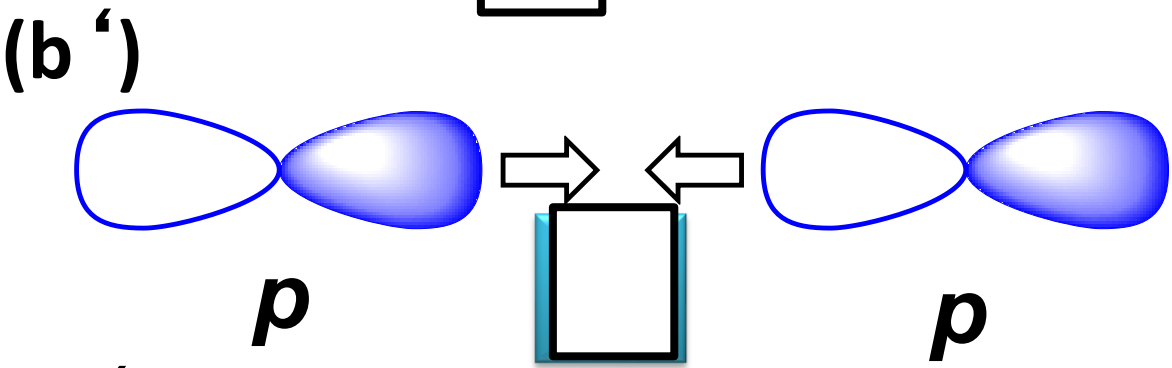


 性軌道

# 相互作用する組み合わせ(逆位相)



電子の存在確率ゼロ



性軌道

# 分子軌道法を考えるうえで

- エネルギーの低い軌道から入る
- 1つの軌道に2個の電子が入るときはスピンは逆向き
- 1つの軌道には最大で2個の電子が入る
- スピンの向きは同じ向きにそろえた方が安定
- 2つの軌道の相互作用で、2つの軌道ができる

これらすべてが成立する