

第2章 化学結合

2.1 原子の結合様式

陰性原子同士：共有結合 分子性物質、高分子

陽性原子同士：金属結合

陰性原子-陽性原子：イオン結合

2.2 共有結合

(1) 分子軌道法 (MO 法)

$AO + AO \rightarrow MOs$ 重ね合わせる

同位相：結合性軌道

逆位相：反結合性軌道 (*) (図 2.2 と図 2.3) 一次元に単純化

MO の波動関数 (図 2.4)

原子核を結ぶ線上に分布： σ 軌道 (s+s, s+p, p+p, ...)

の上下に分布： π 軌道 (p+p, ...)

(2) 二原子分子

各原子軌道の相互作用で表現 (図 2.5)

等核二原子分子 (図 2.6) Be_2 はない。 C_2 までは、高温低圧気相
実は難しい (N までは σ より π が低い)

結合次数 (表 2.1)

異核二原子分子 (図 2.7) (図 2.8) 別途図示する。

結合の極性

(3) 混成軌道

多原子分子の軌道を二原子分子と同様にして近似

メタン、アンモニア、水 非共有電子対の反発

電子対反発則 = 竹内「化学の基礎」p. 58 VSEPR 理論

Sidgwick and Powell

BCl_3 ほか

多くの簡単な化合物に適用

2.3 イオン結合

格子エネルギー

クーロン力とマーデルング定数

ボルン・ランデの式

イオンと分子の分極

水素結合