

化学結合の物理的基礎

佐 藤 均

Beiträge zur modernen chemische Bindung mit
Bezug auf angeblich "Austauscheffekte"

von. Hitoshi Sato

結合は単に固有電子の不足を補う手段としてのみおこるのではない。

波動力学が誕生して以来次第に化学結合に対し化学だけに独特な理論は勢いを失い現代物理学の枠内におさまることが判明して来た。(波動場の理論)

本論文の目標はとりわけ原子価共有結合に対する様々な物理学的根拠を探ることであり何が一体結合の本質となり得るかを考察することである。波動力学もさることながら結合の本性を理解する為の最強の支索は何んと云っても W. Heisenberg の共鳴理論及び強磁性体での Austauschwechselwirkung (交換相互作用) での交換エネルギー概念及びスピンの依るパウリの禁律の存在等をあげなくてはならない。更により広く現代的場の理論では明らかに化学結合は電磁的相互作用のカテゴリーに分類される筈で例えば T. R. Gerholm⁴⁾ も Austauschkräfte (交換力) が化学結合の本質と見ているのである (尤も彼は「交換」概念をより modern な場の概念で修正しなくてはならないことを指摘してはいるが)。原子価結合法 (A. O. 近似) の創始者の一人であるスイスの Heitler も共有電子対結合によって分子が形成されるのは、専ら量子力学的交換作用のせいであると断言してはばからないのである。確かに「交換」と云う操作は A. O. 近似では不可欠の前提に違いなくこの概念が生じたのは疑いもなく原子分子内の個々の電子の識別番号付けが不可能であることに基づく。これを彼は電子の, Ununterscheidbarkeit と呼んでいる。共有結合とそれ以外の結合の一つの大きな違いは前者では overlap integral S が圧倒的に大きいことであろう。にも拘わらず Heitler は H_2 の様な等極二原子分子が形成する際の摂動エネルギーでは交換積分 A , Coulomb 積分 C に比べれば S の重要性をさほど評価していない。先刻の簡単な系では C が A のわずか15%位の contribution しかないことを理由に A が一番本質的であるとする彼の主張はかなり説得力をもつにちがいない。 H_2 分子形成時の摂動エネルギーは $E_{\pm}(R) = C \pm A / 1 \pm S$ と書け + はスピンの逆平行 $\uparrow\downarrow$, - は平行 $\uparrow\uparrow$ で夫々結合性及び反結合性エネルギーをあらわしている。 R は云う迄もなく、距離の関数であることを示す。重なり積分 S を無視すれば $E_{\pm}(R) = C \pm A$ となる。ここで重要な事は A の符号が + にも - にもなり得ることである。 Heitler-

London の理論はしばしば強磁性体の理論の特殊なケースであると云われる、つまり後者では常に $A > 0$ でスピンの \uparrow となった方が安定であり前者では正反対に $A < 0$ つまり \downarrow の方が安定になるからである。いかなる物質、化合物と云えど何らかの意味で磁性体であろう。 H_2 等では反磁性に又 S_2 や O_2 では常磁性体である。しかし圧倒的に多くの共有結合でできた分子は常識的には反磁性体であると考えられる。尤も O_2 が常磁性体であることは分子軌道関数法 (MO 近似) からしか説明できずシンボルでは $|O \uparrow \downarrow O|$ と表記すべく G. Hägg は主張している。ついでに云えば Hägg の化学結合論¹⁾では原子価結合法を低く見ており専ら M.O. 近似で話を進めている、従ってその本のどこを見ても Austausch Kraft (交換力) なる用語は全く見当たらない。我々にはその点が不満である。彼は A.O. 近似の説明に本質的に何も言及せず単に Lewis の octet rule の延長位にしか扱っていないのであろう。

その点で T. R Gerholm のテキスト²⁾では化学結合、原子価をたとえ近似概念に過ぎないとしても交換縮退による交換力であるとする説明にはうなずける所があろう。所詮近似概念なのだから交換を「共鳴」と云い換えてもよいであろう。たしかに結合の本質は交換や共鳴 (共振) にほぼ近いであろう。MO 近似と云えども例えば π 電子の Hückel 法にあらわれる積分の三要素には「共鳴」積分 β の用語が残されており別名移動積分とも呼ばれるがこれは A.O. 近似での交換積分 A に対応していることはまぎれもなく事実である。東、馬場両氏の例えば、「量子有機化学」では M.O. 法の β を「交換積分」と呼んでいる。但し A.O. 法の交換積分 A は β と異りその中にすでに重なり積分を含んでいる為に例えば多原子分子のエネルギー固有値や固有関数を求めるための永年方程式を立てる際 A.O. 法では特に非対角項がきわめて複雑になる為に最近では M.O. 法に一步追過されてしまったのであり、computer の進歩もその原因であろう。一昔前では M.O. 法は A.O. 法にくらべて化学者の原子価の直観からあまりにも離れ過ぎて観念的過ぎ計算の実施は不可能に近いと思われていたのであった。要するに M.O. 法も A.O. 法も共に多体問題が数学的に解けない為の近似であり量子化学とは近似に始まり近似に終わる困難な数理哲学の性格も持つのであり複雑な分子では近似に近似を重ね仮定に仮定を重ねるので波動力学のことばも原子の様には決して行かず、もつれてくるのであり厳密に定量的な原子価の理論は計算困難の為恐らく出来ないであろう。なにしろ数百万種を下らない化合物の内 Born-Oppenheimer の近似*をした上で尚解ける分子は H_2^+ 一つしかないからで H_2 ではすでに飛躍的に計算は困難になるからである (*これは一般に良い近似で、元来存在するはずの分子の回転振動電子の interaction を実効的に取除いて簡単にしたものでよく adiabatic approximation と呼ばれる)。

歴史的に見れば変分法にしる摂動法にしる皆19世紀のラプラス等の天体力学で使われたものがそのまま量子力学でも近似法としてうけつがれておりたとえ超高速の computer でも三体 (多体) 問題は原理的に解けないことは今でも変わらない。従って波動力学的計算の信頼性は実測側と比べない限りは一般の分子においてそれを判断することは殆んど不可能であると云っ

て良い。さすがの波動力学の言葉もここではもつれてしまう。理論値と計算値のギャップが数十%にも達することは稀ではなくなる。その困難性はつきつめて考えれば変分法、摂動法共に結局は積分計算で行き詰まる。要するに良い近似になりしかも積分可能な（例えば Slater の関数）関数を一般に見出すことができる一般的ルールは確立されていないからである。直観と運によるしかそのような好都合な（恐らく指数関数を含む）function を見つけることは出来ないと云うむつかしさがある。

交換も共鳴も所詮近似概念に過ぎないのだからそれらは結合の本質にはなり得ないと云うことにはならない。先述の如く共有結合では交換積分は $A < 0$ であり又二つの波動関数 ψ_1 と ψ_2 が直交しないことが必要である。⁶⁾ 交換積分は一体近似によるエネルギー計算に必要なばかりでなく電子間の spin 配列を論ずるのにも不可欠である。この spin 配列こそは結合に決定的な影響をもつから交換エネルギーを「スピン相関エネルギー」と云い換えても良い。

特に Heitler-London 理論は摂動ポテンシャル U が大きい時は良い近似である。 $A < 0$ になる為には U の中に必ず一部分一電子ポテンシャルが含まれていなくてはならないし、 ψ_1 と ψ_2 が非直交⁶⁾ つまり $\int \psi_1 \psi_2 d\tau \neq 0$ でなくてはならないことは今云ったばかりである。つまり重り積分 $S \neq 0$ でなくてはならない。原子から分子が形成できるのは正に量子力学的交換現象のせいであり結合エネルギーの大半（恐らく 9 割近く）は A のおかげである。それでは残りの 1 割は何に由来するのだろうか。云う迄もなく古典的クーロン積分（静電効果）による筈であるがこれとて現代場の理論から考えれば電子同志の間でフォトンのやりとりでありつまり一種の Platzwechsel⁴⁾（場所の交替）であり「交換」とも再解釈できないこともない。文字通り解釈すれば原子の原子核は電子雲でおおわれ又電子自体が仮想的フォトンの雲でおおわれそれがクーロン力の原因となるからである（フォトンの放出吸収）。ただ距離効果から考えればクーロン積分 C は交換積分 A に比べてはるかにその作用が遠い所に及ぶであろう。ポテンシャルの距離 (r) 依存性は前者で r^{-1} 、後者では多分 $be^{-r/\rho}$ と一般に書けるであろう⁸⁾（但し ρ は定数）。交換積分又はエネルギーが化学結合にはたす役割は共有原子価結合に限らない。実はイオン-イオン結合でカチオンとアニオンに有効半径が存在しその半径比が配位模様が決定的であるのだがその有効作用半径¹⁾がある事自体が交換作用であり原子イオンどうしの距離がある所まで圧縮されると反発力が急激に増大する為である。又きわめて微弱な分子間力 (van der Waals) の反発的要素にも交換作用と Pauli の原理が働いて同一空間に電子が二つは入れなくさせるからであり又分子間力の引力的要素には London 力や分散力が含まれている。しかし分子間力の数学は純粋に量子力学的摂動効果でこれ又大変むつかしい。分子間斥力は摂動論的計算によれば確かに交換積分の寄与が大きい。分子間引力は比較的遠距離効果でその中には少くとも静電気力、先述の分散力、共鳴力、電荷移動力、誘起効果の力に分けられるが大変複雑で一筋なわでは行かない。特に共鳴力は同種の分子二つが二つの状態にある為 Entarten 縮重を起す為共鳴すると説明される（エネルギーのやりとりが起って結合する）。

さて一般に化学結合ができると云うことは何らかの意味で対称性にもとづく原子オービタルの Entartung (縮退) が弱い摂動により、つまり電子電子間のクーロン反発によりほどけてエネルギーが分割され縮退が解消することであると云ってもさしつかえない。これは原子から分子ができる時スペクトルが複雑化することからも実証されることである。これは古典共鳴(共振)の現象に酷似している。疑いもなく結合が形成されると結合電子の potential energy の対称性が低下し異ったエネルギーレベルに分裂し同時に縮退はとれてしまうのである。

(Hägg の結合論では例えば p. 47 の第9図, p. 49 の11図, p. 53 の13図, p. 54 の第7表, p. 82 の錯体に対する24図等々いずれもその考えに立脚して画かれている筈である)。同様に M.O. 近似に基づき二三の図を画いて見た。

そこでは当然オービタル対称性の保存則を満す様に考慮されている。同時に Pauli の禁律も満している。勿論対称性の同じ原子軌道間にのみ相互作用が働くことに注意しよう。第2図には様々な結合型に対するオービタルのエネルギー相関を定性的に説明するものである。↑は電子でスピンの向きを明示している。a は等極 b は異極共有結合, c は電子対 ↑↓ に関し donor-accepter の関係になり coordination 結合を示す。d はあまり正確には表現できないが ionic である。第3図には C₂ と等電子的な窒化ホウ素 BN が形成する時の LCAO¹⁾ により結合性、反結合性のオービタルを波動力学つまり両方の原子を定常波と見做しそのオーバラップの様相を画いたものであるがその際プラスの干渉とマイナスの干渉の両方を考えるべき事をあらわす。σ*2s は反結合性で当然 σ2s よりエネルギーは高い。+-の符号は勿論波動関数の位相をあらわし同符号の位相のみ overlap する事は言う迄もない。ψ の位相概念は結合論できわめて本質的で古典力学的に説明できないものである。

BN も C₂ も8個の価電子をもつ。金属結合は free electron の多重干渉⁸⁾ によって説明でき多数のエネルギー帯が出来るが電子の非極在性⁹⁾ の見地からどちらかと云えばイオン結合より共有結合に近いであろう。その証拠に例えば Li₄ ではブタジェンや Hückel⁷⁾ が最初に指摘した 1,2 dihydrobenzen と同様 4π 系に属し殆んど全く同様な振動モード(固有エネルギーと固有関数)を呈するからである。すなわちエネルギーの低い方から ψ₁ では節数が0, ψ₂ で1ヶ, ψ₃ で2ヶ, ψ₄ で3ヶとなる。M.O. 近似でこれらの永年方程式は次の通りである:

$$\det \begin{vmatrix} \alpha-E & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha-E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha-E & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha-E \end{vmatrix} = 0$$

αはクーロン積分, βは共鳴積分である。

展開すれば, 上式はエネルギー固有値 E に関し4次になるがこの程度なら筆算でも求められるわけである。¹⁰⁾

この単純 Hückel 近似⁷⁾ は最も粗雑な近似と云われるがそのわけは σ と π の完全独立性並びにこの場合4つの π 電子間の相互作用³⁾ や結合距離の違いを完全に無視しているからであるがそれにも拘わらず不思議な位にかなり良い値が得られるのである。尤も σ と π の独立性は原子価結合法で最初にもち込まれた仮定であり A.O. 近似は σ 電子に対し, 又 M.O. 法は π

電子に対して夫々良い近似になっている。

この両方の近似はいずれも両極端であり前者では電子の自由度を過少評価し後者では過大評価して居る為で結合の真実の姿はこの中間に位する筈である。³⁾ つまり A.O. 法では形成した分子中での元来の原子の個性が未だ濃厚に残っており M.O. 法ではも早原子の個性は完全と云って良い位失われてしまっていると考えられる。従って A.O. 法を少しでも M.O. 法に近ずける為にイオン項を加える必要からどうしても「共鳴」を導入しなくてはならず逆に M.O. 法を少しでも A.O. 法に近ずける為に例えば 配置間相互作用 (C.I.) の操作が必要になる筈である、そして M.O. 法では過大評価したイオン項を逆に減らしてやる必要がある。その操作は云う迄もなく変分原理であり、かくして最終的には両者は一致するであろう。ともかく電子は粒子性より波動性が本質的なものだから現実の物質はすべて共有結合とイオン結合の中間であると云われるのも理解でき、例えば H_2 にも 3~4%はイオン性が又 Cs^+F^- にも 10%位は共有結合性をもつことになってしまう。 Cs^+F^- を考えた際 Cs^+ の所にも電子の存在確率は 0 と云うことにはならないからである。配位結合 (donor-accepter bond) を一応共有結合から区別した方が時には便利である。今 CO と Cl_2 について考えて見よう。CO は N_2 , CN^- , NO^+ と等電子数つまり価電子が10個であるが N_2 のみは生理学的に inert である。Hägg¹⁾ に従えばそのシンボル式を $|C\equiv O|$, $|C\equiv N|^-$ とすべきだと云う。これらはいずれも最強の三重結合である。他方ソ連のシェリンスキーの見解²⁾ では $C\leftarrow O$ としても良く \leftarrow は配位結合を示している。これは A.O. 法からの立場である。 Cl_2 ガスに対して Hägg は特に言及してないがシェリンスキー²⁾ は $Cl\equiv Cl$ とすべきだと主張している。つまり三本の内二本が配位結合で全体として三重結合になるとする。 Cl_2 分子の結合エネルギーが 58 Kcal/mol に対し、 F_2 分子はわずか 38 Kcal/mol で後者は単結合の為原子間隔も長い。前者では明らかに 3d 電子が配位結合に参加する。 F_2 分子のシンボルは Hägg 表示では $|\overline{F}-\overline{F}|$ となる。短線—はローンペアである。原子価の飽和性は実はスピン飽和による。従って He には H とは結合できない。(He $\downarrow \uparrow$ H) それならばどんな稀ガスも絶対に結合しないと云うとかならずしもそうではない。かつて O_2PtF_6 が合成された。²⁾ この化合物は O_2^+ と (PtF_6^-) のイオンから出来るとパートレットは結論したがこの時彼は O_2 のイオン化エネルギー (12.2eV) が Xe の第一イオン化エネルギー (12.13 eV) とほぼ等しいことに着目し $XePtF_6$ を作ったと云う。ことほど左様に化学結合には時としてとんでもない例外が現われる。従って仲々画一的な結合型の分類をするのは困難になる。例えば奇数の電子をもつ一電子結合、三電子結合、三中心結合がそれである。有名な例は B_2H_6 等であろう。従って電子対結合 $\uparrow\downarrow$ は必ず共有結合であるがその逆は必ずしも正しくない。 H_2^+ や He_2^+ もそれぞれ一電子、三電子結合だがこれを共有結合に入れたいわけにも行かない。又カチオンの水和はイオン-双極子結合¹⁾ だがこれも広くイオン結合に入れたいわけにも行かないであろう。疎水結合に致ってはどこに分類していいかはむつかしく、恐らく分子間力にでも帰属するのであろう。先に σ と π についてふ

れたが $2\text{NO}_2 \rightleftharpoons \text{N}_2\text{O}_4$ の可逆反応では $N \cdots N$ 間は σ ではなく弱い π 結合しかないと思われる。一般には π 単独の結合はきわめてめずらしい。会合液体は大半が hydrogen bond を含み ice は分子間力も関与する。しかし結合の定まった方向性、飽和性、化合物の種類の高さから見て共有結合が最も大切であることは確かであり話をその方へ戻そう。 H_2 が形成する反応は反熱反応だから原子状態より分子状態の方が明らかにエネルギーが低く容易に反応が進む、従って今両方のH原子のスピンの向きが不明であるとき二つが1回正面衝突して実際に分子になるチャンスはどの位になるのだろうか？ H_I が \uparrow のスピンを持てば H_{II} は \downarrow のスピンをもっていれば良いのでそのチャンスは50%位と思いたくなる。所が分子をつくる確率は $1/4$ でしかなく残りの $3/4$ は衝突してもすぐ解離してしまふ。その理由はほかでもない。波動力学によれば反揆的三重項状態に三つのスピン波動関数があるのに対し引力的一重項では一つしかスピン波動関数がないからである。シンボルで書けば α, β をスピン波動関数として、

$$\begin{aligned} \text{反対称} : & \quad \alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1) & \quad s=0 (\uparrow\downarrow) \text{一重項} \\ \text{対称} : & \quad \left\{ \begin{array}{l} \alpha(1)\alpha(2) \\ \alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1) \\ \beta(1)\beta(2) \end{array} \right\} & \quad s=1 (\uparrow\uparrow) \text{三重項} \quad \text{となる。} \end{aligned}$$

このことはイオン反応にくらべて共有結合の反応速度が遅いことを暗示する。より複雑な有機化合物の反応では尚更であろう。さて原子の相互作用曲線では一重項 ($s=0$) が下で三重項 ($s=1$) が上にこなくてはならない。 $E_-(R)$ が上で反揆エネルギーに相当し $E_+(R)$ が下で必ずミニマムを持つ引力エネルギーに当ることになる。我々は $E=h\nu$ の公式から交換エネルギー A に伴う振動数 A/h がどんな意味をもつかを考えて見よう。一昔前は A が電子交換の為だから二つの電子が実際に Platzwechsel を行っているかと物理学者は信じていたし、今でもひょっとするとそう思い勝であるがその想定は正しくない。交換現象の基礎は先述の様に電子の識別不能性にあるし電子交換は本当は観測にかからないのである。以前に、スピン相関エネルギーに少し言及したが振動数 $\nu=A/h$ はスピン方向の交替に対するものとしなくてはならない。 $\text{H}_I \uparrow \text{H}_{II} \leftrightarrow \text{H}_I \downarrow \text{H}_{II}$ の Resonanz 共鳴の振動数であるとも解釈出来ないこともない。つまりスピンの向きは周期的に変動しその周期 T は $h/2A$ であると考えられるからである。He 原子においてはクーロン積分 $C = \int \phi_a^2(1)\phi_b^2(2) \frac{e^2}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2$ と表わされその物理的意味は別にむつかしくないが交換積分 A は $A = \int \phi_a(1)\phi_b(1)\phi_a(2)\phi_b(2) \frac{e^2}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2$ となりその意味はとても古典物理学では説明できない。

$\phi_a(1)\phi_b(1)$ とか $\phi_a(2)\phi_b(2)$ 等は交換電荷密度⁵⁾ と呼ばれ二つの電荷密度のクーロン力による相互作用と考えられるが仲々とらえにくい概念である。これこそ量子力学特有な結果としなくてはならない。数学的には指数の交換とも云えるが交換電荷密度の更に立入った物理的説明はむつかしい、要するに電子1が部分的に同時に核 a にも核 b にも属するとともにとれる。交換積分 A をその符号を吟味する為に以下の様に分けて書くこともできる：

$$A = \iint \frac{\varphi_a(1)\varphi_b(1)\varphi_a(2)\varphi_b(2)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 + \frac{S^2}{R} - 2S \int \frac{\varphi_a(1)\varphi_b(1)}{r_{a1}} d\tau_1$$

第一項と第二項は明らかに正であるから問題ないが第三項はちょっと複雑である。元来 A は + にも - もとれるからである。 $A < 0$ の為には第三項はぜひ大きなマイナスの値でなくてはならない。二原子分子 $A-B$ に対する全エネルギーは、

$$E_{\text{total}} = E_A + E_B + \frac{C \pm A}{1 \pm S^2}$$

と表現できることは明白で $A-B$ 間の距離 $R \rightarrow \infty$ の極限では第三項が解離エネルギーを与える。一方あまり複雑でない多原子分子に対する全エネルギーは同様に、

$$E_{\text{total}} = \sum_i E_i + \sum_{ij} C_{ij} + \sum_b A_b - \frac{1}{2} \sum_r A_r$$

と表わすことができる。 $|A|$ は S に比例し、 $|A_b| > |A_r|$ である。この場合分子の生成熱つまり解離エネルギーは、 $E_{\text{total}} - \sum_i E_i$ に違いない。

又 C は A_b の約 15% 程度と想定される。 index b, r は結合性, 反発性を意味する。

定性的なまとめ

化学結合とりわけ原子価結合の原因本質は古典的クーロン力と量子力学的交換効果による。化学の原子価とは要するに物理のスピンの代用物⁵⁾であり結合の飽和性はスピンのそれに他ならない。自由スピン \uparrow を不対電子と呼べば原子のもつその数が当然原子価となる。交換エネルギー A は決して小さな量ではなく、二つの電子スピンの相互作用はきわめて大きな **interaction energy** を伴う。スピンの向きが変化するといやおうなしに電荷分布迄変わってしまうがそのわけはスピンによる Pauli の原理によりスピンが軌道波動関数に結びついているからである。従って結合の本質は Pauli の原理とオービタルの安定性の 大前提の下で交換エネルギーに大部分負うと結論して良い。現象論的に云えば結合は共鳴とも類縁関係にあり、縮退が電氣的な **perturbation** によってとけることによりエネルギーが分割されるからである。結合に伴ってオービタルの自由度がふえ対称性は低下する。化学反応もスピン相関則 (スピン保存則) に従う。 $H+H \rightarrow H_2$ では二重項 ($s = \frac{1}{2}$) 同志から一重項 ($s=0$) と三重項 ($s=1$) が出来る。スピンはベクトルの的に合成され普通化学では Ising のベクトルモデルが使われる。又一電子結合のような例外的な型もあるから共有結合が全部電子対結合であるとしてしまうわけにはいかないし、奇数の電子による結合は当然弱く結合次数も半減してしまう。交換エネルギー A は又分子間結合の斥力的因子にも関与する。クーロンエネルギーに比べきわめて短距離の効果である。分子ができる傾向は専ら A の大きさとその符号, 係数によってきまる。⁵⁾ スピンの向きが大切なことから A をスピン相関エネルギーと呼んでもさしつかえない。交換電荷密度はクラシカルには説明できない。

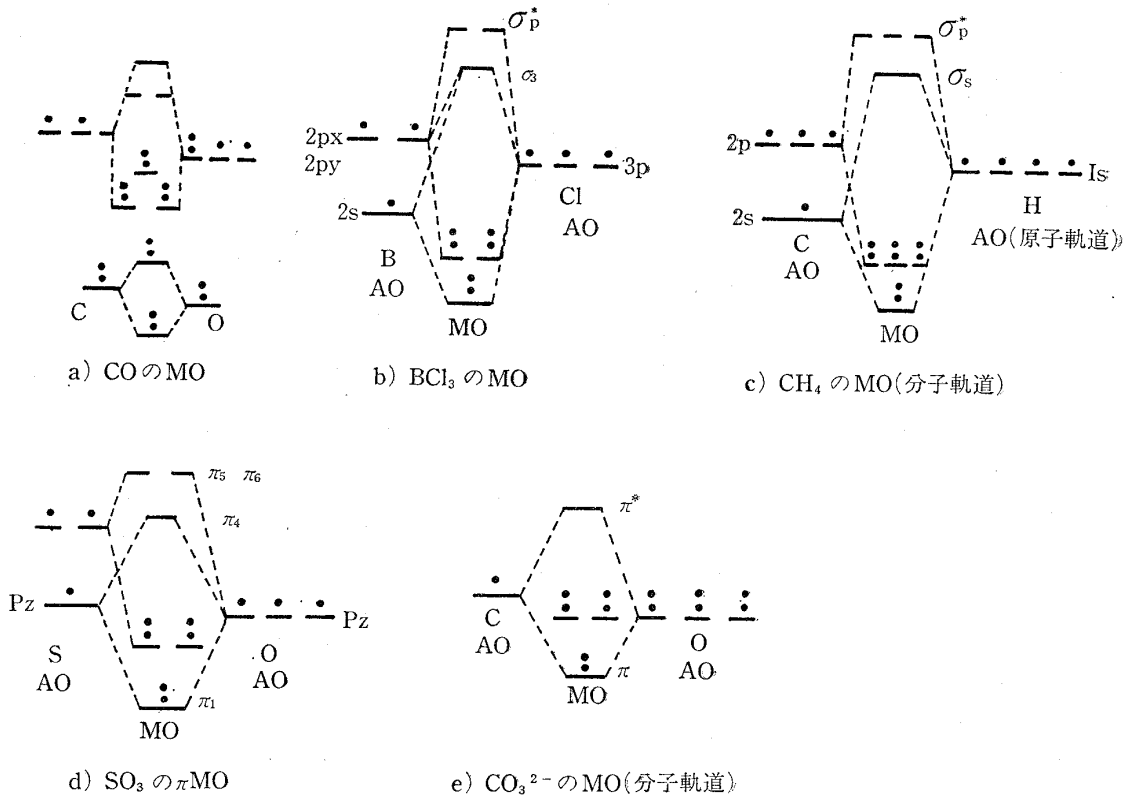
結合の真の姿は多分、分子中でも一部分元の原子オービタルの個性が残っているので A.O.

及び M.O. の両近似は夫々両極端なものといえる。一方波動力学では結合を定常波の強め合う干渉と弱め合う干渉によって説明するが、その役目は主として定性的に結合やその他の物性論的性質を説明する為であり、原子に対してはともかくかなり複雑な分子のエネルギーレベルを求めると云った定量的計算には限界がある。断熱近似をして尚正確に **Schrödinger** の方程式が解ける分子種は H_2^+ しかないからである。共有結合で分子が出来る時、スピン相関の為一回の衝突で反応するチャンスは予想外に低いながらも量子力学の計算からも裏付けられることである。Pauli 原理さへ正確には ψ 関数の電子「交換」を使わずには表現できない。

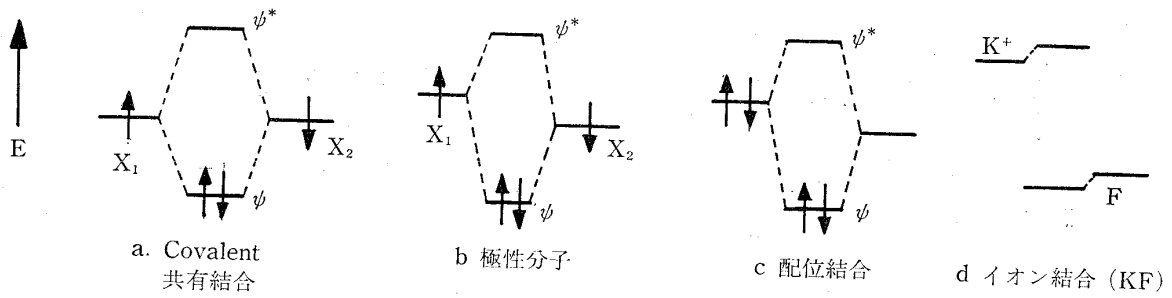
文 献

- 1) ヘッグの化学結合論 Gunnar Hägg (Uppsala, Sweden)
- 2) 「化学結合とは何か」シェリンスキー (USSR)
- 3) 電子論の基礎と応用 長倉三郎編
- 4) 物理哲学史 T. R. ゲルホルム「現代場」
- 5) Elementary wave mechanics, W. Heitler (Zürich, Oxford)
- 6) 本学紀要 a) No. 14号 論文 佐藤 均
本学紀要 b) No. 15号 論文 佐藤 均
- 7) 化学の原典, 化学結合 (II), E. Hückel の個所
- 8) Atomic Physics, by Max Born, London '61 (第7版)
- 9) Thirty years that shook physics, by G. Gamov.
- 10) 基礎教養化学 名古屋工業大学化学教室編 (改訂版)

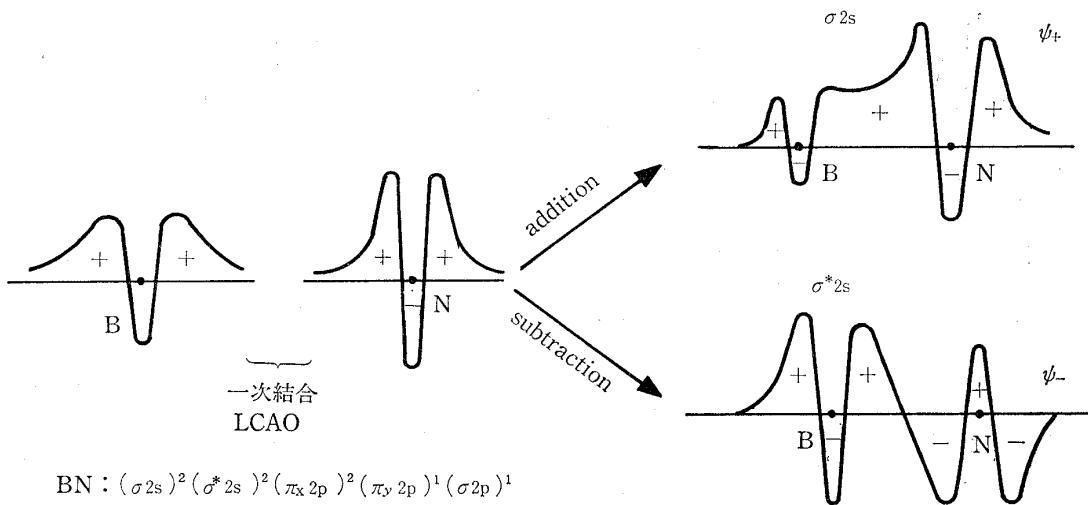
第1図 オービタル対称性の保存をも示す。



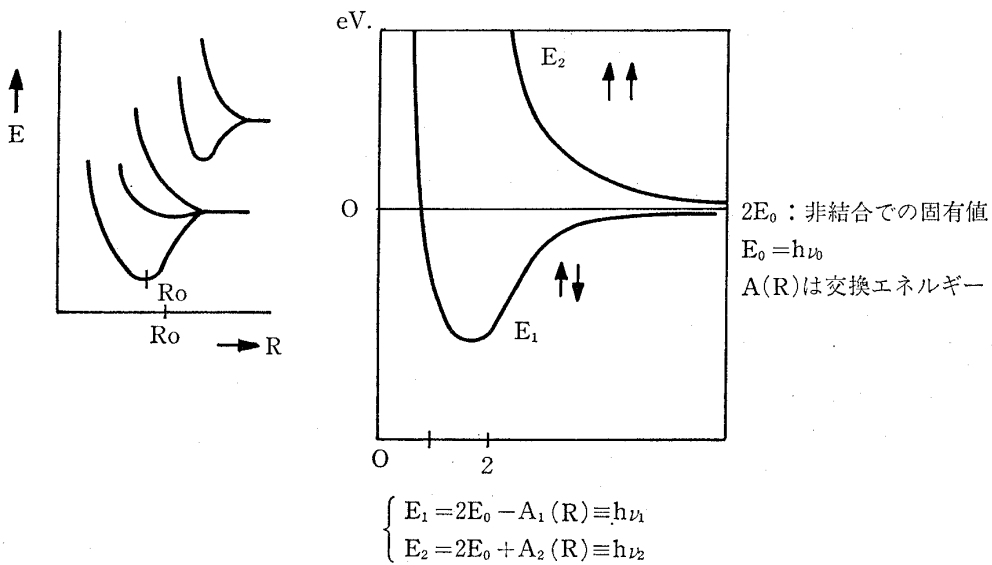
第2図 各種の結合型でのエネルギー相関図



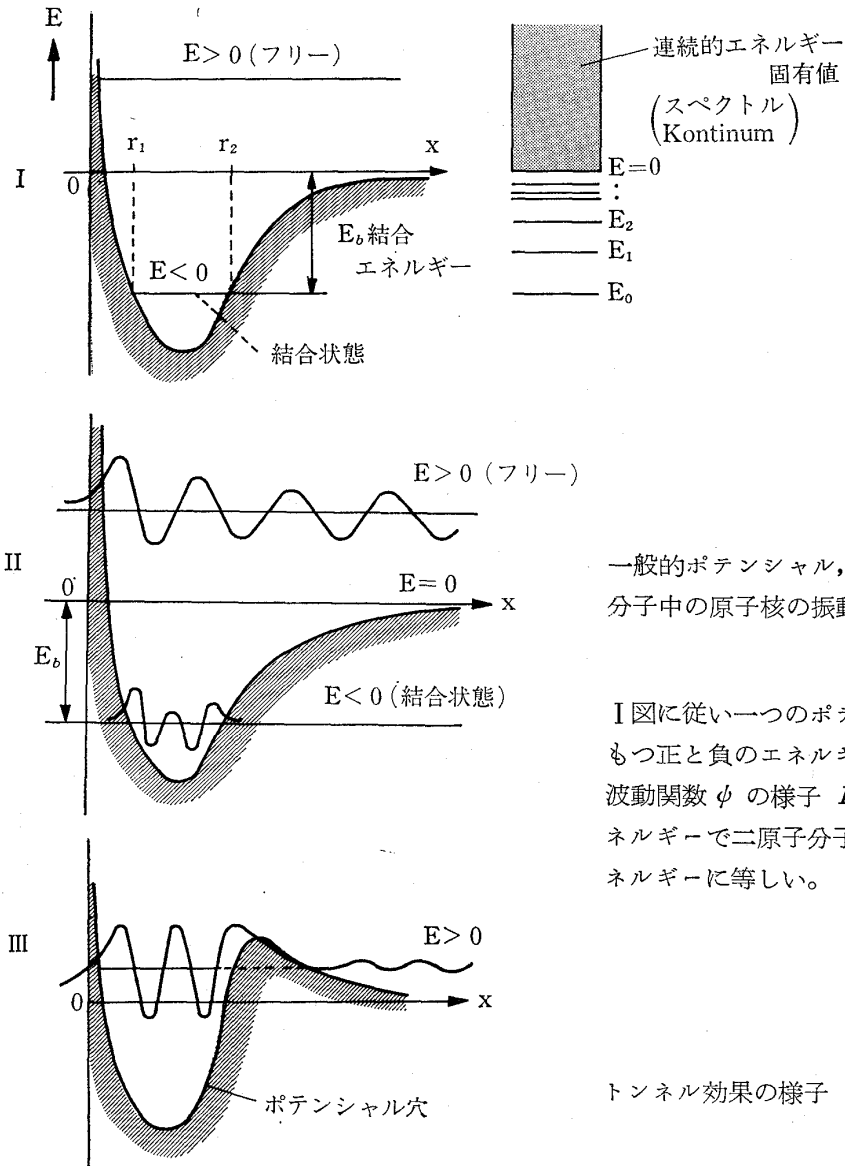
第3図 BN に対する ψ_+ と ψ_-



第4図 原子相互作用曲線 (エネルギーの分割)



第5図 Schrödinger 方程式の単純な応用の定性的説明



—Schlusswort—

Die chemische Bindung ist ein neuer Gebiet der physikalische Chemie, der genauere Analyse oder theoretische Rechnungen sind trotz extremer Vereinfachung des Näherungsmodells, wie sie von Heitler, Hückel, Slater, Pauling u. a. eingeführt wurden, sehr aufwendig. Die Ursache der chemische Bindungen lässt sich wegen der Austauschkräfte besonders Spinkorrelation bei beide homöopolarre und heteropolarerer Bindung nur wellenmechanische erfassen. Die Austauschkräfte oder Energie beruhen darauf, dass die Bindungselektronen ($\sigma, \pi, \delta \dots$) nicht einem bestimmtem Atom zugeordnet werden können d.h. Nichtunterscheidbarkeit der Elektronen.