

## 構造化学 11 回目

等核 2 原子分子について学ぶ。これまでの議論とはほぼパラレルである。  
ポイント

多電子原子の場合の平均場近似 (これは独立粒子近似、ハートリー-フォック近似とも呼ばれる) は、多くの場合成立する。

平均場近似で考えると、軌道概念が出てくる

$3N$  次元の波動関数  $\rightarrow N$  本の分子軌道 = 3次元の関数の積

軌道エネルギーと電子配置で電子構造を(大まかに)理解する

11

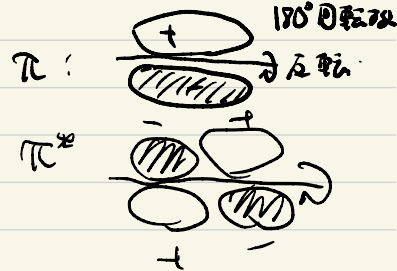
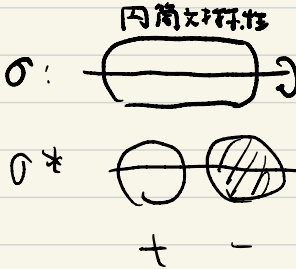
分子系のシュレーディンガー方程式の解。

2つの原子軌道から2つの分子軌道が作られる

安定化: 結合性軌道

不安定化: 反結合性軌道

軌道の対称性も重要。



## 11-1 平均場近似 (図々)

## 11-2 分子の結合と軌道の安定化、不安定化。

## 11-3 原子軌道の対称性、と分子軌道

## 11-4 等核 2 原子分子の電子構造とエネルギーレベル図

## 11-1 平均場近似(再び)

(注)

この節は完全な複習

なので、ちゃんと議論は他の教科書で

9回目でH<sub>2</sub>原子について平均場近似の初歩的な取扱いをした。

同じような取扱いは、水素分子や他の原子・分子でも使えることがわかってる。

- 3N次元の波動関数を2次元のN本の軌道の積で近似する

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \sim \hat{A}(\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\dots\phi_N(x_N))$$

- N電子系のシュレディンガー方程式を

$$\star = (\pi, \sigma)$$

N本の1体のシュレディンガー様方程式に変換すること上の近似は等価

$$\hat{H}\psi_0(x_1, x_2, \dots, x_N) = E_0\psi_0(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

 $\hat{H}$ : ハミルトニアン

(固有)波動関数

(固有)エネルギー

平均場近似

$$\hat{f}\phi_n(x) = \epsilon_n\phi_n(x) \quad (n=1, \dots, \infty)$$

 $\hat{f}$ : 1体の演算子

分子軌道

軌道エネルギー

$$\psi_0 \sim \hat{A}(\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\dots\phi_N(x_N)) \text{ と近似できる。}$$

|                   |   |             |
|-------------------|---|-------------|
| $\epsilon_6$      | — | $\phi_{3s}$ |
| $\epsilon_{3p,5}$ | + | $\phi_{2p}$ |
| $\epsilon_2$      | + | $\phi_{2s}$ |
| $\epsilon_0$      | + | $\phi_{1s}$ |
|                   | C |             |

全エネルギー  $E$ 

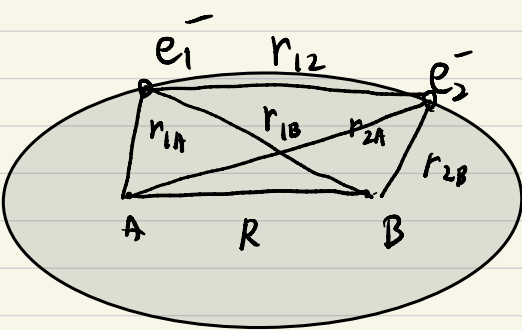
$$E = \sum_n \epsilon_n$$

★イメージです。

うそ入ってます。

とびす

水素分子を平均場近似を考える。(水素分子イオンのことを思い出さる)



水素分子を模式的に書くと、

左図のようになる。

核A, Bが存在し、電子1, 2が存在している。これらの距離  $R, r_{1A}, r_{1B}, r_{2A}, r_{2B}, r_{12}$  とする。また、核は停止しているとす

ハミルトニアン  $H_{H_2}$

$$H_{H_2} = \underbrace{\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{r_{1A}} - \frac{1}{r_{1B}} + \frac{1}{R}\right)}_{\text{水素分子イオン } H_{H^+}(r_1)} + \underbrace{\left(-\frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{2B}} + \frac{1}{R}\right)}_{\text{水素分子イオン } H_{H^+}(r_2)} + \underbrace{\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R}}_{\text{新しい項}}$$

となる。

項を見ると水素分子イオン2つの項と核間反発項、

および、新しく  $\frac{1}{r_{12}}$  電子-電子反発項が入っている。 ( $-\frac{1}{R}$  は定数)

$\frac{1}{r_{12}}$  があつた変数分離できる。  $\psi_1(r_1) \psi_2(r_2)$  という形で

波動関数を書くと、  $|\psi_2(r_2)|^2$  は、電子2の作る電子密度であるから、

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|r_1 - r_2|} \rightarrow \int |\psi_2(r_2)|^2 \frac{1}{|r_1 - r_2|} dr_2 = V_{\text{eff}}(r_1) \text{ としおくと}$$

$$H_{H_2} = H_{H^+}(r_1) + H_{H^+}(r_2) + V_{\text{eff}}(r_1) \text{ と}$$

$r_1, r_2$  で変数分離される。

# 11-2 等核2原子分子の結合と軌道の安定化 不安定化

13:23

13:27

## 同じ軌道の場合 (違う原子の)

前回水素分子イオンができたのを見た。分子軌道ができるには、各原子の1s軌道の重ねあわせが必要となり、プラスで重なると結合性軌道、マイナスで重なると反結合性軌道となる。

|          |          |                                                     |          |
|----------|----------|-----------------------------------------------------|----------|
| $\phi_A$ | $\phi_B$ | $\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}}(\phi_A + \phi_B)$ | : 結合性軌道  |
| $\phi_A$ | $\phi_B$ | $\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}}(\phi_A - \phi_B)$ | : 反結合性軌道 |

無限遠に離れた等核2原子分子の違う原子の同じ軌道から分子軌道がどのようにできるかを見よう。この軌道を  $\phi_1, \phi_2$  としておく。

10回目のLCAO近似と変分法の議論の。

$$\int \phi_1^* H \phi_1 d\tau = H_{11}$$

$$\int \phi_2^* H \phi_1 d\tau = H_{21} = H_{12}$$

$$\int \phi_2^* H \phi_2 d\tau = H_{22}$$

$$\int \phi_1^* \phi_2 d\tau = S_{12} = S_{21}$$

$$\int \phi_1^* \phi_1 d\tau = \int \phi_2^* \phi_2 d\tau = S_{11} = S_{22} = 1$$

と定義すれば、 secular equation

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} - ES \\ H_{21} - ES & H_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

を得られる。



13:27

13:32

これを解くと

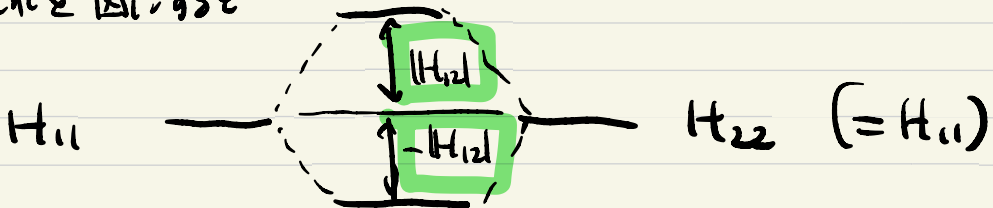
$$E_{\pm} = \frac{(H_{11} + H_{22} - 2SH_{12}) \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4(H_{12} - SH_{11})(H_{12} - S_{22})}}{2(1 - S^2)}$$

となる。原子核を無限遠に離しているのだから  $S=0$ 。  
等核2原子分子の同じ軌道なので  $H_{11} = H_{22}$

を使うと、劇的に簡単になる

$$E_{\pm} = H_{11} \pm |H_{12}|$$

これを図にすると



となる。

$H_{12}$  の分だけ、軌道が安定化 / 不安定化する。

$|H_{12}|$  は 核間距離に依存する。たとえば水素原子の1s軌道の場合。

$$H_{12} = E_{1s} S - \int \frac{\phi_A^* \phi_B}{r_{12}} d\tau + \frac{S}{R} \quad \text{である}$$

$S = \int \phi_A^* \phi_B d\tau$  也  $\int \frac{1}{r_{12}} \phi_A^* \phi_B$  は  $\phi_A \leftrightarrow \phi_B$  の距離が近いと大きくなる

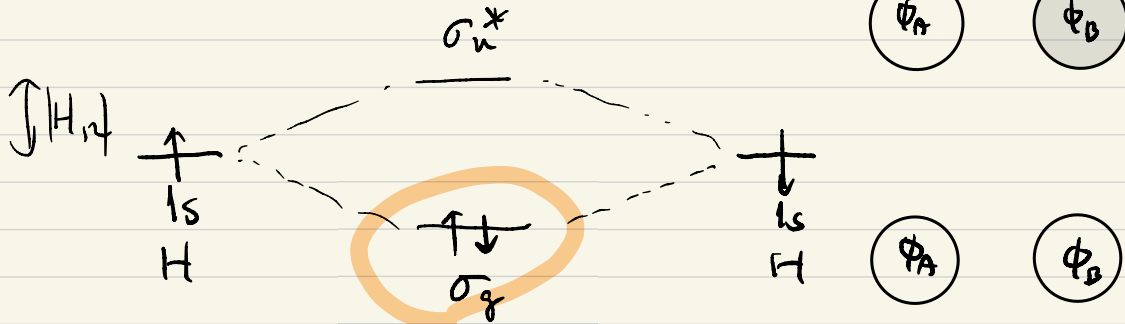
ここに注意しよう。

13:32

13:35

例1

水素分子の形成



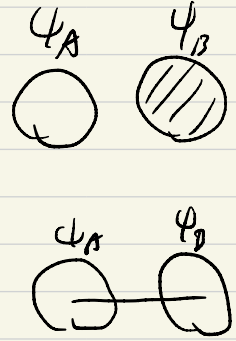
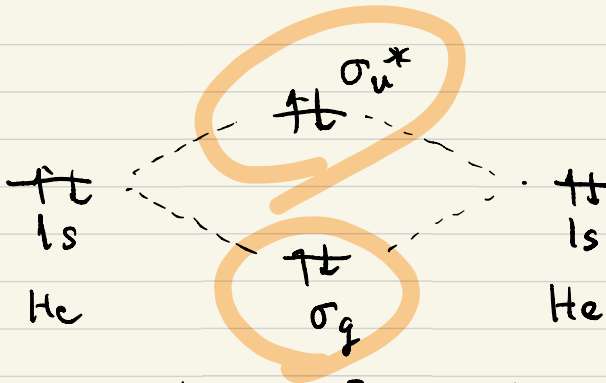
上の図の様なエネルギーダイヤグラムを考えよう。  $1s$  に1個電子が入った  $H$  を2つ考え、2つの  $1s$  軌道が2つの分子軌道をつくる。

結合性軌道と反結合性軌道となる。分子軌道の名前はその対称性から  $\sigma_g$  と  $\sigma_u^*$  とよぶ。電子は2つあり、1つ1つ別より、同じ空間

軌道には、2つまでスピンを逆にして入られる。従って 結合性軌道  $\sigma_g$  に、2つ電子が入り、安定化する。 よって 水素分子ができる!

13:35  
13:38

# 例) ヘリウム分子の形成



ヘリウム分子はできたりするが? He原子は1sに2電子が入っている、He原子の1s軌道同志が線形結合をつくり分子軌道ができる。これまでと同様、結合性軌道 $\sigma_g$ と反結合性軌道 $\sigma_u^*$ ができる。電子は4つあり、まず $\sigma_g$ と $\sigma_u^*$ の軌道をよめる。 $\sigma_g$ に電子が2入って 低くなったエネルギーは、 $\sigma_u^*$ に入った2つの電子によって高くなった エネルギーによって打ち消され、結合によってエネルギーを下げることは できない。つまり、結合はできない。

## 2原子軌道の場合

2つの原子軌道2つから分子軌道が作られることを考えよう。

原子を無限遠に離れたとき、近づけることでエネルギーが下がるかどうかわからない。  
数式にすると、次のようになる。まず、近似なしに解くと

$$E_{\pm} = \frac{(H_{11} + H_{22} - 2SH_{12}) \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4(H_{11} - SH_{11})(H_{22} - SH_{22})}}{2(1 - S^2)}$$

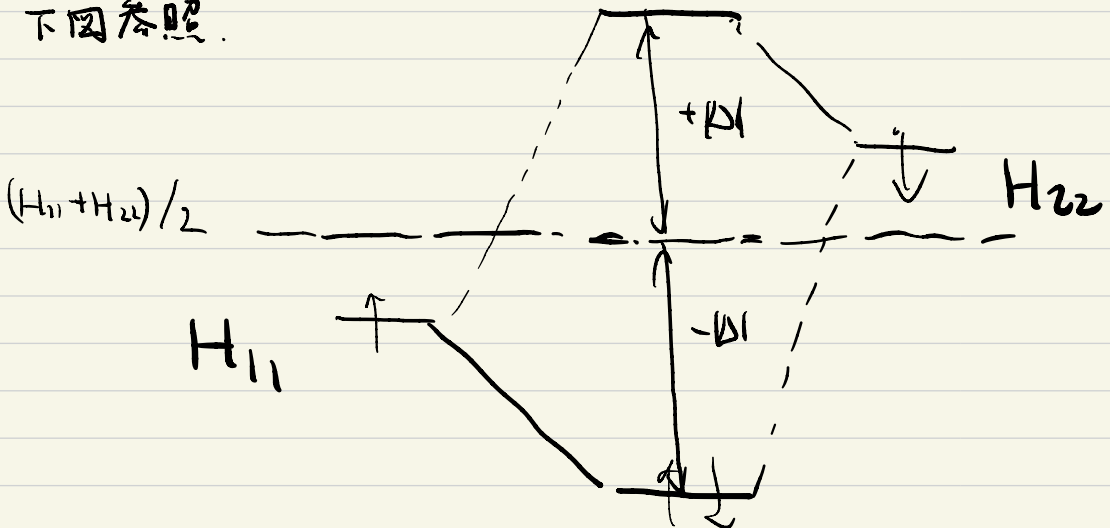
であるが、無限遠に離れていることより  $S=0$  とおく。

$$E_{\pm} = \frac{(H_{11} + H_{22})}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2 + 4H_{12}^2}{2}}$$

軌道Eの平均

$$\Delta = \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2 + 4H_{12}^2}{2}}$$

$\Delta$ は結合による安定化、不安定化のエネルギーである。  
下図参照。



13.43

1

13.48

今回は 違う軌道なのに  $H_{11}$  と  $H_{22}$  である.  $H_{11} < H_{22}$  とし、さらに

$H_{12}$  は、 $R \rightarrow \infty$  で 0 に近づくため、 $H_{22} - H_{11} \gg H_{12}$  の場合、を考える.

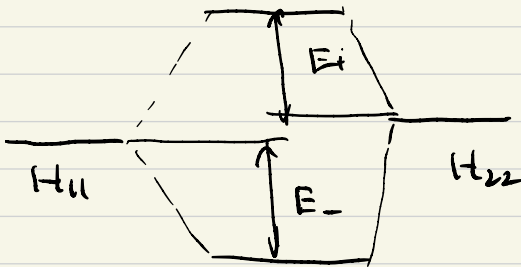
$$\Delta = \frac{\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4H_{12}^2}}{2} \approx \frac{H_{22} - H_{11}}{2} \left\{ 1 + 2 \left( \frac{H_{12}}{H_{22} - H_{11}} \right)^2 \right\}$$

$$\text{よって, } E_- = H_{11} - \frac{H_{12}^2}{H_{22} - H_{11}}$$

$$E_+ = H_{22} + \frac{H_{12}^2}{H_{22} - H_{11}}$$

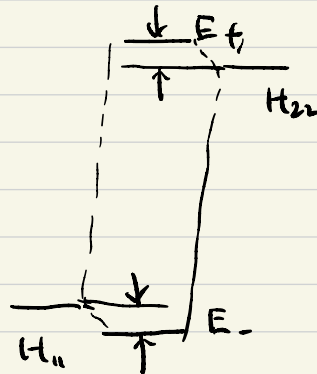
となる. 分子軌道の軌道エネルギーは、 $H_{22}$  と  $H_{11}$  が近いほど  
ほど、 $H_{12}^2$  が大きいほど、安定化しやすい

エネルギーの低い分子軌道  
 ができる場合.  $H_{11} \approx H_{22}$ .



原子軌道から分子軌道を作っても  
 エネルギー的に低くなりにくい場合.

$H_{11} \ll H_{22}$



13:48

13:52

### 11-3. 原子軌道の対称性と分子軌道

対称性の高い分子では（特に小さな分子）分子軌道が原子軌道の対称性によって、0となり作れない場合があるので注意しよう。たとえば  $2s$  と  $2p_x$  軌道は対称性より 0

分子軌道  $\psi = \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix} \Rightarrow \int \psi_{2s}^*(r) \psi_{2p_x}(r) dr = 0$

どの原子軌道同志の重なりが非ゼロであるかを調いたい

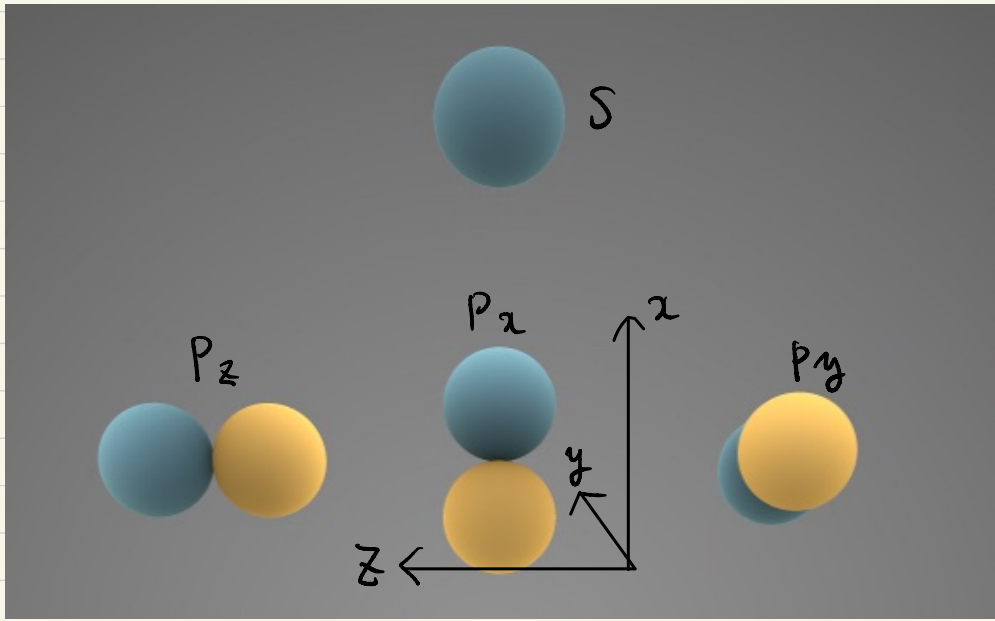
2原子分子で組合せを考える。軌道には  $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$  と5種類あるので、重複も入れるため、15通りあることになる。

|        | $1s$                                                                                 | $2s$                                                                                  | $2p_x$                                                                                | $2p_y$                                                                                | $2p_z$                                                                                |                                                                                                                           |
|--------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $1s$   |  ① |  ②  |  ③  |  ④  |  ⑤  |  非ゼロ                                    |
| $2s$   | ②                                                                                    |  ⑥ |  ⑦ |  ⑧ |  ⑨ |  ゼロ                                    |
| $2p_x$ | ③                                                                                    | ⑦                                                                                     |  ⑩ |  ⑪ |  ⑫ |  軌道同士で要確認、<br>★エネが近いと重なる<br>★大きいときほどゼロ |
| $2p_y$ | ④                                                                                    | ⑧                                                                                     | ⑪                                                                                     |  ⑬ |  ⑭ |                                                                                                                           |
| $2p_z$ | ⑤                                                                                    | ⑨                                                                                     | ⑫                                                                                     | ⑭                                                                                     |  ⑮ |                                                                                                                           |

13:52

13:54

まず, S 軌道, P 軌道の概形を復習しておく.



まずは同じ軌道同士だと自明に非ゼロとなる

①, ⑥, ⑭, ⑮, ⑮ については ⑬  $\int \psi_{2p_y}^*(r) \psi_{2p_y}(r) dr = 0$

①  $\int \psi_{1s}^*(r) \psi_{1s}(r) dr \neq 0$  ⑮  $\int \psi_{2p_z}^*(r) \psi_{2p_z}(r) dr = 0$

⑥  $\int \psi_{2s}^*(r) \psi_{2s}(r) dr \neq 0$

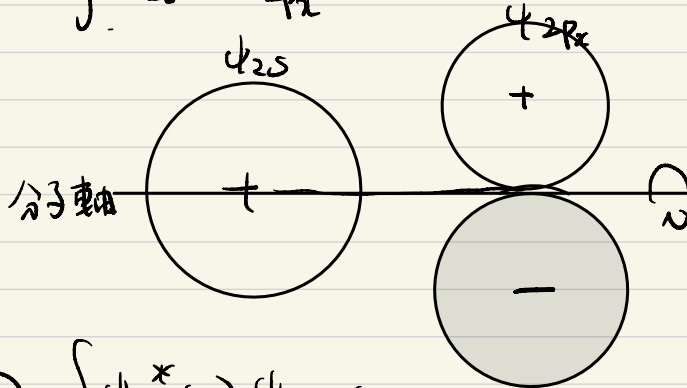
⑭  $\int \psi_{2p_x}^*(r) \psi_{2p_x}(r) dr \neq 0$

13:54

13:56

$$2s \longleftrightarrow 2p_x, 2p_y, 2p_z$$

$$\textcircled{7} \int \psi_{2s}^*(r) \psi_{2p_x}(r) dr = 0$$



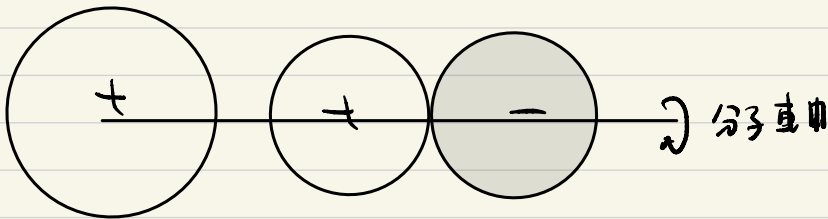
$2p_x$  は、分子軸まわりの回転で対称なため  
符号が出る

従って積分は分子面  
上下で打ち消しあう

$$\textcircled{8} \int \psi_{2s}^*(r) \psi_{2p_y}(r) dr = 0$$

⑦と同様、 $x$  軸と  $y$  軸  
が入れかわるのみ。

$$\textcircled{9} \int \psi_{2s}^*(r) \psi_{2p_z}(r) dr \neq 0$$



この積分は対称性によって消えることはない



$2p_x$   $\begin{matrix} \nearrow 2p_y \\ \searrow 2p_z \end{matrix}$

13:56

13:58

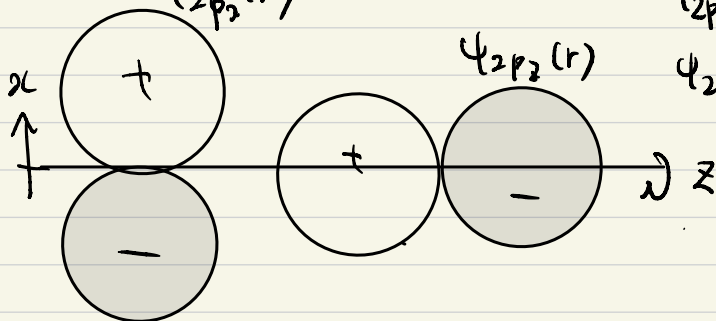
①②, ④ はすべて 0

②  $\int \psi_{2p_x}^*(r) \psi_{2p_z}(r) dr = 0$

z 軸上で 180° 回転すると

$\psi_{2p_x}$  は 符号が 出る

$\psi_{2p_z}$  は 符号が 出ず、そのまゝ 残る



①, ④ も同様 0 也。

最後に、②, ③, ④, ⑤

③, ④ は、①, ② と同じ理由で 0.  $\int \psi_{1s}(r) \psi_{2p_x}(r) dr = 0$

$1s \ 2p_x \ 1s \ 2p_y$   $\int \psi_{1s}(r) \psi_{2p_z}(r) dr = 0$

②, ⑤ は、非ゼロ だが、軌道エネルギーの差が大きいときは ほぼ 0

$\int \psi_{1s}^*(r) \psi_{2s}(r) dr \neq 0$

$\int \psi_{1s}^*(r) \psi_{2p_z}(r) dr \neq 0$

13:58

14:00

まとめる。

 $\int \psi_A^*(r) \psi_B(r) dr$  はゼロか非ゼロかの表。

|                 | 1s                                                                                | 2s                                                                                | 2p <sub>x</sub>                                                                   | 2p <sub>y</sub>                                                                   | 2p <sub>z</sub>                                                                   |
|-----------------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| 1s              |  |  |  |  |  |
| 2s              |                                                                                   |  |  |  |  |
| 2p <sub>x</sub> |                                                                                   |                                                                                   |  |  |  |
| 2p <sub>y</sub> |                                                                                   |                                                                                   |                                                                                   |  |  |
| 2p <sub>z</sub> |                                                                                   |                                                                                   |                                                                                   |                                                                                   |  |



! 原子軌道同志重なりあり

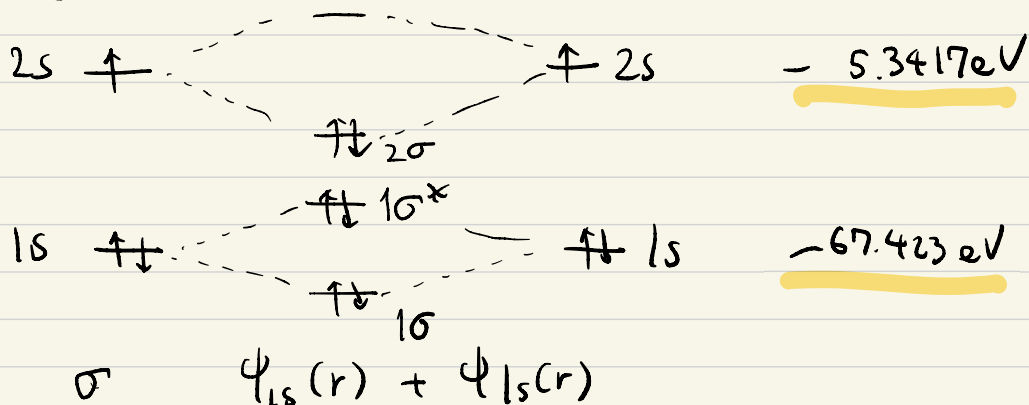


! 対称性より原子軌道は重なりあわない。0となる。



軌道エネルギーの差に注目。差が小的时候重なりが  
差が大き時はほぼゼロとなる。

## 11-4 等核 2原子分子の電子構造とエネルギー図

 $\text{Li}_2$ 

任意回転で対称性がある軌道は  $\sigma$  とよばれる

結合次数 =  $\left\{ \begin{array}{l} \text{(成結合性軌道に入っている電子数)} \\ - \text{(反結合性軌道に入っている電子数)} \end{array} \right\} / 2$

表 B.3 原子の軌道エネルギー<sup>a)</sup>

| Z  | 原子 | 1s      | 2s      | 2p      |
|----|----|---------|---------|---------|
| 1  | H  | -13.606 |         |         |
| 2  | He | -24.981 |         |         |
| 3  | Li | -67.423 | -5.3417 |         |
| 4  | Be | -128.79 | -8.4167 |         |
| 5  | B  | -209.40 | -13.462 | -8.4330 |
| 6  | C  | -308.20 | -19.201 | -11.794 |
| 7  | N  | -425.30 | -25.724 | -15.446 |
| 8  | O  | -562.44 | -33.860 | -17.195 |
| 9  | F  | -717.93 | -42.791 | -19.865 |
| 10 | Ne | -891.79 | -52.530 | -23.141 |

= 1

磁性なし

球 s    p    d    f    g  
 円筒  $\sigma$      $\pi$      $\delta$      $\phi$      $\gamma$

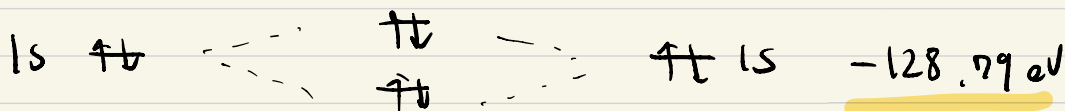
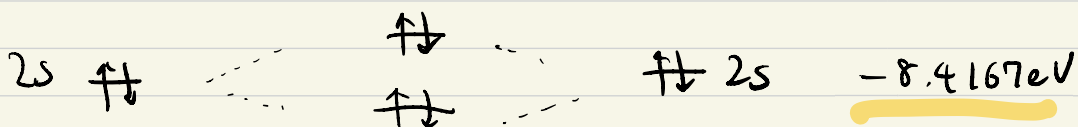
Be<sub>2</sub>



14.63

14.05

軌道エネルギー



結合次数 = 0 であることに注意

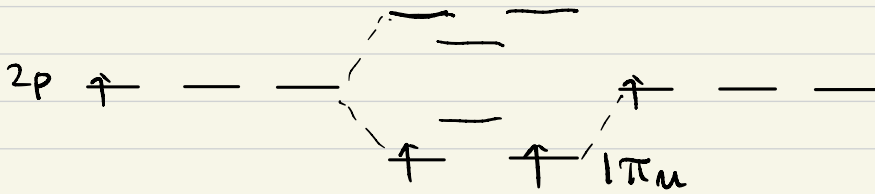
磁性なし

表 B.3 原子の軌道エネルギー <sup>a)</sup>

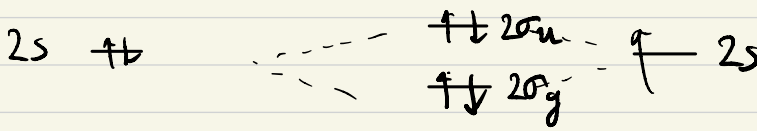
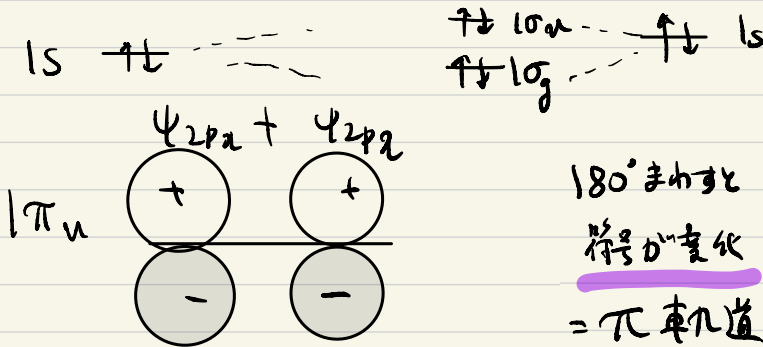
| Z  | 原子 | 1s      | 2s      | 2p      |
|----|----|---------|---------|---------|
| 1  | H  | -13.606 |         |         |
| 2  | He | -24.981 |         |         |
| 3  | Li | -67.423 | -5.3417 |         |
| 4  | Be | -128.79 | -8.4167 |         |
| 5  | B  | -209.40 | -13.462 | -8.4330 |
| 6  | C  | -308.20 | -19.201 | -11.794 |
| 7  | N  | -425.30 | -25.724 | -15.446 |
| 8  | O  | -562.44 | -33.860 | -17.195 |
| 9  | F  | -717.93 | -42.791 | -19.865 |
| 10 | Ne | -891.79 | -52.530 | -23.141 |

14:05

14:08

 $B_2$ 

軌道交換

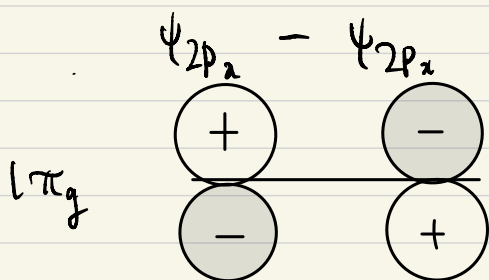
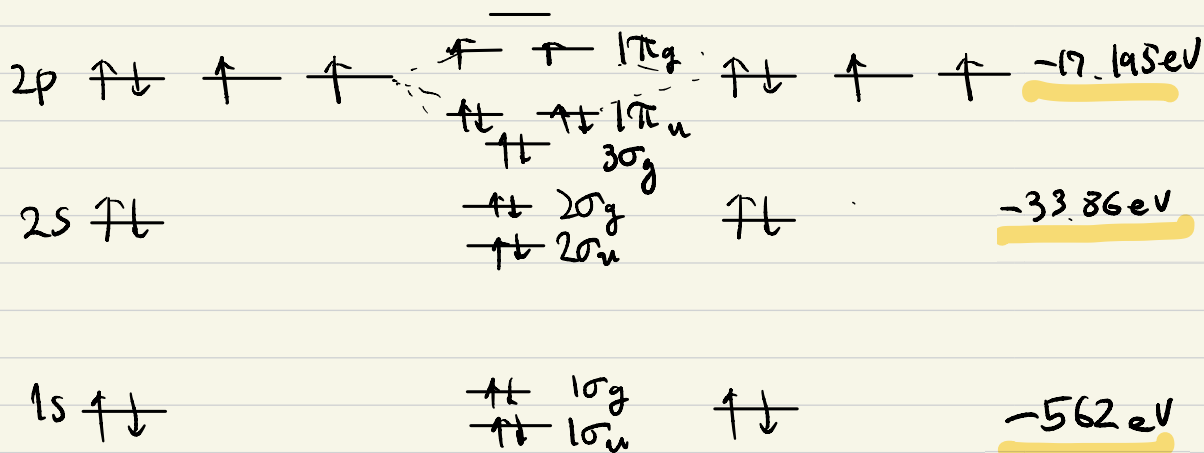
-8.43 eV-13.46 eV-209.4 eV表 B.3 原子の軌道エネルギー <sup>a)</sup>

| Z  | 原子 | 1s      | 2s      | 2p      |
|----|----|---------|---------|---------|
| 1  | H  | -13.606 |         |         |
| 2  | He | -24.981 |         |         |
| 3  | Li | -67.423 | -5.3417 |         |
| 4  | Be | -128.79 | -8.4167 |         |
| 5  | B  | -209.40 | -13.462 | -8.4330 |
| 6  | C  | -308.20 | -19.201 | -11.794 |
| 7  | N  | -425.30 | -25.724 | -15.446 |
| 8  | O  | -562.44 | -33.860 | -17.195 |
| 9  | F  | -717.93 | -42.791 | -19.865 |
| 10 | Ne | -891.79 | -52.530 | -23.141 |

結合次数 1磁性アリ

14:08

14:11

 $O_2$ 

結合次数 1.  
 磁性 あり

★  $3\sigma_g$  か  $1\pi_u$  か どちらが低いエネルギーを持つか?

計算してみないとわからない。例として  $B_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$  の場合

$2p$  と  $2s$  の軌道エネルギー差が小さいとわかる。

$2p_z$  と  $2s$  があまりやく、エネルギーがより下がると思われる。

分子の反応を見せる

# 4-トート

## 近似のまとめ

原子・分子を量子力学的に取扱うには、様々な近似が必要となる。  
これについて簡単にまとめてみる

### ・基本方程式、シュレディンガー方程式という近似

- ・ディラック方程式：微細細精進、超微細細精進のために必要
- ・うらうら：さらに量子電磁力学が必要

### ・核は点電荷、核はある程度大きさを持っている

陽子と中性子から成る量子系だが、厳密な取扱いには困難  
近似レベルには様々なものがある

### ・ボリン・ホーパインバート近似 原子核は静止しているとする近似

### ・LCAO近似：原子間に基底を入れなくても良いという近似

### ・平均場近似：99.5% エネルギーを算出するが、あとの0.5%が問題になる

### ・クーレ種分、共鳴種分、重なり種分：計算機未発達時代の、理論解析の方向にさらなる粗い近似

### 近似ではない(と考えられている)もの

#### ・電子は点電荷：構造が未だ観測されていない

#### ・すべての電子は同じ性質をもち、区別できない。 場の量子論からの帰結。

#### ・電子は上向き、下向きスピンを持つ。 場の量子論からの帰結

## 構造化学 11 回目 中田 Quiz

1. 授業の冒頭、ポイントとしたところを参照しつつ
  - 1.1 平均場近似はどのような近似か、物理的に説明せよ。
  - 1.2 平均場近似はどのような近似か、数学的に説明せよ。
  - 1.3 この近似にはどのような利点があるか、説明せよ
  - 1.4 軌道エネルギーと分子軌道について説明せよ。
2.  $1s$  と  $2s$  軌道はなぜ線形結合を作らないように見えるか。
3.  $2s$  と  $2p_x$ ,  $2p_y$  はなぜ線形結合を作らないか。
4.  $\sigma, \sigma^*$  軌道について適宜絵を書きながら説明せよ
5.  $\pi, \pi^*$  軌道について適宜絵を書きながら説明せよ
6.  $\text{Ne}_2$  について、エネルギーダイヤグラムを書き電子配置を示せ。
7. 上の分子について結合次数は幾つか、磁性を持つかどうか、説明せよ。
8. 感想、要望、質問など(コメント返し率 90%保証)

以上



## 構造化学 11 回目 中田 Quiz 略解

- 1.1. 平均場近似は、一つの電子に着目し、その他の電子のポテンシャルエネルギーを平均化して扱うという近似。
- 1.2. 平均場近似は、 $N$ 電子の波動関数を 1 電子の軌道の  $N$  個の積で書くという近似。
- 1.3. 多電子のシュレーディンガー方程式は解けないし波動関数の次元が高くて、解の解釈がしづらいが、平均場近似を使うと、実用的に解けるようになるし、分子軌道を考えれば良いためわかりやすい。
- 1.4. 平均場近似を使うと  $N$  電子系のシュレーディンガー方程式一本が、1 電子系のシュレーディンガー様方程式  $N$  本となる。その固有エネルギーをエネルギー順位、固有波動関数を分子軌道とよぶ。
2. 軌道エネルギーの差が大きすぎるため。本来は 1s と 2s 軌道は線形結合を作っているが、たとえば 1:1000 の割合で混ざっているため、混ざらないように見える。
3. s 軌道と p 軌道の対称性が違うため、混ざらない
4.  $\sigma$ 、 $\sigma^*$  軌道は、分子軸での任意の回転に対して対称である。分子の midpoint で節を持たない場合は  $\sigma$  軌道(結合性軌道)、分子の midpoint で節を持つ場合は  $\sigma^*$  軌道(非結合性軌道)。図 <https://www.youtube.com/watch?v=cjFFAu6gvRA>, [https://www.youtube.com/watch?v=NmU\\_GFo4G2](https://www.youtube.com/watch?v=NmU_GFo4G2) 参照のこと
5.  $\pi$ 、 $\pi^*$  軌道は、分子軸での  $180^\circ$  の回転に対して対称となる。分子の midpoint で節を持たない場合は  $\pi$  軌道(結合性軌道)、分子の midpoint で節を持つ場合は  $\pi^*$  軌道(非結合性軌道)。図は <https://www.youtube.com/watch?v=keQ7rscEjoU> <https://www.youtube.com/watch?v=juzZO3NEgDw> 参照

6. 下図がエネルギーダイヤグラムとなる。正確には、 $B_2$   $C_2$   $N_2$  では  $3\sigma_g$  が  $1\pi_u$  よりエネルギーが上になる(こんな瑣末なことは覚えなくて良い)。

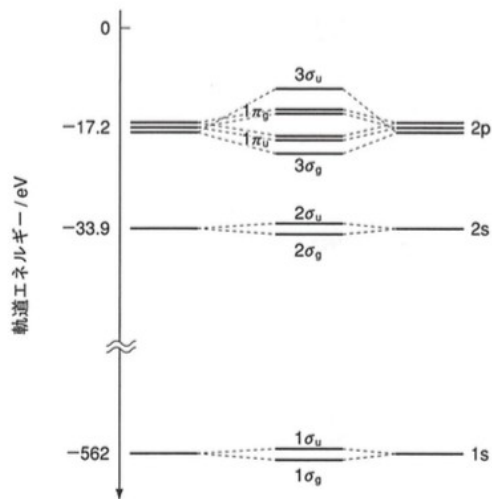


図 9.19 酸素分子の分子軌道の形成

2 個の酸素原子が近づいて、相互作用により原子軌道から分子軌道が形成される。

## 電子配置

7.  $H_2$ ,  $He_2$ ,  $Li_2$ ,  $Be_2$ ,  $B_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $F_2$ ,  $Ne_2$  の結合次数はそれぞれ、1, 0, 1, 0, 1, 2, 3, 2, 1, 0、磁性は  $B_2$   $O_2$  のみもつ。