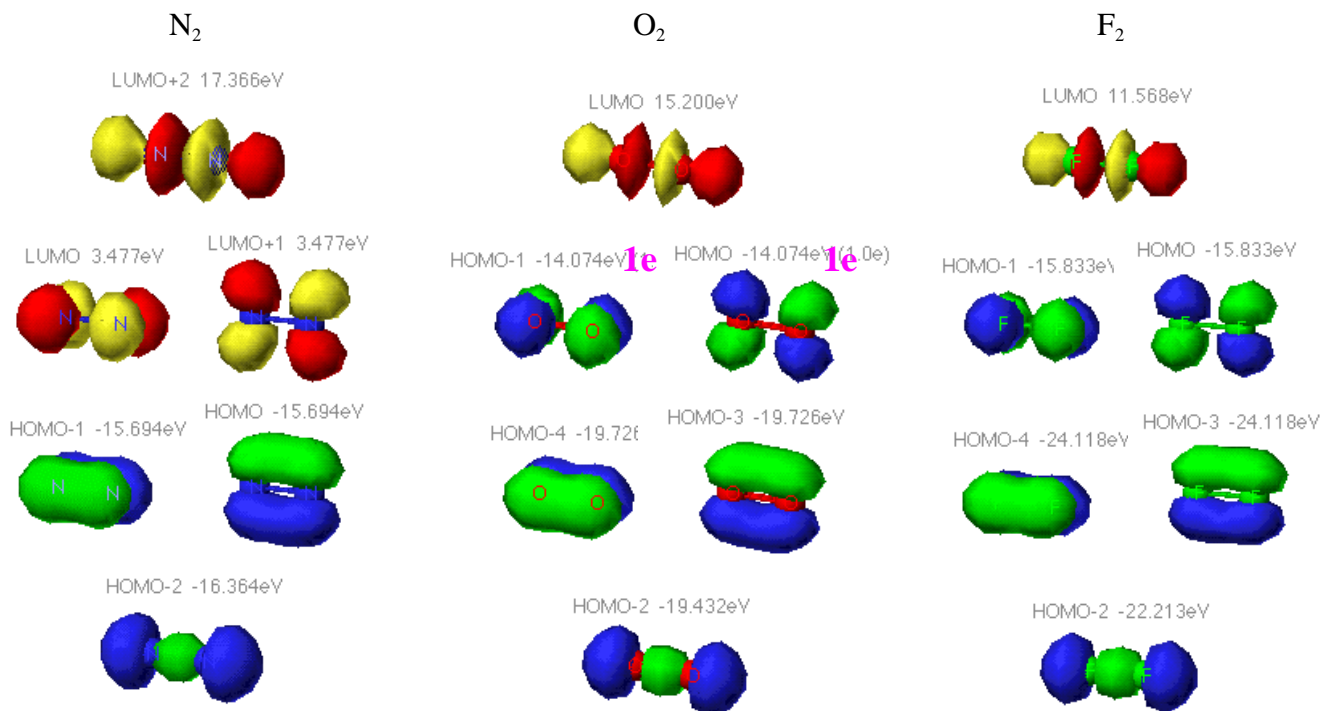
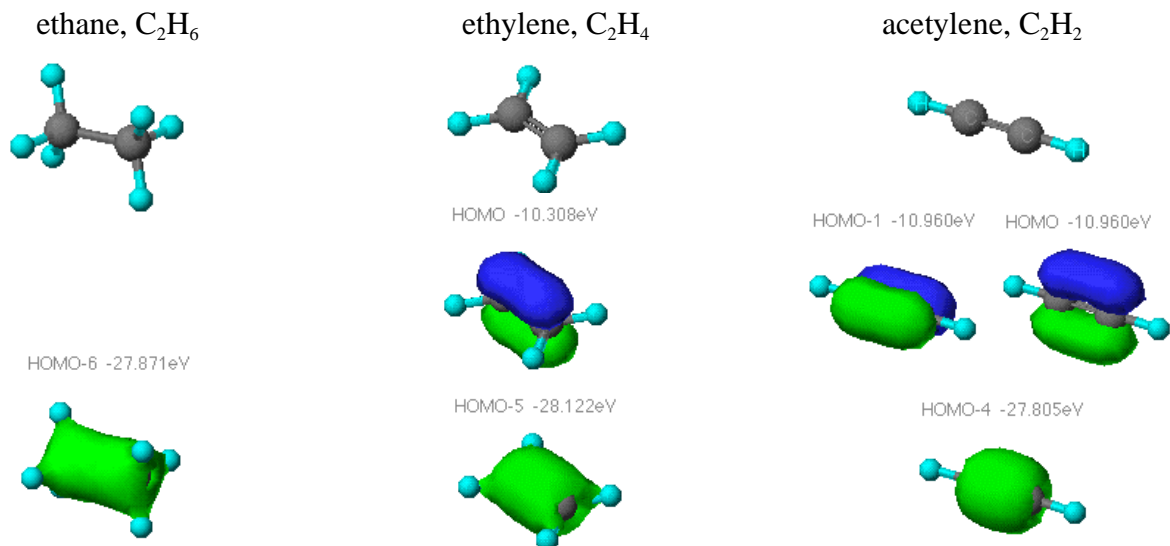


分子軌道の概形とエネルギー準位 (ab initio (非経験的) 3-21G の水準における計算結果)



3-21G という水準はやや初歩的な計算であり、より高精度な計算および実測によれば、 N_2 については軌道と軌道の準位が逆転しているという。一般には結合は結合より強いから、 O_2 や F_2 の軌道準位の序列が正常とみるべきであろう。 O_2 や F_2 の計算結果は実測の序列を正しく反映している。この序列はアセチレンとの比較にとっても好都合である。



反結合軌道の絵は省略したが、それらの概形は容易に予想できるだろう。結合は切断に抵抗するから(結合解離エネルギーをもつから)、エチレンの二重結合は室温では回転しない。アセチレンの C-C 周りの回転や N_2 の N-N 回転は起こらないと考えられるが、実験的に確かめることは難しい。 C_2H_2 と N_2 のように原子が違って電子数が等しいものを「等電子的」と呼び、しばしば電子構造の類似が議論される。例えば、メタン、アンモニア、水は互いに等電子である。なお、この計算と描画は、L 棟学生実験室のものと同等の計算プログラムを用いた。