

(H18 用院試から) 問1 NO および NO⁺の分子軌道は次のように表される。ただし軌道エネルギー準位の高低を < や = で示している。次の問(a), (b)に答えよ。

3

$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_{2px} = \pi_{2py} < \sigma_{2pz} < \pi_{2px}^* = \pi_{2py}^* < \sigma_{2pz}^*$$

(a) NO および NO⁺の電子配置をそれぞれ例にならって示せ。

例: H₂ σ_{1s}^2

(b) NO および NO⁺の結合次数を求めよ。さらにどちらの結合が強いかわ述べよ。

直線分子の軌道対称性

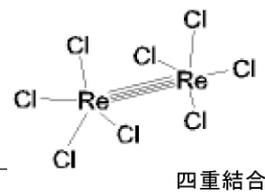
side view	head view	$C_{\infty v}$ 対称種	$D_{\infty h}$ 対称種	慣用名 *=反結合性
[σ軌道]				
		σ	σ_g	s-s σ
		σ	σ_u	s-s σ^*
		σ		s-p σ
		σ	σ_g	p-p σ
		σ	σ_u	p-p σ^*
		σ	σ_g	d-d σ
[π軌道]				
		π	π_u	p-p π
		π	π_g	p-p π^*
		π		p-d π
		π	π_u	d-d π
[δ軌道]				
		δ	δ_g	d-d δ
		δ	δ_u	d-d δ^*

反転 i で符号
 σ_u ungerade (独) 変わる (奇関数)
 =odd (英)
 σ_g gerade (独) 変わらない (偶関数)
 =even (英)

	σ 軌道	π 軌道	δ 軌道
分子軸を含む節面数	0	1	2
λ (l の分子軸への射影)	0	1	2
エネルギー	低	\leftrightarrow	高

cf. 原子軌道の s, p, d, ... ($l = 0, 1, 2, \dots$)
 (*注) σ, δ 軌道では結合性軌道が gerade
 $\leftrightarrow \pi$ 軌道では反結合性軌道が gerade

<高次結合>



ex.) [Re₂Cl₈]²⁻ 四重結合

4つの結合性分子軌道:

(d-d) σ , 2 × (d-d) π , (d-d) δ

電子配置: $\sigma_g^2 \pi_u^4 \delta_g^2$

[問題] Mo₂ 分子は六重結合を持つとされている。
 関係する軌道を図示し、電子配置を示せ。

物質化学講義ノート (三好明, <http://www.frad.t.u-tokyo.ac.jp/~miyoshi/>) から

参考: 基底電子配置 Re (Z = 75): [Xe] 4f¹⁴ 5d⁵ 6s²; Mo (Z = 42): [Kr] 4d⁵ 5s¹