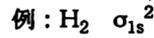


(H18 用院試から) 問1 NO および NO⁺の分子軌道は次のように表される。ただし軌道エネルギー準位の高低を < や = で示している。次の問(a)、(b)に答えよ。

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。



(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述べよ。

直線分子の軌道対称性

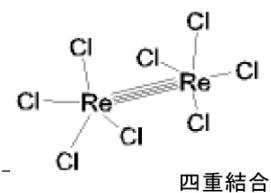
side view	head view	C _{∞v} 対称種	D _{∞h} 対称種	慣用名 *=反結合性
[σ軌道]				
		σ	σ _g	s-s σ
		σ	σ _u	s-s σ*
		σ		s-p σ
		σ	σ _g	p-p σ
		σ	σ _u	p-p σ*
		σ	σ _g	d-d σ
[π軌道]				
		π	π _u	p-p π
		π	π _g	p-p π*
		π		p-d π
		π	π _u	d-d π
[δ軌道]				
		δ	δ _g	d-d δ
		δ	δ _u	d-d δ*

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

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

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

<高次結合>



4つの結合性分子軌道:
 (d-d)_σ, 2 × (d-d)_π, (d-d)_δ
 電子配置: σ_g² π_u⁴ δ_g²

[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。