

### 4.6. 等核二原子分子

等核二原子分子のエネルギー準位 3

c. 準位一覧

図の出典: <http://rikanet2.jst.go.jp/>

Pauli の排他律に基づいてつめてみる。

### 4.6. 等核二原子分子

等核二原子分子トピックス 1

a. He<sub>2</sub>分子は存在するか?

**No!**  
\* Gentryら(1993年) 0.001K付近のHe気体中に He<sub>2</sub>を検出

**Yes!**  
ヘリウム分子イオン(He<sub>2</sub><sup>+</sup>)

図の出典: <http://rikanet2.jst.go.jp/>

He は?

た あるみたい

### 4.6. 等核二原子分子

等核二原子分子トピックス 2

b. 酸素は磁石にくっつくか?

酸素分子

σ\*<sub>2p</sub> — スピン 二小石磁石

π\*<sub>2p</sub> ↑↑ 不対電子

π<sub>2p</sub> ↑↑

σ<sub>2p</sub> ↑↑ 常磁性

σ\*<sub>1s</sub> ↑↑

σ<sub>1s</sub> ↑↑

σ\*<sub>2s</sub> ↑↑

σ<sub>2s</sub> ↑↑

σ\*<sub>1s</sub> ↑↑

σ<sub>1s</sub> ↑↑

(注意: 空気中では ↑↑ と ↑↑ が等量あるため、平均化されて全体としては磁性を失う)

図の出典: <http://rikanet2.jst.go.jp/>

### 4.6. 等核二原子分子

等核二原子分子の性質

分子	構造式	結合次数	結合エネルギーDe(eV)	平衡核間距離Re(nm)
H <sub>2</sub>	H-H	1	4.75	0.074
He <sub>2</sub>		0		安定には存在しない
Li <sub>2</sub>	Li-Li	1	1.11	0.267
Be <sub>2</sub>		0		安定には存在しない
B <sub>2</sub>	B-B	1	2.88	0.159
O <sub>2</sub>	O=O	2	6.25	0.124
N <sub>2</sub>	N≡N	3 最大	9.91	0.109
O <sub>2</sub>	O=O	2	5.18	0.121
F <sub>2</sub>	F-F	1	1.65	0.142
Ne <sub>2</sub>		0		安定には存在しない

結合次数  
[(結合性軌道にある電子数) - (反結合性軌道にある電子数)] ÷ 2

結合次数が大きいほど分子の結合エネルギーが大きく、強い結合を形成する。

図の出典: <http://rikanet2.jst.go.jp/>

計算できるようにしておきましょう。

### 4.7. 光電子スペクトル

分子軌道の性質を知るための有力な方法の一つ

光子(短波長で単色の紫外光)

電子エネルギー分析器

検出器

試料 O<sub>2</sub> or H<sub>2</sub> or He

電場 EEPAD

スペクトル

光電子分光装置の模式図

物質の科学・量子化学(放送大学テキスト)

### 4.7. 光電子スペクトル

窒素分子の光電子スペクトル

イオン化に使われるエネルギーは、自身のエネルギー

上の方で① → 自身のエネルギー ②

図9-16 N<sub>2</sub>の光電子スペクトル。このプロットのピークは種々の分子オービタルから放出された電子によって生じたもの。

マッカーリ・サイモン 物理化学

"電子配置そのもの"を見ている感じ