

問題6

2原子分子について、以下の設問に答えよ。

- (a) 窒素分子の分子軌道のエネルギー準位を概略的に図示し、説明せよ。ただし、窒素分子は基底状態にあるとし、また、電子の入った分子軌道のみを考えればよい。
- (b) 窒素分子の基底状態は一重項であるが、酸素分子の基底状態は三重項である。この理由を説明せよ。
- (c) 窒素分子 (N_2) では陽イオン (N_2^+) になっても結合距離はほとんど変わらないが、酸素分子 (O_2) では陽イオン (O_2^+) になると結合距離はかなり短くなる。この理由を説明せよ。
- (d) 塩素分子 (Cl_2) の結合解離エネルギーは 2.47 eV であるが、塩素分子イオン (Cl_2^+) のそれは 4.4 eV である。後者の結合解離エネルギーの方が大きくなる理由を説明せよ。