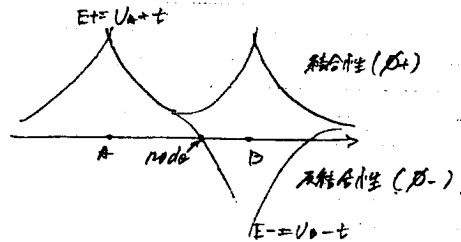


2つの原子間の距離を  $z$ 、 $z=0$  の位置に  $z=0$  未満と  $z>0$  の位置に



$\sigma_+$  の状態は結合性軌道に電子が2つ入り、分子領域に安定化している。  
 $\sigma_-$  の状態は反結合性軌道に電子が2つ入り、分子領域に安定化していない。

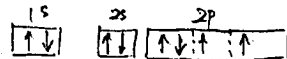
2つの原子間の  $H_2$  分子は結合性軌道に電子が2つ入り、分子領域に安定化している。  
 (安定結合)

### 2 酸素分子の電子状態

$O_2$  分子は16個の電子を持つ。電子は Hund の規則に従い、1原子軌道に1個の電子を占有し、軌道は昇順に入っていく。

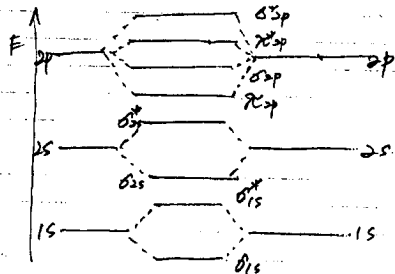


酸素原子を構成する軌道は、2p軌道が3つある。中心に1つの原子軌道と以下の軌道がある。



また、結合性軌道は  $\sigma$  結合と  $\pi$  結合がある。  $\sigma$  結合は結合方向の軌道の重なりが最大になる。  $\pi$  結合は結合方向の軌道の軸と垂直に存在する軌道がある。

また、2つの原子軌道は結合性軌道と反結合性軌道が存在する。  
 2原子結合を考慮して1原子軌道と1原子軌道は存在する。



結合性、反結合性とは同じ軌道に1つ電子しか入らない量子数の違いから生じるものである。

2つの軌道に16個の電子を1原子軌道に1個ずつ配置する。

軌道	$\sigma_{1s}$	$\sigma_{1s}^*$	$\sigma_{2s}$	$\sigma_{2s}^*$	$\pi_{2p}$	$\sigma_{2p}$	$\pi_{2p}^*$	$\sigma_{2p}^*$
電子の数	2	2	2	2	4	2	2	2

また、 $O_2$  は、1つの原子軌道は16個の電子を2つの軌道に1個ずつ配置する。分子領域に安定化している。  $O_2$  分子は安定化している。