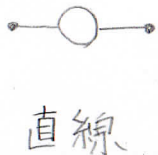


# 三原子分子の分子軌道

## ☆ 三原子分子の取り得る形

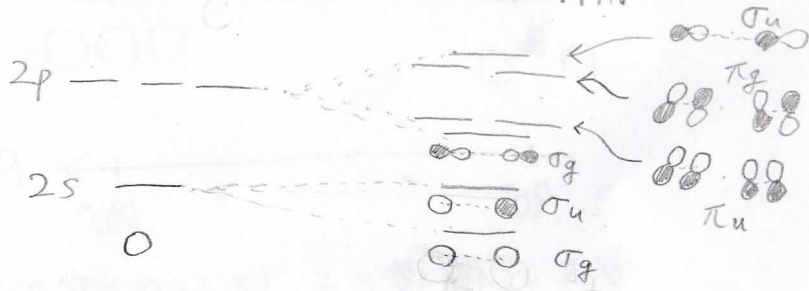


### ポイント

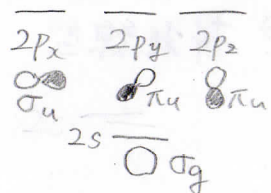
- これらの対称性の違いは分子軌道の違いにつながる
- 分子は総エネルギーの小さい方の構造をとる

## ☆ 直線型分子 (例: CO<sub>2</sub>)

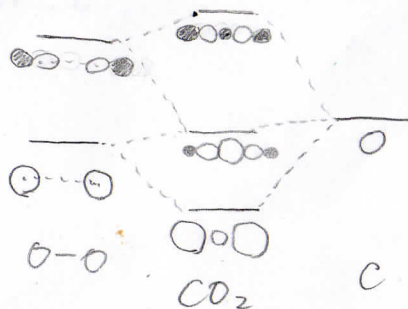
- 外側のO原子2つの相互作用



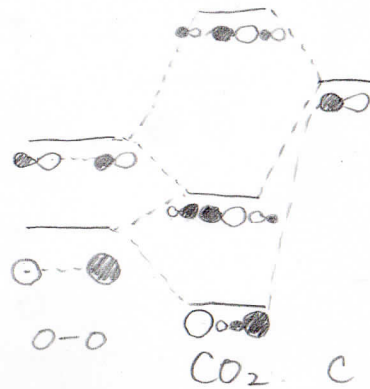
- 中心のC原子



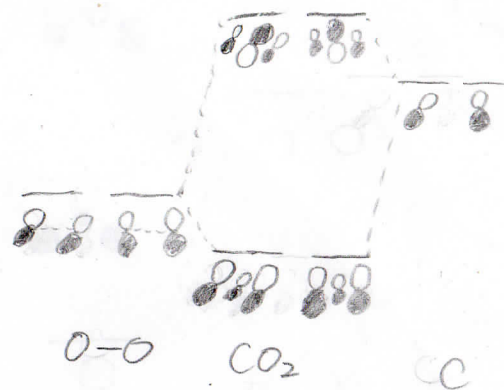
- σ<sub>g</sub>について



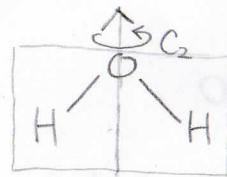
- σ<sub>u</sub>について



- π<sub>u</sub>について



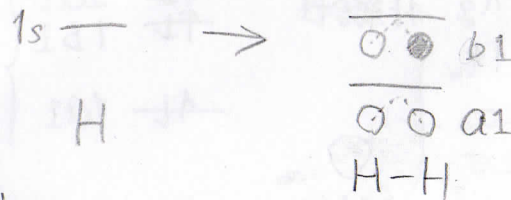
## ☆ 折れ線型分子 (例: H<sub>2</sub>O)



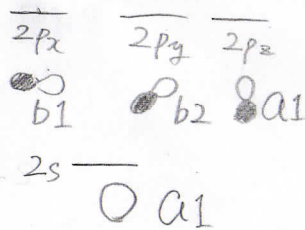
鏡映面 • 180°(C<sub>2</sub>)回転 → 対称 a  
反対称 b

• 鏡映 → 対称 1  
反対称 2

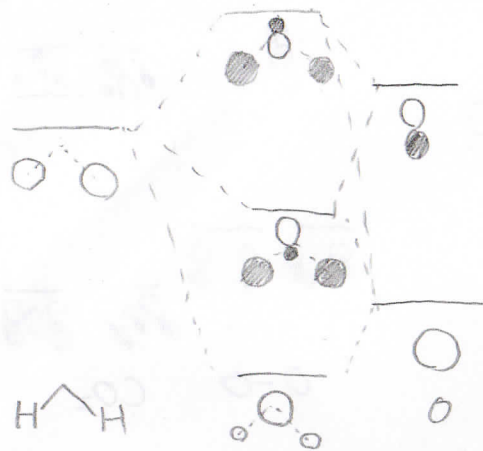
- 外側のH原子2つについて



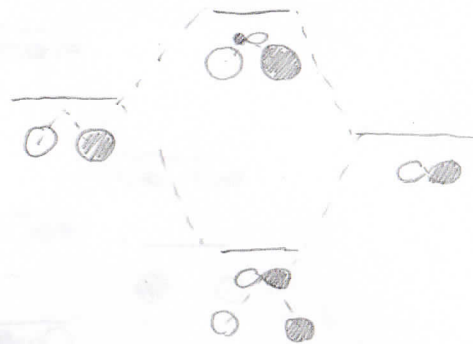
- 中心のO原子について



• a1にフイテ



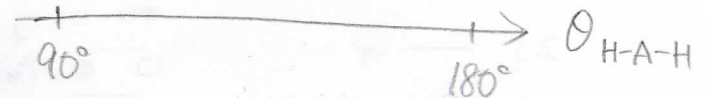
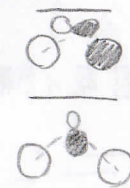
• b1にフイテ



★ ウォルツェ 図 (H-A-Hの結合角とエネルギーの関係)

折れ線

直線



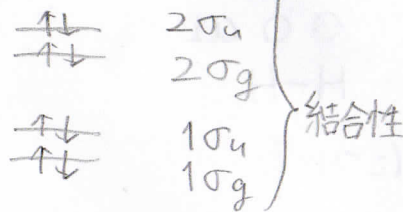
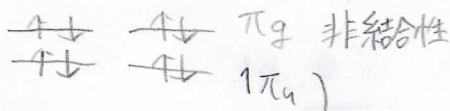
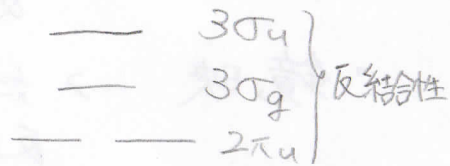
電子の個数により7と5sが安定が決まる

$n < 5 \rightarrow$  直線型

$5 \leq n \leq 8 \rightarrow$  折れ線型

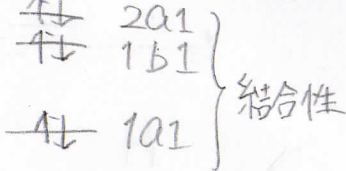
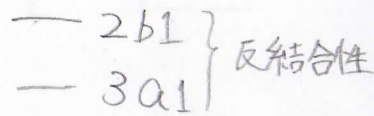
★ 両者をおとめると

• CO<sub>2</sub>



16個

• H<sub>2</sub>O



8個