

生命環境化学特別演習（第8回）

1. 次の①~②のイオンについて、分子軌道図をそれぞれ作成せよ。なお 1s 軌道は省略してもよい。
また、 O_2 の分子軌道図は今回授業のスライド 3 に示している。

- ① O_2^+ (O_2 の一価陽イオン)
- ② O_2^- (O_2 の一価陰イオン)

2. 次の①~③について、以下の(1)~(3)をそれぞれ求めよ。

- ① O_2^+ (O_2 の一価陽イオン)
- ② O_2 (O_2 分子)
- ③ O_2^- (O_2 の一価陰イオン)

(1) 酸素原子間の結合次数

(2) 分子全体のスピン量子数

(分子内にある全電子のスピン量子数の総和の絶対値。これを「スピン角運動量(S)」という。)

(3) スピン多重度

((2)で求めたスピン角運動量(S)に対して、 $2S+1$ で求められる値。

磁場中でエネルギー状態が $2S+1$ 個に分裂することから、磁気共鳴分析によく用いられる。

スピン多重度が n のときを「 n 重項」状態 [$n = 1, 2, 3, \dots$] という。)