

键级

维基百科，自由的百科全书

键序,也称为**键级**,为成键轨道中的电子数与反键轨道中的电子数之差的一半。

若將其寫成數學式則可表示成：

$$b = \frac{n - n'}{2}$$

其中：

- *b*為bond order 為鍵序之意
- *n*為成鍵軌道(bonding orbital)中電子數目
- *n'*為反鍵軌道(antibonding orbital)中電子數目

例如：

- H₂、HF的键序是1；
- O₃的键，是1.5；
- O₂的键序是2；
- N₂、CO的键序是3。

少數的過渡金屬可產生鍵序為 4（四重鍵）、5（五重鍵）、6（六重鍵）的化合物，但相當少見。

特点

對於键序小於4的大多數分子而言，键序越大，分子越稳定。键序等于零时，说明分子能量与形成分子的原子系统的能量相同，即净成键作用没有发生，因此无法形成分子。^[1]

参见

- 键长
- 键能
- 键偶极矩
- 分子轨道理论

参考文献

- 章伟光 (编). §3.3.3. 无机化学 第一版. 北京: 科学出版社. 2015年7月: P60. ISBN 978-7-03-032273-9.

取自“<https://zh.wikipedia.org/w/index.php?title=键级&oldid=62918192>”

本页面最后修订于2020年11月24日 (星期二) 13:16。

本站的全部文字在知识共享 署名-相同方式共享 3.0协议之条款下提供，附加条款亦可能应用。（请参阅使用条款）

Wikipedia®和维基百科标志是维基媒体基金会的注册商标；维基™是维基媒体基金会的商标。

维基媒体基金会是按美国国内税收法501(c)(3)登记的非营利慈善机构。