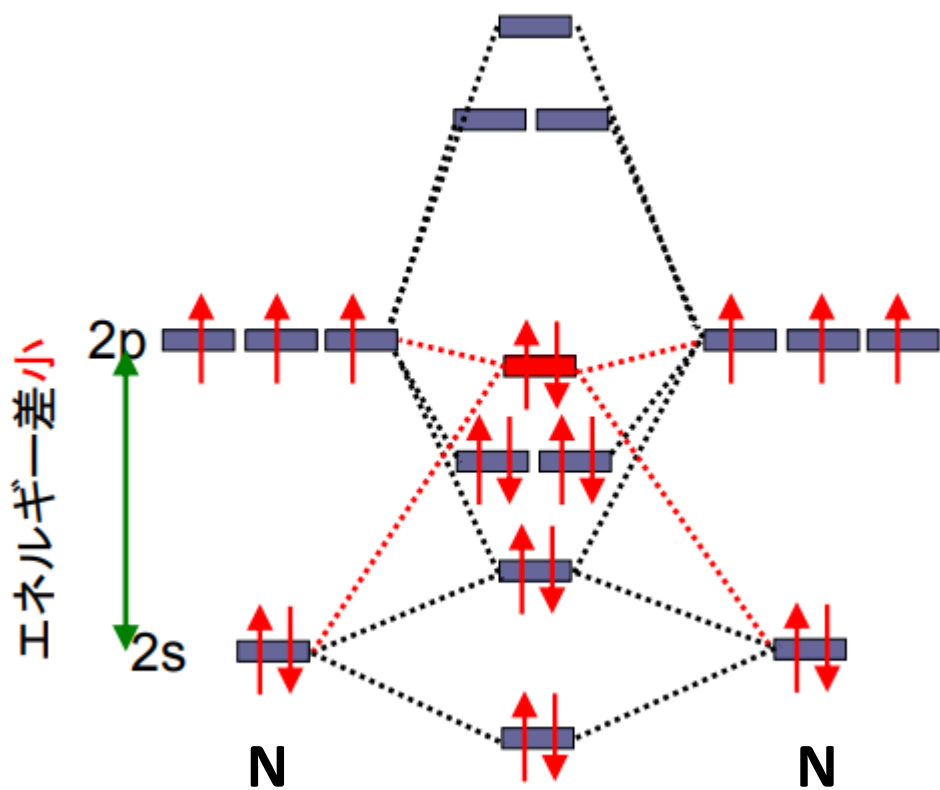


$\text{B}_2$ ,  $\text{C}_2$ ,  $\text{N}_2$ では2sと2p軌道のエネルギー差が小さいので、2sと2p同士の相互作用を考慮する必要がでてくる

$N_2$

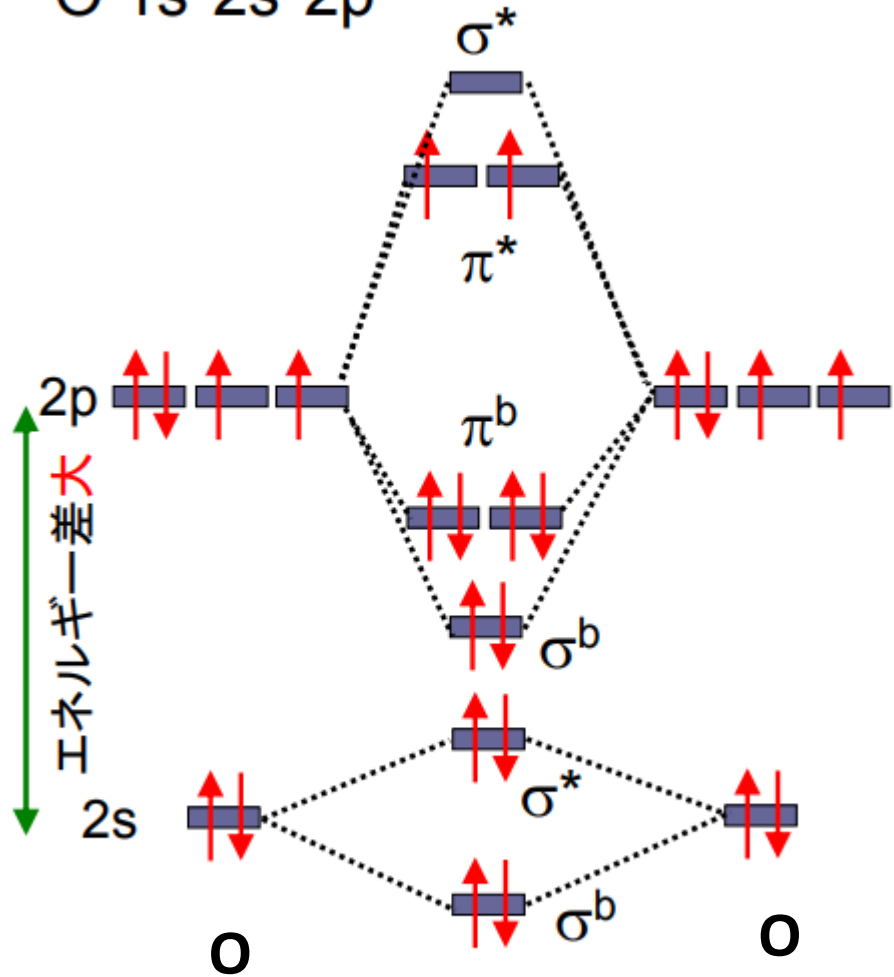
N  $1s^2 2s^2 2p^3$



2s-2pの相互作用あり

$O_2$

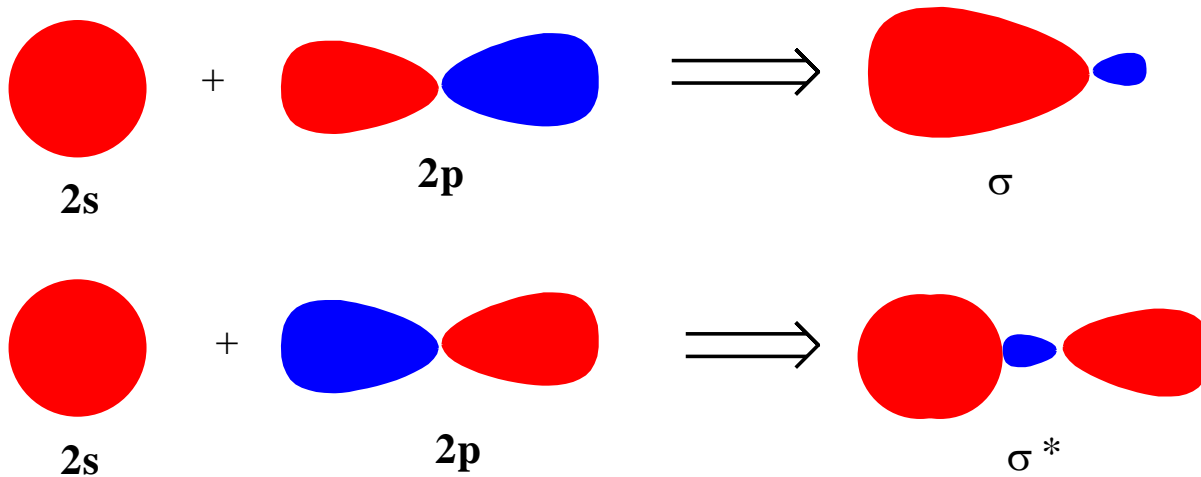
O  $1s^2 2s^2 2p^4$



2s-2pの相互作用なし

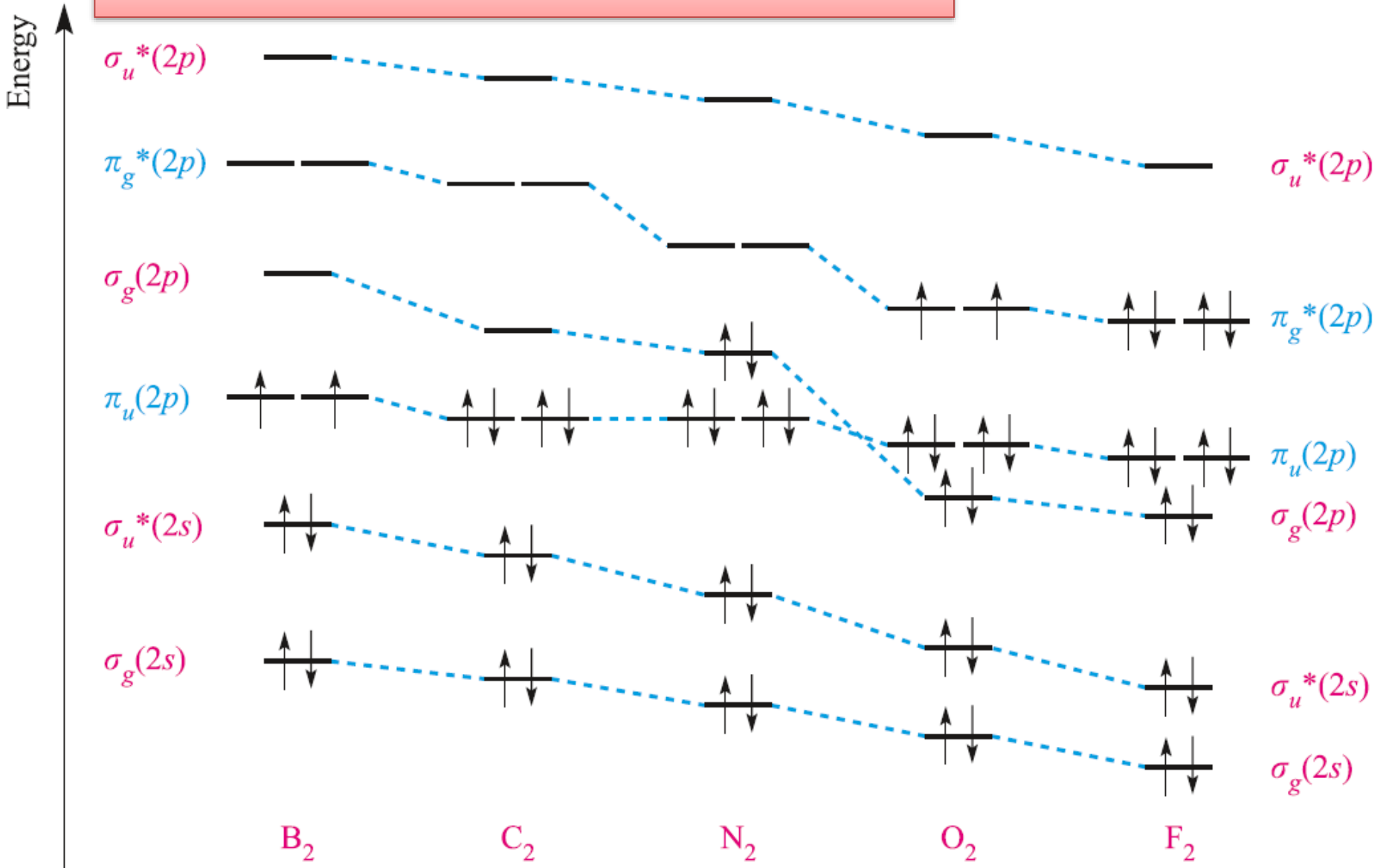
(参考)

=2sと2pの相互作用=



$B_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$ では2sと2p軌道のエネルギー差が小さいので、2sと2p同士の相互作用を考慮する必要がでてくる

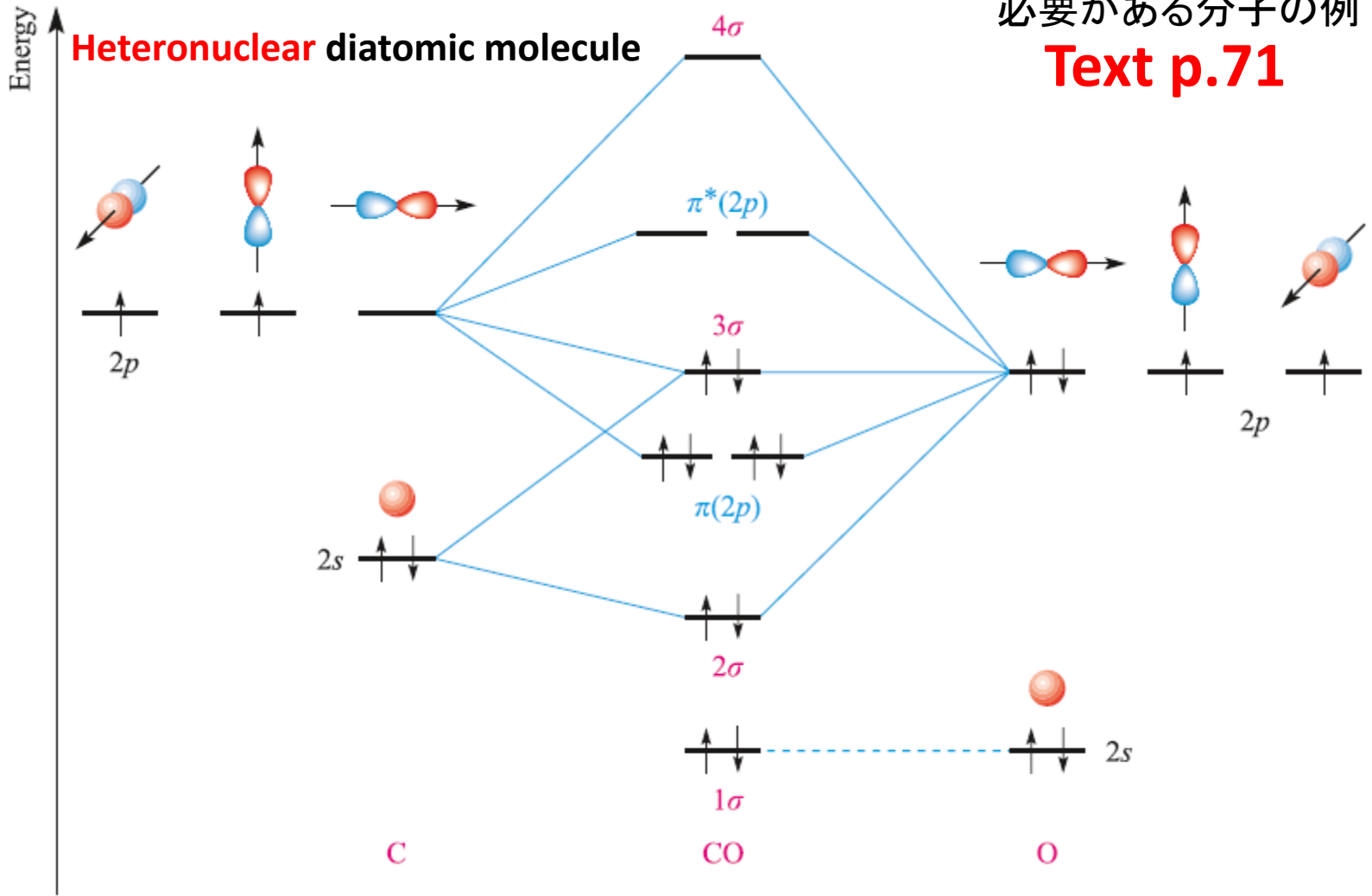
# MOs of Homonuclear Diatomic Molecules



# MO Diagram for CO (carbon monoxide)

sとpの相互作用を考慮する  
必要がある分子の例

**Text p.71**



sとpの相互作用を考慮する  
必要がある分子の例

発展演習 1

炭素Cと窒素Nが結合したCN分子について、図1に、分子軌道法に基づくCN分子の分子軌道エネルギー準位図を示した。

CN分子あるいはシアン化物イオンにおいては、一方の原子の2s軌道と、他方の原子の2p軌道の重なりが無視できないとする。

また、1s軌道同士の重なりは図示していない。また、CおよびNの2p軌道は三重に縮重している。

以下の設問に答えよ。

- (1) 窒素Nの原子軌道のエネルギー準位が、炭素Cのエネルギー準位よりも低い理由を説明せよ。
- (2) 反結合性の $\pi$ 分子軌道は(1)~(6)のどれか。番号で答えよ。
- (3) CN分子は、1価の陰イオン（シアン化物イオン $CN^-$ ）になりやすく、シアン化物イオンは多くの金属と錯体を形成する。CN分子が1価の陰イオン（シアン化物イオン $CN^-$ ）になりやすい理由を分子軌道エネルギー準位図に基づいて説明せよ。

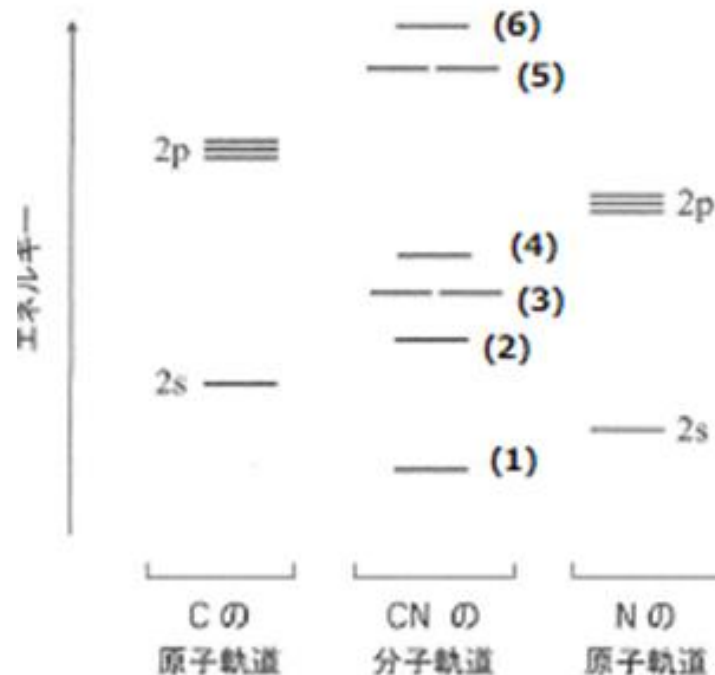
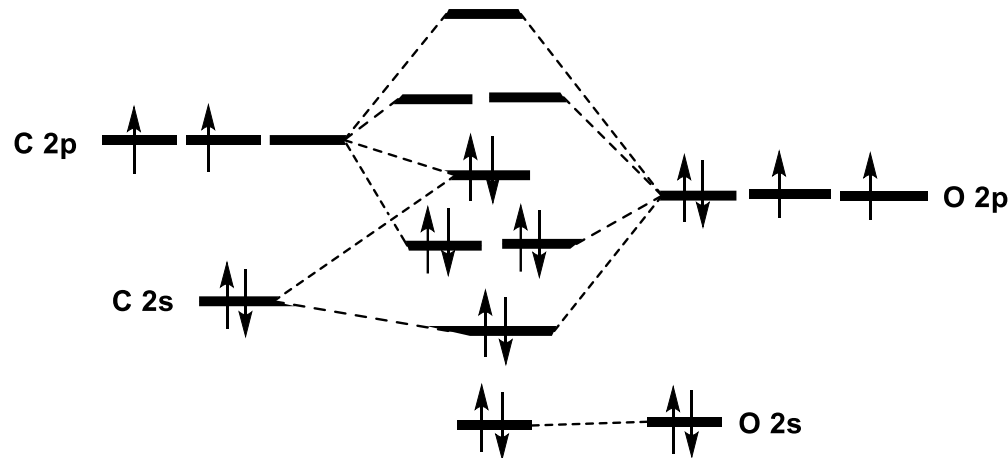


図1

## 発展演習 2

異核二原子分子の分子軌道は一般的に等核二原子分子に比べて複雑であるが，原子番号が近い原子どうしからなる分子では，等核の場合と同じようにして分子軌道を構成することができる．テキストp.70から71には，一酸化炭素の分子軌道エネルギー準位図について解説されている．

これらの説明およびテキストp.71の図3.55（下図）を基本として，以下の問いに答えよ．（実際には，この図とは違うダイアグラムも書けるが，テキストで言及しているように，高度に簡素化した形で考える）

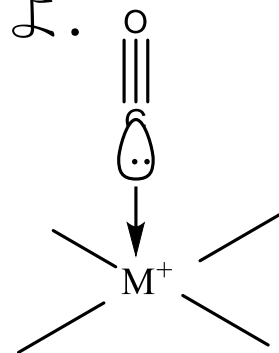


問1 図より導かれる一酸化炭素の結合次数はいくらか  
計算式とともに示せ.

問2 電子配置から, 一酸化炭素に電子を一つ加えた $\text{CO}^-$ の  
安定性を論ぜよ. また,  $\text{CO}^-$ の結合次数を計算式とともに  
示せ.

問3 基底状態の一酸化炭素は磁性を持つか, 持たないか,  
理由とともに答えよ.

問4 一酸化炭素が配位子として機能するとき, ドナー原子  
は酸素原子ではなく炭素原子である. また, 結合様式は右図  
の通り, 直線型配位である. これらの理由を説明せよ.





## (参考) HOMO, LUMO (テキスト p.93)

分子軌道で反応を考えるとき、**HOMO** (最高被占軌道) と **LUMO** (最低空軌道) はキーワードである。電子が入っている分子軌道の中で、最もエネルギーが高い軌道が**HOMO**、電子の入っていない軌道で最もエネルギーの低い軌道を**LUMO**という。分子軌道の中で、特に、**HOMO**と**LUMO**が反応には重要である。**HOMO**の電子が最も反応性が高く、これが反応に使われ、逆に電子を受け取る場合には**LUMO**に受け取ることになる。(テキスト p.93)