

化学概論 Homework08 2019.12.04

(次々回授業開始時に提出)

学生番号:

氏名:

分子をイオン化すると、結合が強まったり弱まったりする。次の (1), (2) において、どちらの結合エネルギーが大きい (安定性が高い) と考えられるか? 理由と共に答えよ。

(1) 窒素分子 N_2 と窒素分子陽イオン N_2^+

(2) 酸素分子 O_2 と酸素分子陽イオン O_2^+

(1) N_2 から N_2^+ へイオン化するときは、電子が占有された分子軌道のうちで最高エネルギーをもつ $2p\sigma$ 軌道の電子が失われる。これは結合性軌道なので、イオン化によって電子が失われると結合は弱まる。よって、結合エネルギーは $N_2 > N_2^+$ 。

(2) O_2 から O_2^+ へイオン化するときは、 $2p\pi^*$ 軌道の電子が失われる。これは反結合性軌道なので、イオン化によって電子が失われると結合は強くなる。よって、結合エネルギーは $O_2 < O_2^+$ 。

【解説】

分子軌道の結合性、反結合性を考える。配布プリントの図 4.9 参照。

この問題の解答は上記で十分だが、電子配置と結合次数を示すと、

$$\begin{array}{ll} N_2 & (1s\sigma)^2(1s\sigma^*)^2(2s\sigma)^2(2s\sigma^*)^2(2p\pi)^4(2p\sigma)^2 & b = \frac{1}{2}(10 - 4) = 3 \\ N_2^+ & (1s\sigma)^2(1s\sigma^*)^2(2s\sigma)^2(2s\sigma^*)^2(2p\pi)^4(2p\sigma)^1 & b = \frac{1}{2}(9 - 4) = 2.5 \\ O_2 & (1s\sigma)^2(1s\sigma^*)^2(2s\sigma)^2(2s\sigma^*)^2(2p\sigma)^2(2p\pi)^4(2p\pi^*)^2 & b = \frac{1}{2}(10 - 6) = 2 \\ O_2^+ & (1s\sigma)^2(1s\sigma^*)^2(2s\sigma)^2(2s\sigma^*)^2(2p\sigma)^2(2p\pi)^4(2p\pi^*)^1 & b = \frac{1}{2}(10 - 5) = 2.5 \end{array}$$

【注】

- N_2 と O_2 では、 $2p\sigma$ と $2p\pi$ の順番が異なる。
(N_2 では $2p\pi$ の方が低エネルギーだが、 O_2 では $2p\sigma$ の方が低エネルギー。図 4.9 参照)
- $2p\pi$ 軌道は等価なものが二つあるので、電子は最大 4 個入る。