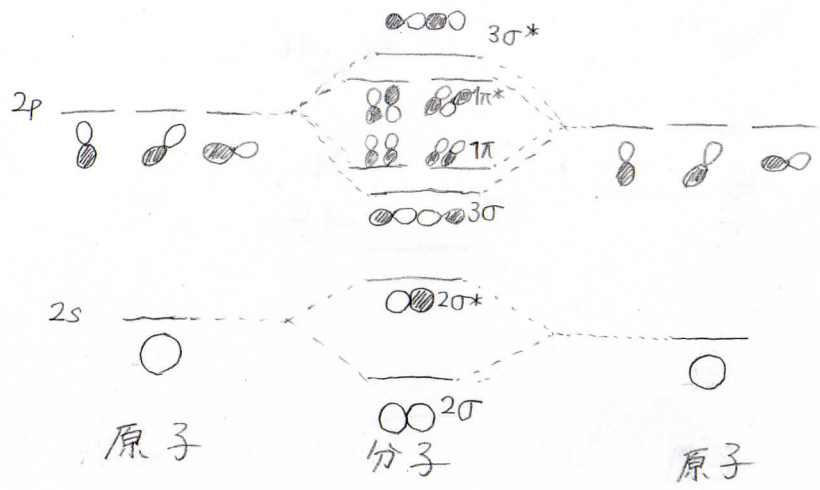


軌道の対称性と相互作用、酸素分子の活性

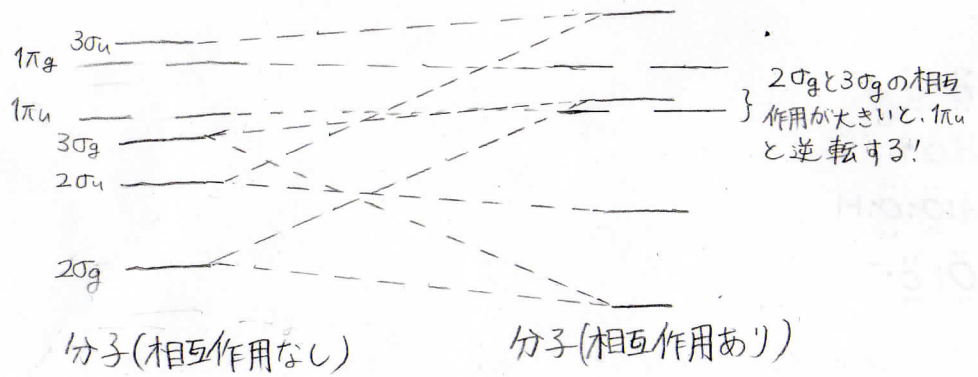
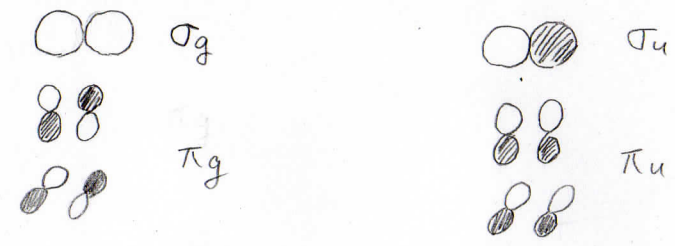
★ 第2周期元素 等核二原子分子 ( $N_2, O_2$  など) の分子軌道



対称性が同じ場合、さらに分子軌道間で相互作用が起こり、より安定な状態を作る

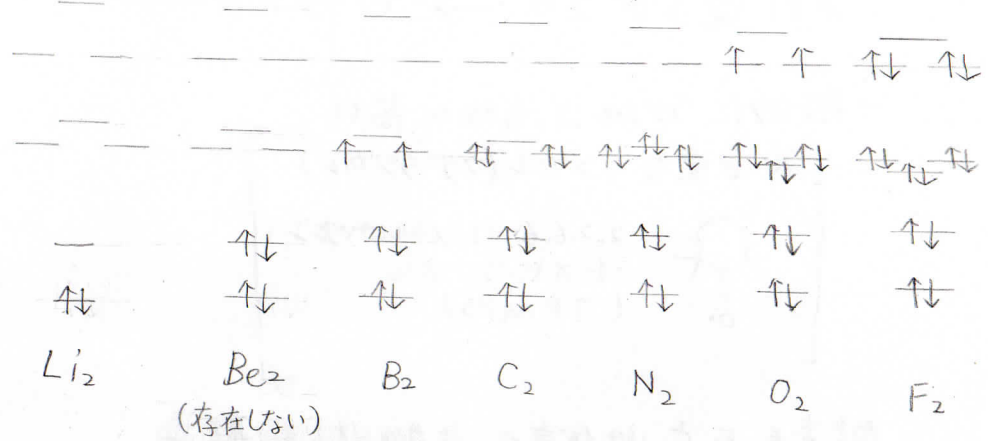
(点)対称 (gerade)

反対称 (ungerade)



原子番号大  $\rightarrow$   $2s$  と  $2p$  のエネルギー差大  $\rightarrow$  相互作用小

★  $Li_2 \sim F_2$  までの分子軌道

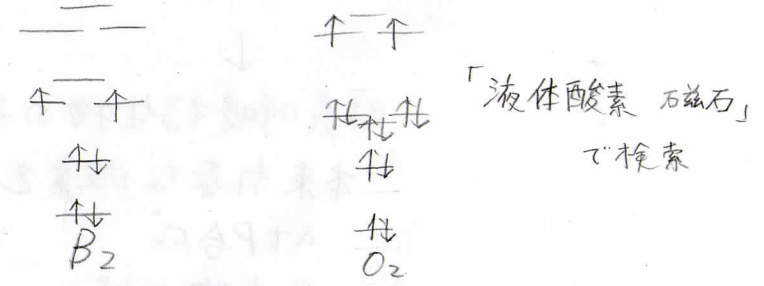


(結合次数) =  $\frac{(\text{結合性軌道にある電子数}) - (\text{反結合性軌道にある電子数})}{2}$

$Be_2$  だけ 0 になる (分子にならずに安定になれない)

★  $B_2, O_2$  の磁性

$B_2, O_2$  では電子のスピンの打ち消されず、分子全体で磁性をもつ  $\rightarrow$  常磁性 (Fe, Co, Ni と同じ)



$Li_2, C_2, N_2, F_2 \rightarrow$  反磁性

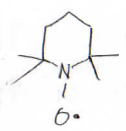
# ☆ 酸素分子の活性

不対電子をもつ化学種 → ラジカル

不対電子が 2つ → ビラジカル

一般的にラジカルは活性が高い

※ 安定なラジカル (フリーラジカル)

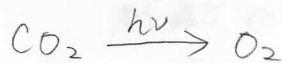


2,2,6,6-テトラメチルピペリジン  
-1-オキソラジカル  
(TEMPO)

酸素も反応性が高く、生物にとって 有毒

約 27 億年前 ツァノバクテリア (藍藻) 繁栄

↳ 酸素を発生させる光合成をする



多くが嫌気呼吸 (酸素以外で呼吸)

の生物だったため、大量絶滅

↓

好気呼吸する生物の繁栄

本来有毒な酸素を逆に利用

ATP合成

老廃物分解

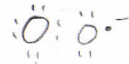
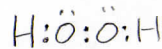
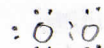
「活性酸素」

・ 一重項酸素

・ ヒドロキシルラジカル

・ 過酸化水素

・ スーパーオキッド



一重項酸素

> 三重項酸素  
活性

