به نام خدا

امتحان میان ترم اول شیمی عمومی ۱ — نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۴

تاریخ آزمون: ۱۳۹۴/۸/۱۲

امتحان شامل ۶ سوال تشریحی است. — $1eV = 1/6\times10^{-19}\ J$

---

سوال ۱- آیا فوتونی با انرژی $6\times10^{-19}$ J می‌تواند اتم هیدروژن را یونیزه کند؟

سوال ۲- تابع موج الکترونی که در یک جعبه‌ی یک بعدی است به این صورت داده شده است:

$$\psi = (2/a)^{\frac{1}{2}} \sin(\frac{4\pi n}{a})$$

الف) با توجه به اینکه می‌دانیم $\hat{H}\psi = E\psi$ انرژی این الکترون را حساب کنید.

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8m\pi^2}\times\frac{d^2}{dx^2}$$

ب) اختلاف انرژی الکترون در این تراز و در پایدارترین تراز آن را برحسب $\frac{h^2}{8ma^2}$ حساب کنید.

سوال ۳- ساختار فضایی $XeF_4^+$ را بر اساس نظریه‌ی VSEPR رسم کنید. دلیل مستدل بیاورید.

سوال ۴- سه مولکول $SF_4$ و $SnCl_2$ و $CH_2O$ (اتم کربن اتم مرکزی است) را در نظر بگیرید. هیبریداسیون و ساختار فضایی هر یک را بر اساس نظریه‌ی پیوند ظرفیت به دست آورید.

سوال ۵- از واکنش ۱۵/۰ گرم $Al_2S_3$ و ۱۰/۰ گرم آب چه مقدار $H_2S$ به دست می‌آید؟ فرض کنید بازده واکنش کامل (۱۰۰٪) است. (در جواب خود ارقام با معنی را لحاظ کنید)

$$Al_2S_3(s) + 6H_2O(l) \longrightarrow 3H_2S(g) + 2Al(OH)_3(s)$$

سوال ۶- الف) در واکنش بین $CN^-$ و $H^+$ برای تشکیل HCN ($H^+ + CN^- \rightarrow HCN$) $CN^-$ از کدام سر خود به $H^+$ متصل می‌شود؟ دلیل مستدل بیاورید.

ب) اوربیتال مولکولی $CN^-$ را رسم کنید.

# The Periodic Table of the Elements

| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1<br>**H**<br>Hydrogen<br>1.00794 | | | | | | | | | | | | | | | | | 2<br>**He**<br>Helium<br>4.003 |
| 3<br>**Li**<br>Lithium<br>6.941 | 4<br>**Be**<br>Beryllium<br>9.012182 | | | | | | | | | | | 5<br>**B**<br>Boron<br>10.811 | 6<br>**C**<br>Carbon<br>12.0107 | 7<br>**N**<br>Nitrogen<br>14.00674 | 8<br>**O**<br>Oxygen<br>15.9994 | 9<br>**F**<br>Fluorine<br>18.9984032 | 10<br>**Ne**<br>Neon<br>20.1797 |
| 11<br>**Na**<br>Sodium<br>22.989770 | 12<br>**Mg**<br>Magnesium<br>24.3050 | | | | | | | | | | | 13<br>**Al**<br>Aluminum<br>26.981538 | 14<br>**Si**<br>Silicon<br>28.0855 | 15<br>**P**<br>Phosphorus<br>30.973761 | 16<br>**S**<br>Sulfur<br>32.066 | 17<br>**Cl**<br>Chlorine<br>35.4527 | 18<br>**Ar**<br>Argon<br>39.948 |
| 19<br>**K**<br>Potassium<br>39.0983 | 20<br>**Ca**<br>Calcium<br>40.078 | 21<br>**Sc**<br>Scandium<br>44.955910 | 22<br>**Ti**<br>Titanium<br>47.867 | 23<br>**V**<br>Vanadium<br>50.9415 | 24<br>**Cr**<br>Chromium<br>51.9961 | 25<br>**Mn**<br>Manganese<br>54.938049 | 26<br>**Fe**<br>Iron<br>55.845 | 27<br>**Co**<br>Cobalt<br>58.933200 | 28<br>**Ni**<br>Nickel<br>58.6934 | 29<br>**Cu**<br>Copper<br>63.546 | 30<br>**Zn**<br>Zinc<br>65.39 | 31<br>**Ga**<br>Gallium<br>69.723 | 32<br>**Ge**<br>Germanium<br>72.61 | 33<br>**As**<br>Arsenic<br>74.92160 | 34<br>**Se**<br>Selenium<br>78.96 | 35<br>**Br**<br>Bromine<br>79.904 | 36<br>**Kr**<br>Krypton<br>83.80 |
| 37<br>**Rb**<br>Rubidium<br>85.4678 | 38<br>**Sr**<br>Strontium<br>87.62 | 39<br>**Y**<br>Yttrium<br>88.90585 | 40<br>**Zr**<br>Zirconium<br>91.224 | 41<br>**Nb**<br>Niobium<br>92.90638 | 42<br>**Mo**<br>Molybdenum<br>95.94 | 43<br>**Tc**<br>Technetium<br>(98) | 44<br>**Ru**<br>Ruthenium<br>101.07 | 45<br>**Rh**<br>Rhodium<br>102.90550 | 46<br>**Pd**<br>Palladium<br>106.42 | 47<br>**Ag**<br>Silver<br>107.8682 | 48<br>**Cd**<br>Cadmium<br>112.411 | 49<br>**In**<br>Indium<br>114.818 | 50<br>**Sn**<br>Tin<br>118.710 | 51<br>**Sb**<br>Antimony<br>121.760 | 52<br>**Te**<br>Tellurium<br>127.60 | 53<br>**I**<br>Iodine<br>126.90447 | 54<br>**Xe**<br>Xenon<br>131.29 |
| 55<br>**Cs**<br>Cesium<br>132.90545 | 56<br>**Ba**<br>Barium<br>137.327 | 57<br>**La**<br>Lanthanum<br>138.9055 | 72<br>**Hf**<br>Hafnium<br>178.49 | 73<br>**Ta**<br>Tantalum<br>180.9479 | 74<br>**W**<br>Tungsten<br>183.84 | 75<br>**Re**<br>Rhenium<br>186.207 | 76<br>**Os**<br>Osmium<br>190.23 | 77<br>**Ir**<br>Iridium<br>192.217 | 78<br>**Pt**<br>Platinum<br>195.078 | 79<br>**Au**<br>Gold<br>196.96655 | 80<br>**Hg**<br>Mercury<br>200.59 | 81<br>**Tl**<br>Thallium<br>204.3833 | 82<br>**Pb**<br>Lead<br>207.2 | 83<br>**Bi**<br>Bismuth<br>208.98038 | 84<br>**Po**<br>Polonium<br>(209) | 85<br>**At**<br>Astatine<br>(210) | 86<br>**Rn**<br>Radon<br>(222) |
| 87<br>**Fr**<br>Francium<br>(223) | 88<br>**Ra**<br>Radium<br>(226) | 89<br>**Ac**<br>Actinium<br>(227) | 104<br>**Rf**<br>Rutherfordium<br>(261) | 105<br>**Db**<br>Dubnium<br>(262) | 106<br>**Sg**<br>Seaborgium<br>(263) | 107<br>**Bh**<br>Bohrium<br>(262) | 108<br>**Hs**<br>Hassium<br>(265) | 109<br>**Mt**<br>Meitnerium<br>(266) | 110<br><br>(269) | 111<br><br>(272) | 112<br><br>(277) | 113 | 114 | | | | |

| | | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 58<br>**Ce**<br>Cerium<br>140.116 | 59<br>**Pr**<br>Praseodymium<br>140.90765 | 60<br>**Nd**<br>Neodymium<br>144.24 | 61<br>**Pm**<br>Promethium<br>(145) | 62<br>**Sm**<br>Samarium<br>150.36 | 63<br>**Eu**<br>Europium<br>151.964 | 64<br>**Gd**<br>Gadolinium<br>157.25 | 65<br>**Tb**<br>Terbium<br>158.92534 | 66<br>**Dy**<br>Dysprosium<br>162.50 | 67<br>**Ho**<br>Holmium<br>164.93032 | 68<br>**Er**<br>Erbium<br>167.26 | 69<br>**Tm**<br>Thulium<br>168.93421 | 70<br>**Yb**<br>Ytterbium<br>173.04 | 71<br>**Lu**<br>Lutetium<br>174.967 |
| 90<br>**Th**<br>Thorium<br>232.0381 | 91<br>**Pa**<br>Protactinium<br>231.03588 | 92<br>**U**<br>Uranium<br>238.0289 | 93<br>**Np**<br>Neptunium<br>(237) | 94<br>**Pu**<br>Plutonium<br>(244) | 95<br>**Am**<br>Americium<br>(243) | 96<br>**Cm**<br>Curium<br>(247) | 97<br>**Bk**<br>Berkelium<br>(247) | 98<br>**Cf**<br>Californium<br>(251) | 99<br>**Es**<br>Einsteinium<br>(252) | 100<br>**Fm**<br>Fermium<br>(257) | 101<br>**Md**<br>Mendelevium<br>(258) | 102<br>**No**<br>Nobelium<br>(259) | 103<br>**Lr**<br>Lawrencium<br>(262) |

1995 IUPAC masses and Approved Names from http://www.chem.qmw.ac.uk/iupac/AtWt/
masses for 107-111 from C&EN, March 13, 1995, p. 35
112 from http://www.gsi.de/z112e.html

به نام خدا

پاسخ تشریحی به آزمون میان ترم اول شیمی عمومی ۱ (۹۴/۸/۱۲)

ص ۱

**پاسخ به سؤال ①** باید انرژی یونش هیدروژن در حالت پایه را حساب کنیم. اگر انرژی فوتون بزرگتر از انرژی یونش یا مساوی آن باشد ($E_{فوتون} \geq IE_{(H)}$) یونش صورت می‌گیرد. در غیر اینصورت ($E_{فوتون} < IE_{(H)}$) یونش صورت نمی‌گیرد.

با توجه به رابطه‌ای که بور برای انرژی تراز‌های گونه‌های تک الکترونی به دست آورده است، می‌دانیم:

$$E_n = -۱۳٫۶ \frac{Z^۲}{n^۲}\ ev \Rightarrow \Delta E = \left[-۱۳٫۶ Z^۲ \left(\frac{۱}{n_۲^۲} - \frac{۱}{n_۱^۲}\right)\right] ev$$

می‌دانیم که در اتم هیدروژن $Z=۱$ و حالت پایه‌ی آن $n=۱$ است. انرژی یونش هیدروژن انرژی انتقال الکترون از تراز $n=۱$ به تراز $n=\infty$ است پس داریم:

$$IE = \Delta E_{۱\to\infty} = -۱۳٫۶ ev \times \left(\frac{۱}{\infty} - \frac{۱}{۱}\right) = ۱۳٫۶ ev$$

$$\Rightarrow IE = ۱۳٫۶ ev \times \frac{۱٫۶\times۱۰^{-۱۹}\ J}{۱\ ev} = ۲٫۱۷۶\times۱۰^{-۱۸}\ J > ۶\times۱۰^{-۱۹}\ J$$

با توجه به اینکه انرژی یونش بیشتر از انرژی فوتون است، فوتون توانایی کندن الکترون را ندارد و اتم H یونیزه نمی‌شود پس جواب سؤال خیر است.

---

**پاسخ به سؤال ②** قسمت الف:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\left[(\frac{۲}{a})^{\frac{۱}{۲}} \sin(\frac{۴\pi x}{a})\right]}{dx} = (\frac{۲}{a})^{\frac{۱}{۲}} \times \frac{۴\pi}{a} \cos(\frac{۴\pi x}{a}) \quad (I)$$

$$\frac{d^۲\psi}{dx^۲} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) \overset{(I)}{=} \frac{d\left[(\frac{۲}{a})^{\frac{۱}{۲}} \times \frac{۴\pi}{a} \cos(\frac{۴\pi x}{a})\right]}{dx} = (\frac{۲}{a})^{\frac{۱}{۲}} (\frac{۴\pi}{a})^۲ \times (-\sin(\frac{۴\pi x}{a}))$$

$$= -(\frac{۴\pi}{a})^۲ \psi \quad (II)$$

$$\hat{H}\psi = \frac{-\hbar^۲}{۸\pi^۲ m} \times \frac{d^۲\psi}{dx^۲} \overset{(II)}{=} \frac{-\hbar^۲}{۸m\pi^۲} \times \left(-(\frac{۴\pi}{a})^۲ \psi\right) = \frac{\hbar^۲}{۸\pi^۲ m} \times \frac{۱۶\pi^۲}{a^۲}\psi = \frac{۲\hbar^۲}{ma^۲}\psi \quad (III)$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \overset{(III)}{\Longrightarrow} \frac{۲\hbar^۲}{ma^۲}\psi = E\psi \Longrightarrow \boxed{E = \frac{۲\hbar^۲}{ma^۲}}$$

**پاسخ به سؤال ۲ قسمت ب:**

می دانیم که حالت کلی تابع موج برای ذره در جعبه به این صورت است: $\psi = (\frac{2}{a})^{\frac{1}{2}} \sin(\frac{n\pi x}{a})$

و حالت کلی انرژی برای ذره در جعبه به این صورت است: $E_n = \frac{n^2h^2}{8ma^2}$

پس نتیجه می گیریم که در قسمت (الف) n برابر ۴ است. پایدارترین حالت که کمترین انرژی را دارد $n=1$ است.

اکنون می توانیم اختلاف انرژی قسمت (الف) و پایدارترین حالت را حساب کنیم.

$$E_4 - E_1 = \frac{2h^2}{ma^2} - \frac{1^2 \times h^2}{8ma^2} = \frac{h^2}{8ma^2}(16-1) = 15 \times \frac{h^2}{8ma^2}$$

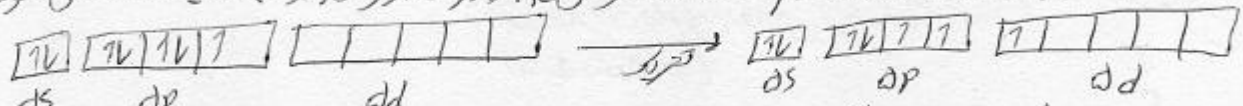
پس جواب برحسب $\frac{h^2}{8ma^2}$ برابر $15$ است.

**پاسخ به سؤال ۳** باید ابتدا ساختار لوییس $XeF_n^+$ را رسم کنیم تا بتوانیم در مورد ساختار فضایی آن اظهار نظر کنیم:

با توجه به اینکه F نمی تواند اتم مرکزی باشد پس Xe اتم مرکزی است.

تعداد الکترون ظرفیت $= 8 + 3\times7 - 1 = 28$

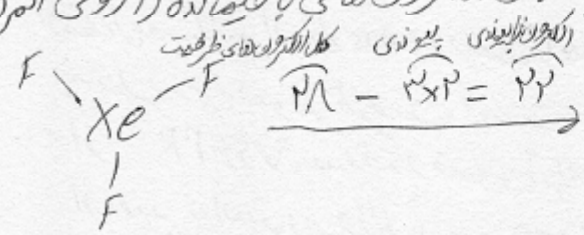
اگر بار مثبت را به Xe بدهیم ساختار الکترونی Xe (برای برقراری پیوند) به این حالت می شود:

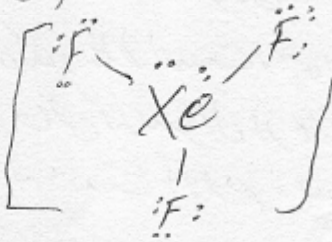



ساختار الکترونی $Xe^+$ در حالت پایه

ساختار الکترونی $Xe^+$ برانگیخته

اکنون ابتدا پیوندهای اولیه را رسم می کنیم سپس الکترون های باقیمانده را روی اتم ها قرار می دهیم.




حول Xe ۵ جفت الکترون وجود دارد پس ساختار کل جفت الکترون ها نسبت به هم دو هرمی مثلثی است ولی ساختار فضایی گونه (که فقط موقعیت جفت های پیوندی است) وقتی مشخص می شود که بفهمیم هر کدام از دو زوج ناپیوندی موقعیت محوری را انتخاب می کنند یا استوایی.

(ادامه ی پاسخ به سؤال ۳ در صفحه ی بعد)

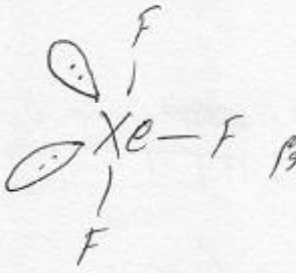
می دانیم که سه حالت برای این دو زوج ناپیوندی وجود دارد:

حالت (۱): هر دو محوری - حالت (۲): هر دو استوایی - حالت (۳): یکی محوری یکی استوایی

حال باید دافعه‌ها را براساس نظریه‌ی VSEPR برای هر سه حالت بررسی کنیم.

براساس قواعد VSEPR زاویه‌های ۱۲۰° و ۱۸۰° را در نظر نمی‌گیریم و فقط تعداد زاویه‌های ۹۰° را در نظر می‌گیریم.

از بررسی دافعه‌ی lp - lp (زوج ناپیوندی - زوج ناپیوندی) شروع می‌کنیم چون بر اساس VSEPR زوج های ناپیوندی که برعکس زوج های پیوندی تنها در حد یک هسته اند آزادترند و دافعه‌ی بیشتری را ایجاد می‌کنند. ساختار (۳) به دلیل داشتن یک زاویه‌ی lp-lp برابر با ۹۰° از دو ساختار (۱) و (۲) که زاویه‌ی ۹۰° در lp - lp ندارند ناپایدارتر است پس در همین ابتدا خط می‌خورد. برای مقایسه‌ی دو ساختار (۱) و (۲) تعداد زاویه‌های ۹۰° در bp - lp (جفت پیوندی - جفت ناپیوندی) را می‌شماریم که پس از lp-lp از اهمیت زیادی برخوردار است. در ساختار (۱) ۶ زاویه‌ی ۹۰ درجه‌ی bp-lp وجود دارد در حالی که در ساختار (۲) فقط ۴ زاویه‌ی ۹۰ درجه‌ی bp-lp وجود دارد پس نتیجه می‌گیریم که ساختار (۲) پایدارترین حالت است و شکل $XeF_2^+$ به آن صورت است. پس ساختار فضایی $XeF_2^+$ و شکل است




(جفت الکترون ها برای روشن تر شدن مفهوم کشیده نشده اند)

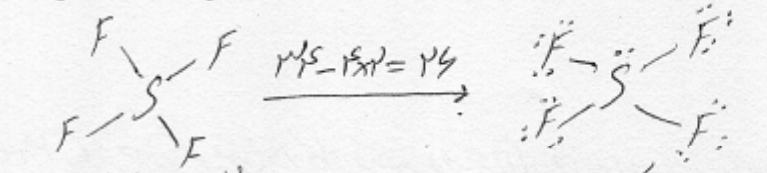
* پی نوشت: اگر برای نشان دادن اینکه جفت الکترون ها در موقعیت استوایی را اشغال می‌کنند از قاعده‌ی بنت استفاده کنید غلط است. چون قاعده‌ی بنت مربوط به نظریه‌ی پیوند ظرفیت است. در حالی که سوال از ما خواسته که با استفاده از VSEPR ساختار فضایی $XeF_2^+$ را به دست آوریم. پس در جوابمان نباید از هیبریداسیون و نظریه‌ی VB استفاده کنیم.

**پاسخ به سوال ۴** ابتدا ساختار لوییس این ترکیبات را تعیین می کنیم:

$SF_4$: باتوجه به اینکه F نمی تواند اتم مرکزی باشد S اتم مرکزی است. ساختار الکترونی S برای برقراری پیوند به این صورت است

ساختار الکترونی S در حالت پایه — ساختار الکترونی S در حالت برانگیخته

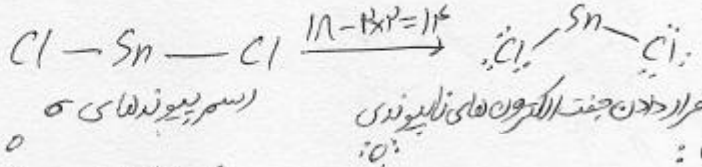
تعداد الکترون های ظرفیت $= 6 + 4 \times 7 = 34$




رسم پیوندهای σ — قرار دادن الکترون های ناپیوندی

$SnCl_2$:

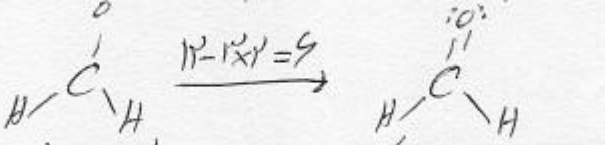
تعداد الکترون های ظرفیت $= 4 + 2 \times 7 = 18$




رسم پیوندهای σ — قرار دادن جفت الکترون های ناپیوندی

$CH_2O$:

تعداد الکترون ظرفیت $= 4 + 2 \times 1 + 6 = 12$

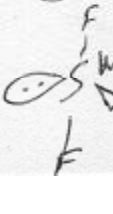



رسم پیوندهای σ — قرار دادن جفت الکترون های ناپیوندی و پیوند π

حالا باتوجه به ساختار های لوییس هیبریداسیون و ساختار فضایی را تعیین می کنیم:

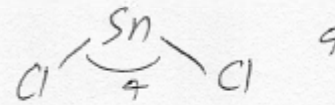
$SF_4$: حول S در کل ۵ زوج الکترون پیوندی و ناپیوندی وجود دارد پس هیبریداسیون آن $sp^3d$ است. ساختار فضایی این هیبریداسیون دوهرمی مثلثی است ولی این مولکول یک زوج ناپیوندی دارد و بر اساس قاعده ی بنت می دانیم که هیبریداسیون $sp^3d$ از دو هیبریداسیون $sp^2$ و $pd$ تشکیل شده است و اتم های F که بسیار الکترونگاتیو ند برای پر کردن اوربیتال های الکترونیگاتیو $pd$ (به علت خصلت d کمتر) اولویت دارند پس هر دو موقعیت محوری توسط F ها پر می شود. همچنین جفت الکترون های ناپیوندی که کاملا الکترونیگاتیو هستند وارد اوربیتال های $sp^2$ می شوند که به علت خصلت بیشتر S الکترونگاتیوی بالایی دارند.

پس نتیجه می گیریم ساختار $SF_4$ چهار وجهی دارهم پیچیده است.

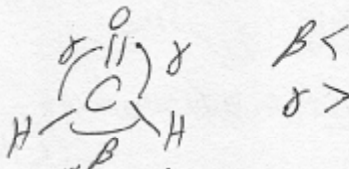


ادامه‌ی پاسخ سؤال ۴-

$SnCl_2$ : در کل سه جفت الکترون پیوندی و ناپیوندی اطراف Sn وجود دارد پس هیبریداسیون آن $sp^2$ است. هیبریداسیون $sp^2$ ساختار مثلثی مسطح دارد اما حول Sn یک جفت الکترون ناپیوندی هم وجود دارد که باعث می‌شود ساختار فضایی آن خمیده باشد. البته زاویه‌ی Cl-Sn-Cl به‌دلیل دافعه‌ی زیادتر جفت ناپیوندی کمتر از زاویه‌ی ایده‌آل ساختار مثلثی (۱۲۰°) است.




$CH_2O$ : حول کربن در کل سه زوج الکترون پیوندی σ وجود دارد پس هیبریداسیون آن $sp^2$ است و ساختار آن مثلث مسطح است البته به علت دافعه‌ی بیشتر پیوند دوگانه (به علت وجود پیوند π) زاویه‌ها کمی با حالت ایده‌آل مسطح مثلثی که ۱۲۰° است تفاوت دارند.




---

**پاسخ به سؤال ۵** ابتدا باید واکنشگر محدودکننده را مشخص کنیم. مول واکنش‌دهنده را به ازای ۱۰ گرم از $H_2O$ و ۱۰ گرم از $Al_2S_3$ حساب می‌کنیم و مول واکنش‌دهنده برای هر کدام که کمتر باشد آن ماده واکنشگر محدودکننده است.

جرم مولی $H_2O$ $= 2\times1 + 16 = 18\ g/mol$

جرم مولی $Al_2S_3$ $= 2\times27 + 3\times32/066 = 150/198\ g/mol$

جرم مولی $H_2S$ $= 2\times1 + 32/066 = 34/066\ g/mol$

$$\text{مول واکنش نسبت به } H_2O = \frac{10\ g\ H_2O}{18\ g\ H_2O / 1\ mol\ H_2O} \times \frac{1\ mol\ \text{واکنش}}{6\ mol\ H_2O} \simeq 0/0926\ mol \text{ واکنش}$$

$$\text{مول واکنش نسبت به } Al_2S_3 = \frac{10\ g\ Al_2S_3}{150/198\ g\ Al_2S_3 / 1\ mol\ Al_2S_3} \times \frac{1\ mol\ \text{واکنش}}{1\ mol\ Al_2S_3} \simeq 0/0999\ mol \text{ واکنش}$$

پس نتیجه می‌گیریم چون مول واکنش نسبت به $H_2O$ کمتر است $H_2O$ واکنشگر محدودکننده است.

(ادامه‌ی پاسخ سؤال ۴ در صفحه‌ی بعد)

پس از تعیین واکنشگر محدود کننده ضرایب تبدیل را مشخص می کنیم.

$$18\,g\,H_2O \equiv 1\,mol\,H_2O \Rightarrow \frac{1\,mol\,H_2O}{18\,g\,H_2O} = 1$$

$$6\,mol\,H_2O \longrightarrow 3\,mol\,H_2S \Rightarrow 6\,mol\,H_2O \equiv 3\,mol\,H_2S \Rightarrow \frac{3\,mol\,H_2S}{6\,mol\,H_2O} = 1$$

$$1\,mol\,H_2S \equiv 34/076\,g\,H_2S \Rightarrow \frac{34/076\,g\,H_2S}{1\,mol\,H_2S} = 1$$

از این سه ضریب برای محاسبه‌ی مقدار $H_2S$ استفاده می کنیم.

$$10/0\,g\,H_2O \times \frac{1\,mol\,H_2O}{18\,g\,H_2O} \times \frac{3\,mol\,H_2S}{6\,mol\,H_2O} \times \frac{34/076\,g\,H_2S}{1\,mol\,H_2S} \simeq \boxed{9/46\,g\,H_2S}$$

سه رقم بامعنی

---

**پاسخ به سوال ۵** قسمت الف:

ساختار لوییس CN را رسم کرده و بار های قراردادی را حساب می کنیم.

$$[:C \equiv N:]^-$$

$C-N \xrightarrow{10-2=8}$ قرار دادن زوج الکترون های ناپیوندی پیوند های $\pi$

رسم پیوند ها

تعداد الکترون ظرفیت = تعداد الکترون ظرفیت − (تعداد الکترون پیوندی / ۲ + تعداد الکترون غیر پیوندی) = بار قراردادی

$$\text{بار قراردادی } C = 4 - \left(\frac{3\times 2}{2} + 2\right) = -1 \qquad 5 - 1 + 0 + 4 = 10$$

$$\text{بار قراردادی } N = 5 - \left(\frac{3\times 2}{2} + 2\right) = 0$$

همانطور که از بار قراردادی پیداست سر منفی CN روی C قرار دارد. پس برای متصل شدن به $H^+$ از سر منفی اش که کربن است وصل می شود.

---

قسمت ب: تعداد الکترون های ظرفیت CN برابر ۱۰ است پس باید اوربیتال ملکولی آن $B_2$-type باشد که برای گونه های دارای الکترون ظرفیت کمتر یا مساوی ۱۰ عدد است. ساختار الکترونی CN:

$$(\sigma_{1s})^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_{2s})^2(\sigma^*_{2s})^2(\pi_{2p_x}\pi_{2p_y})^4(\sigma_{2p_z})^2$$

نمودار اوربیتال ملکولی این گونه به صورت روبه رو است.

در این شکل نسبت اختلاف انرژی ها دقیق نیست ولی می دانیم که به دلیل بالاتر بودن الکترونگاتیوی نیتروژن تراز انرژی اوربیتال های آن پایین تر از تراز انرژی اوربیتال های کربن است.