

またやりました。補足です。今回はさっぱりわけがわからないということは無いと思うので、軽く解説しておきます。（実際は書く側に余裕が無いのです。ALESSのせい）

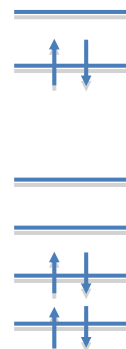
※基礎現代化学の授業プリントを持っていることを前提とします。参照の仕方は「#4 p.3-6」のように書きます。4回目の授業時に配られたプリントの3ページの6番目のスライドということです。

● 問題 1

エチレンは、二つの炭素原子がどちらも sp^2 混成軌道を取っているため、いわゆる「結合の手」となる原子間の σ 結合は 3 本です。そのうち 2 本が C-H 結合、1 本が C-C 結合に使われます。一つの炭素原子が最外殻に持つ電子は 8 つ（もともと s 軌道に 2 つ、 p_x 、 p_y 、 p_z 軌道に 2 つずつ）であり、混成された σ 結合に 2 つずつの電子が配置されるので、エチレンの 1 つの π 軌道には残りの 2 つの電子が配置されます（右図）。

π 結合が作られる過程では、それぞれの炭素原子の p_z 軌道（混成に使われなかった軌道）の足し引きが行われ、二つの π 軌道が作られます。片方が結合性、もう片方が反結合性なのは等核二原子分子の時と同じです。フントの規則から、通常時は一番エネルギーの低い結合性の軌道に 2 つの電子が配置されているため、 π 結合となります（右図）。

ブタジエンも全ての炭素原子が sp^2 混成軌道を取っています。しかしここでエチレンと違うのは、4 つ全ての p_z 軌道（混成に使われなかった軌道）が合成されて、新しく 4 つの π 軌道が作られるところです（#5 p3-3）。そして通常時には右図のように 4 つの電子が配置されています。



HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital)とは、電子が配置されている軌道のうち、エネルギーが最大のものを指します。一方 LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital)とは、電子が配置されていない軌道のうち、エネルギーが最低のものを指します。右上のブタジエンの電子配置の図で言うと、下から二番目が HOMO、上から二番目が LUMO です。

それぞれの軌道のエネルギーを計算するには、軌道の順番を下から 1、2、3、4...として、それを π 軌道のエネルギーの式での n に代入すれば良いと思います。

吸収する光のエネルギーから波長を求めるには、#6 p1-4 の表を参照します。

● 問題 2

#7 p1-5 に全て書いてあります。波長は問題 1 と同じように求めてください。