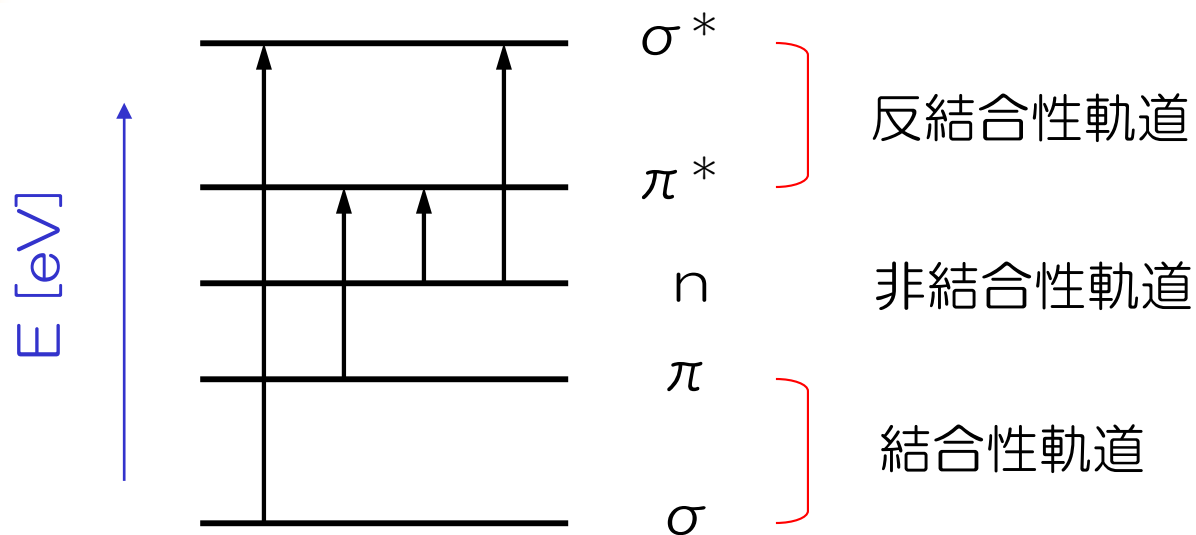


有機化合物の吸収スペクトル

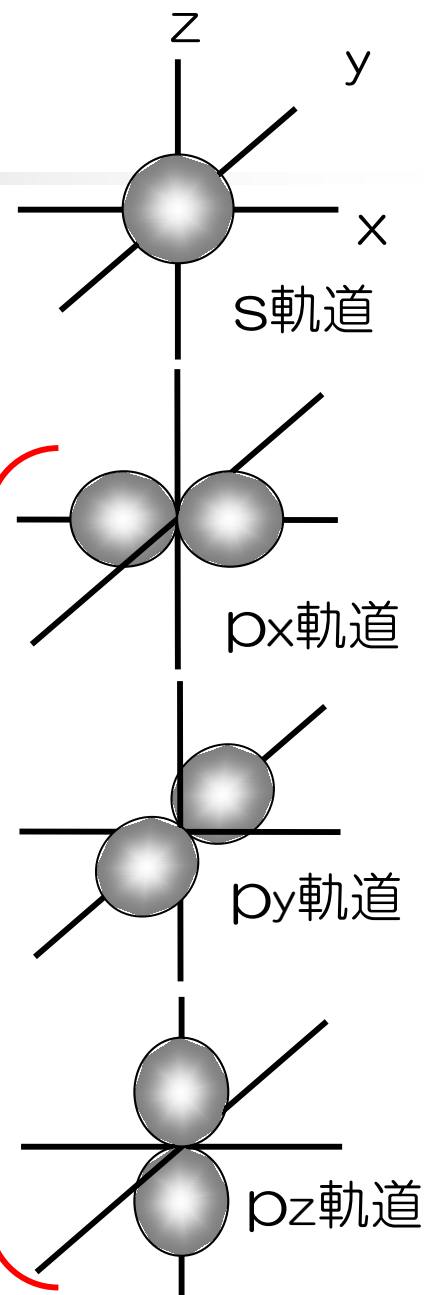


遷移の種類	吸収波長
$\pi \rightarrow \pi^*$ $n \rightarrow \pi^*$	200~400nm
$\sigma \rightarrow \sigma^*$ $n \rightarrow \sigma^*$	200nm以下

表1.7 水素原子の波動関数の例

n	l	m_l	波 動 関 数
1	0	0	$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\sigma}$
2	0	0	$\psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \sigma) e^{-\sigma/2}$
2	1	0	$\psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \cos\theta$
2	1	± 1	$\psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \sin\theta \cos\phi$
			$\psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \sin\theta \sin\phi$

$\sigma = \frac{1}{a_0} r, \quad a_0 = \text{Bohr 半径}$



$$\Psi_b = \phi_A + \phi_B,$$

$$\Psi_a = \phi_A - \phi_B$$

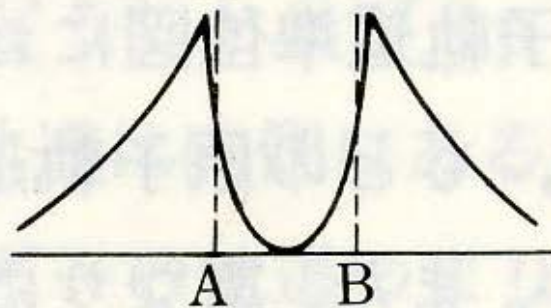
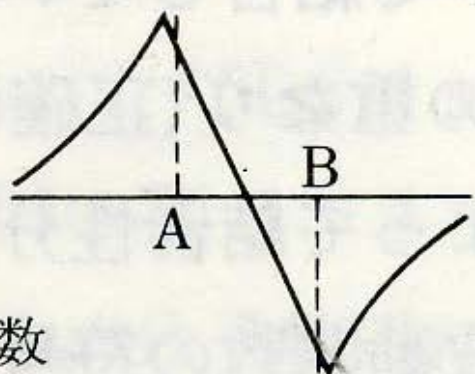
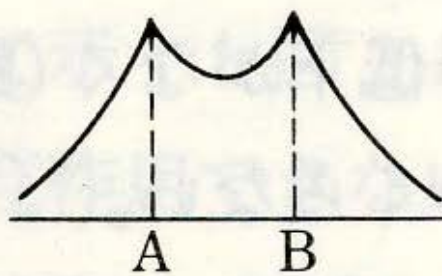
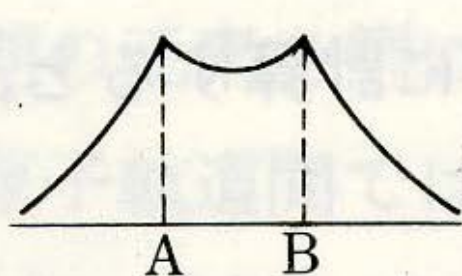
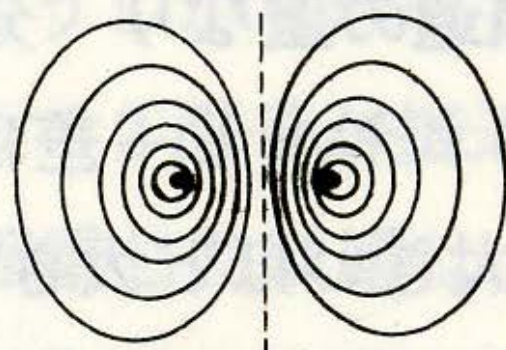
$$\Psi_b^2 = (\phi_A + \phi_B)^2 = \phi_A^2 + \phi_B^2 + 2\phi_A\phi_B$$

$$\Psi_a^2 = (\phi_A - \phi_B)^2 = \phi_A^2 + \phi_B^2 - 2\phi_A\phi_B$$

結合性軌道



反結合性軌道



軌道関数

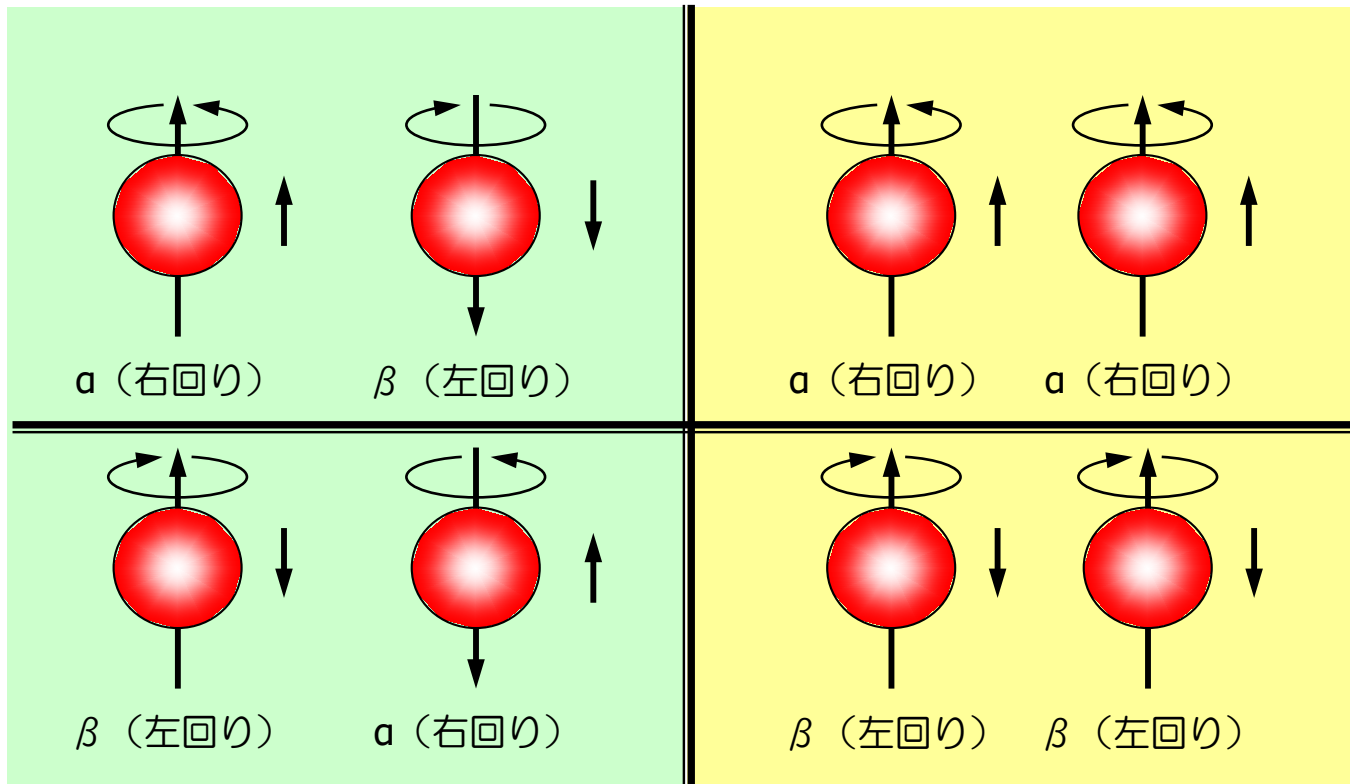
(b) 水素分子の軌道関数 (c) 軌道関数の二乗 (d) 等電子密度線図

電子の自転による磁気モーメント

電子スピンと排他律

共存可能*

共存不可*



*量子統計によれば、粒子数 N_j 、エネルギー ϵ_j 、状態数 Δ_j として、見分けのつかない N_j の粒子を Δ_j の状態に配分するとき、

①**ボーズ粒子**:ある状態 Δ_j に、何個でも粒子の配分が可能な粒子→光子、音子、振動子など、②**フェルミ粒子**:ある状態 Δ_j には、1つの粒子のみの配分が許される粒子(**パウリの排他律**)→電子、陽子、中性子など、の2種類がある。

前記スライドの各波動関数 ϕ_{jl} には、それぞれのエネルギー ϵ_{jl} に対応したものであるが、2つの電子が配分可能である。上記・左側の2つの電子は、外部磁場が加わったとき、それぞれのエネルギー準位が分裂(ゼーマン効果)するので、上記②の条件を満たすこととなる。右側の2つの電子が、外部磁場の存在下においても、同じエネルギー準位であり、②の条件を満たさない。

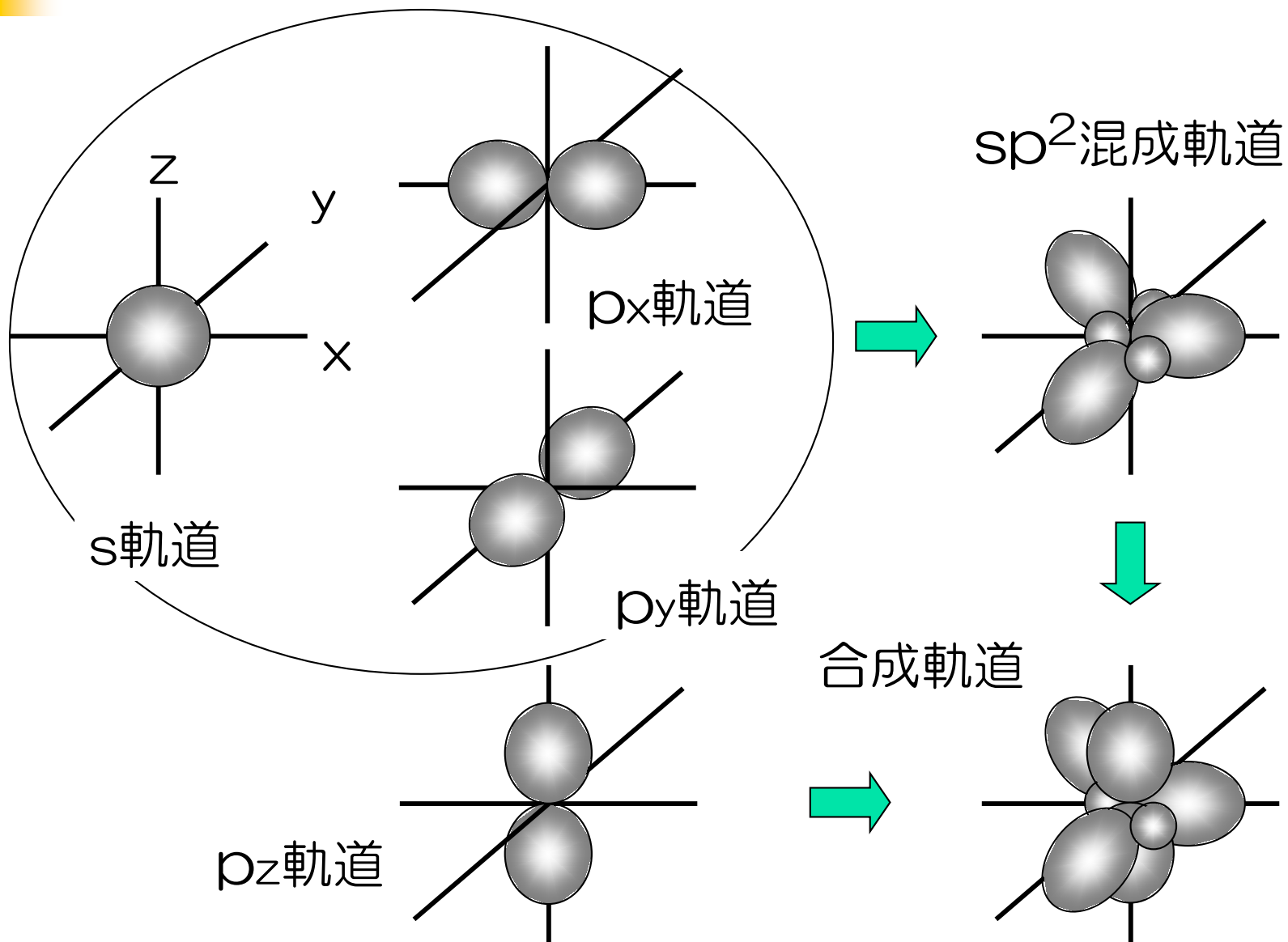
上記の条件があるから、左の状態が可能で、右の状態が不可ということではなくて、粒子はこのような挙動をするということである。

原子軌道と混成軌道

	炭素 $\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot$	酸素 $\cdot\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}\cdot$
内殻電子	$1s^2$	$1s^2$
外殻電子	$2s^2 2p^2$	$2s^2 2p^4$

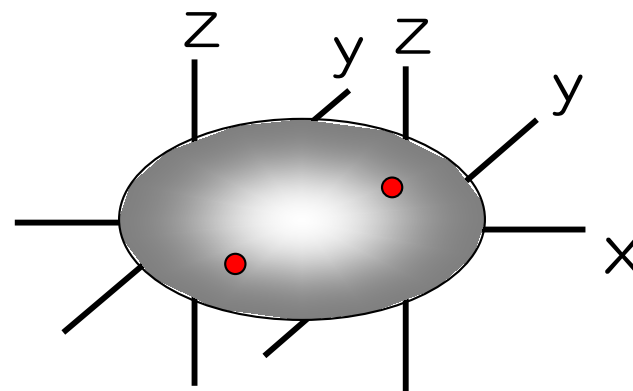
量子数			記号	混成軌道		
n	l	m				
1	0	0	1s	結合に関与しない		
2	0	0	2s	sp	sp ²	sp ³
	1	0	2p _x			
		+1	2p _y	p _y		
		-1	2p _z	p _z	p _z	
結合			三重	二重	単	

原子軌道→混成軌道

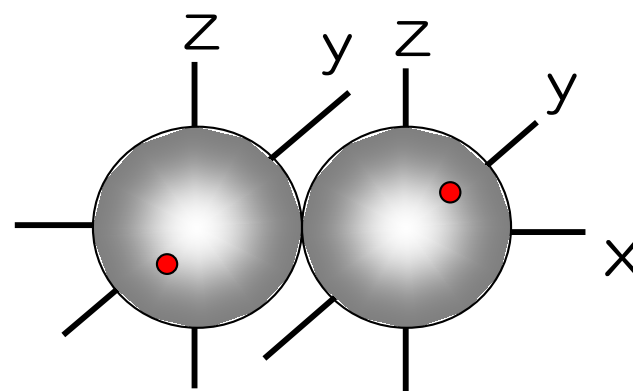


原子軌道→分子軌道

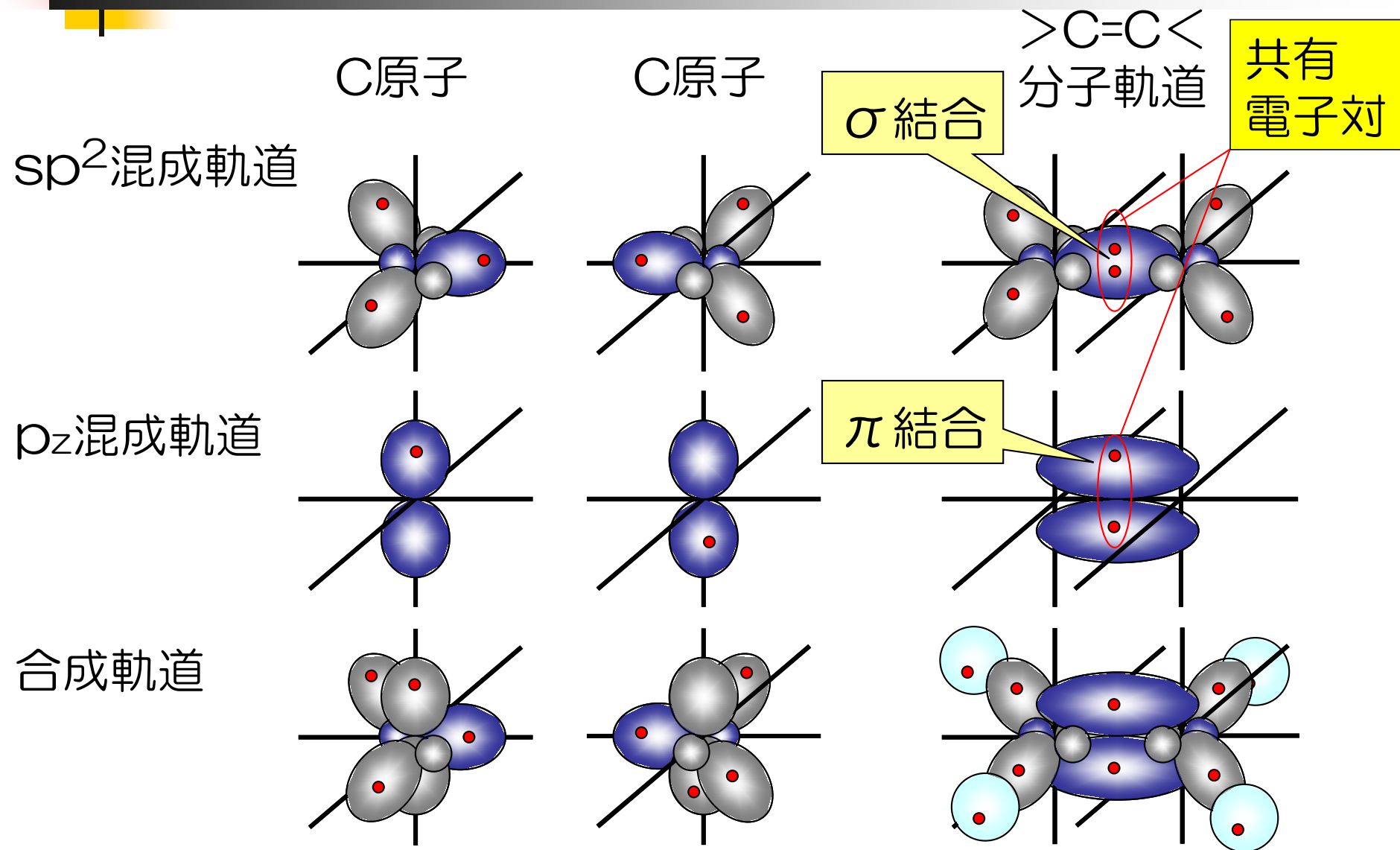
結合性軌道



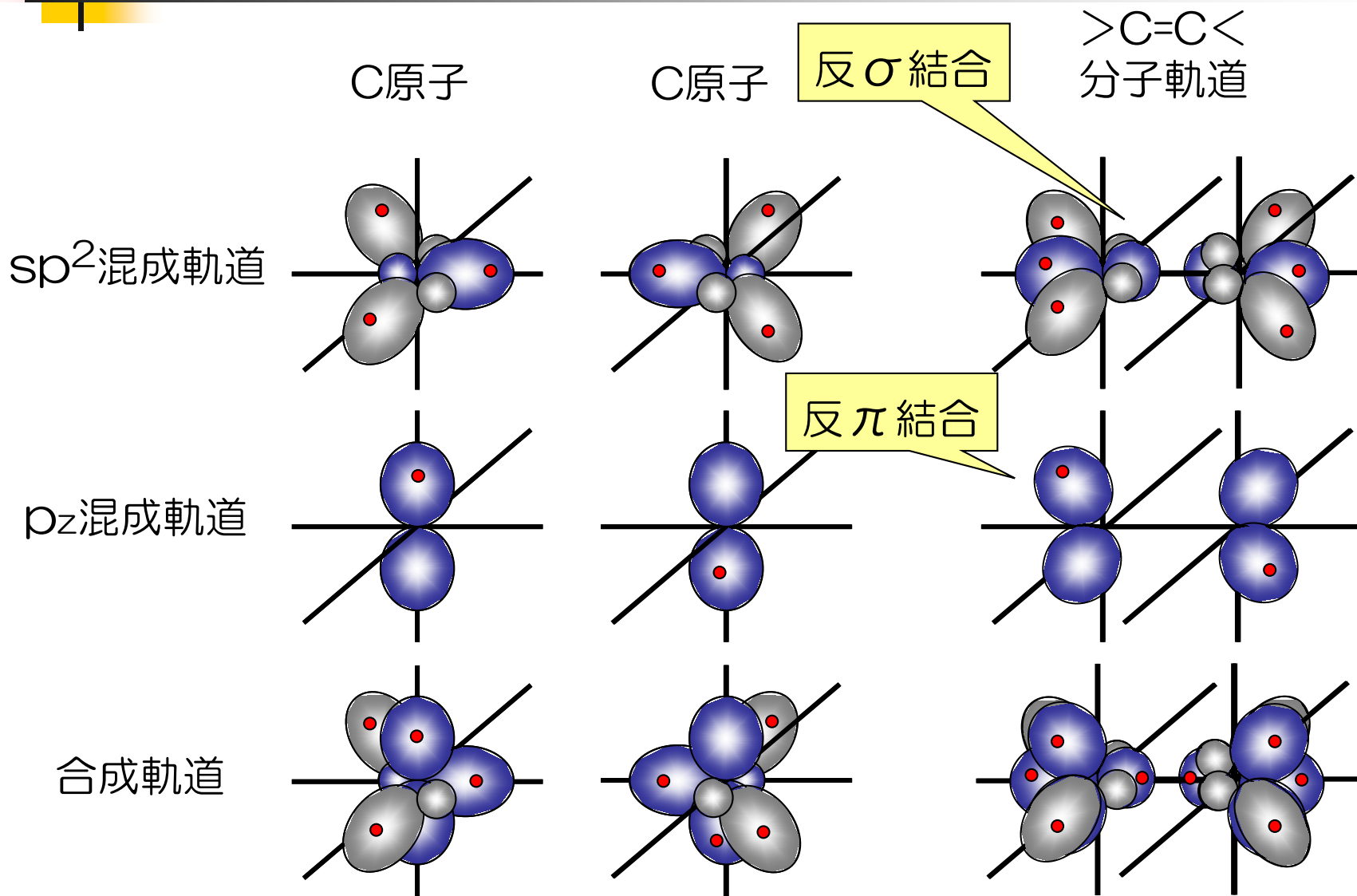
反結合性軌道



原子軌道→結合性軌道 >C=C<



原子軌道→反結合性軌道 $>C=C<$



混成軌道→分子軌道

>C=O

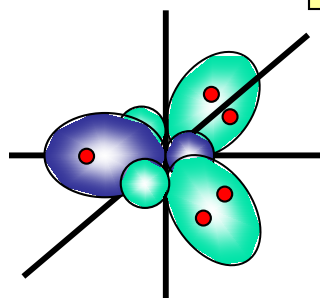
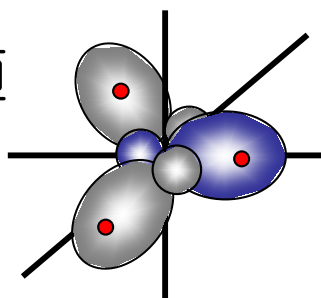
非共有電子対

C原子

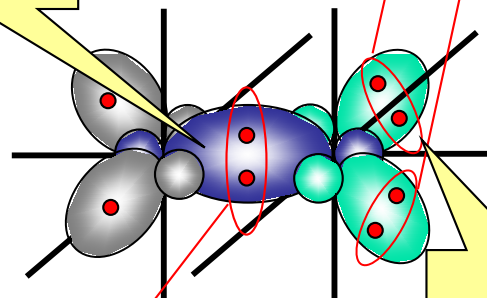
O原子

>C=O
分子軌道

sp^2 混成軌道

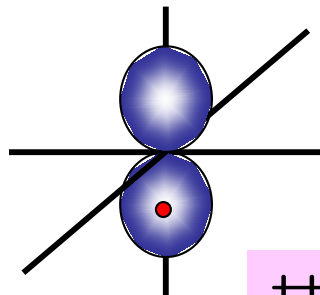
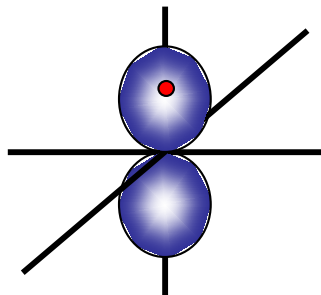


σ 結合

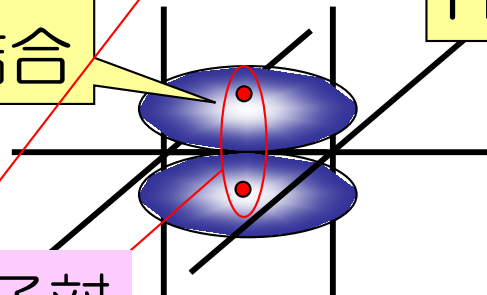


n電子

p_z 混成軌道

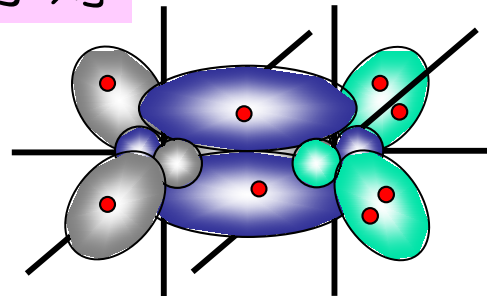
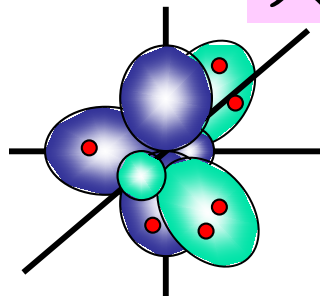
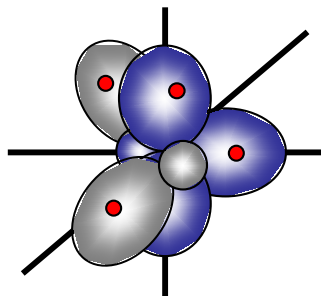


π 結合

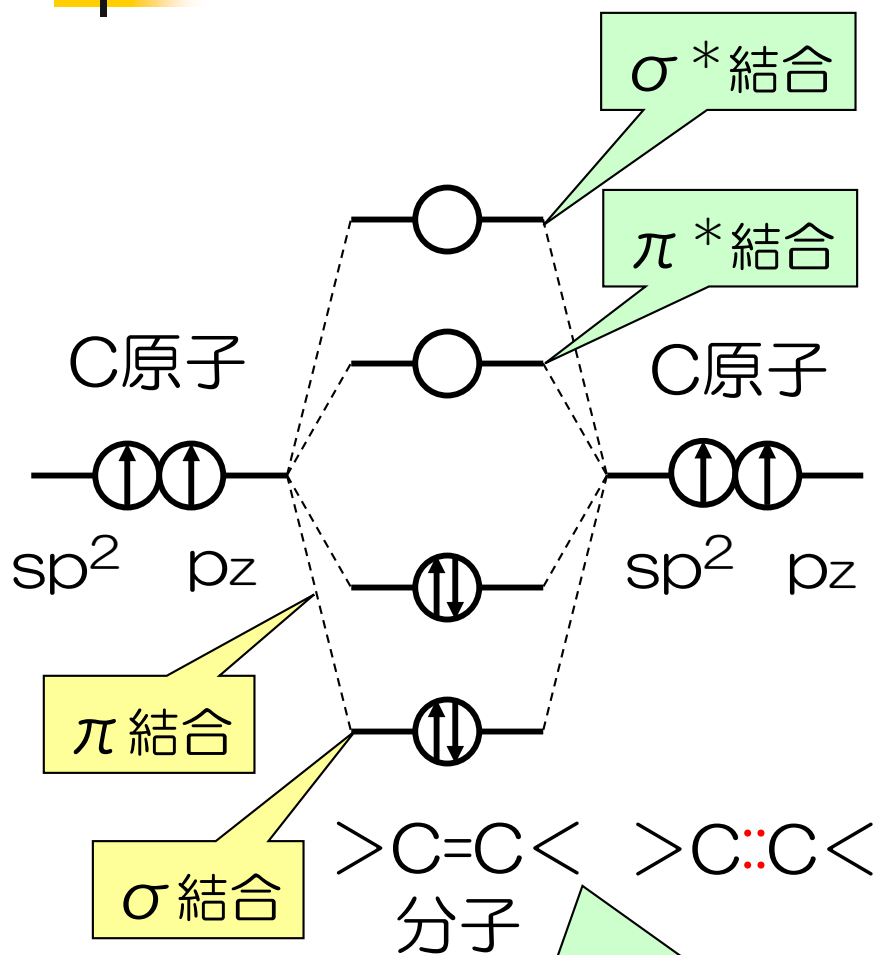


共有電子対

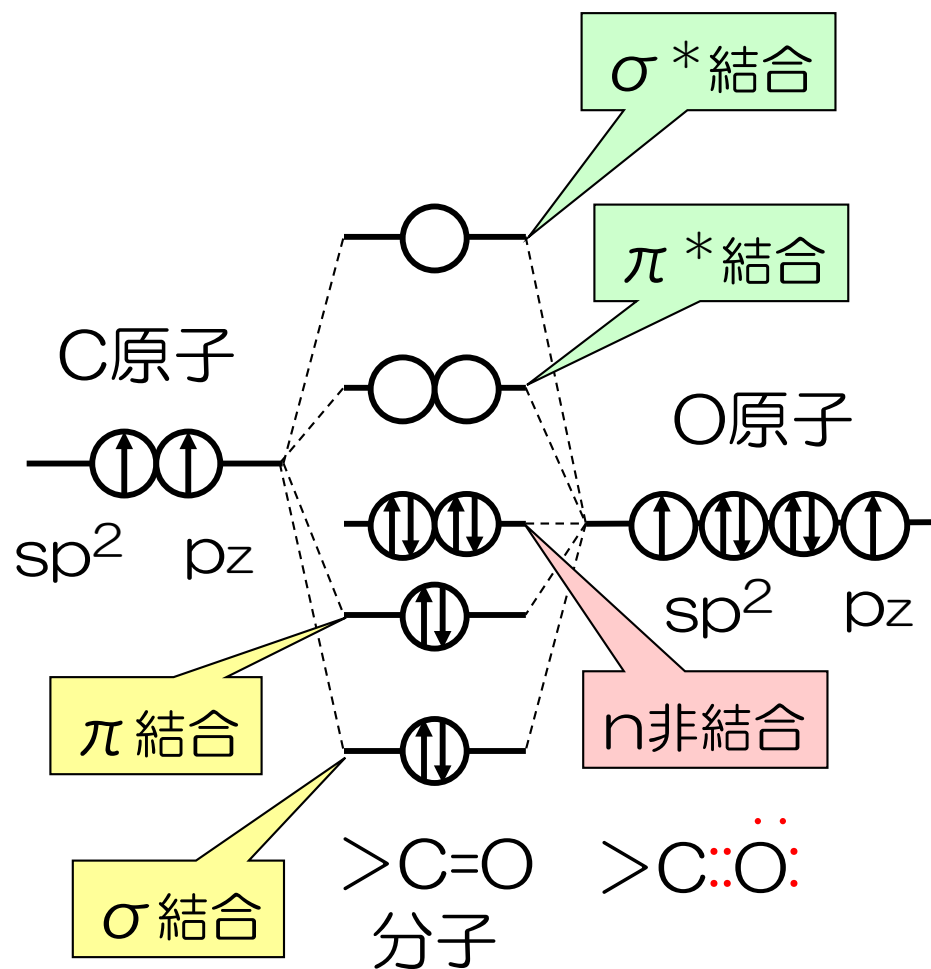
合成軌道



分子軌道のエネルギー準位



他の2つの sp^2 は側鎖の結合に使われる



遷移金属d軌道の分裂と吸収スペクトル

