**基礎現代化学（発展編）　まとめ**

文責　　石河　敏成

３−１．分子の中の電子（☆☆）

　σ電子…σ結合はガッツリ結合するため、行動範囲が狭い（局在化）

　π電子…π軌道を動き回り、非局在化しやすい　←重要

　n電子（孤立電子対）…予備の電子（必要に応じて活躍するらしい）

　π結合がいくつも隣接していると（π結合がリンクする感じになって）π電子が複数の結合上に存在できるようになる（非局在化）。つまり、一つの構造式で書かれていても、π電子の移動で実は違う構造をとっているかもしれない！！（共鳴構造）（第八回③）←最大の要点

　いろいろ考えてみると、共鳴で二重結合を組み換えても（＝π電子を移動しても）不対電子が生じないもの（ベンゼンとか）は特に安定　←芳香族性

（第八回前半④）

計算上もπ電子の移動範囲が広いと（非局在化）安定化する。

つまりエネルギーが小さい（第八回前半⑤）…＊

　共鳴…特定の結合状態を取ることはなく、混ざっている。

　平衡…特定の状態を行ったり来たりする。

３−２．物質の色（☆☆☆）

　HOMO（最高被占軌道）…電子が軌道でエネルギーが最も高いもの

LUMO（最低空軌道）…空軌道のうちでエネルギーが最も低いもの

ΔE=（HOMOとLUMOのエネルギー差）=hν=hc/λ…Ⅰ

波長λの光のみを吸収して、電子はHOMOからLUMOに励起される

ΔEが小さくなると、λが大きくなり、可視光線が吸収される←重要！…＊＊

　吸収されなかった光が透過光として見える。つまり、簡単に言うと、例えば赤が吸収されるなら、赤のせいであんまり目立ってなかった色（補色）に透過光は見える。←赤に見えるのではない！（第八回後半②～⑤）

　＊と＊＊よりπ電子の移動範囲（π共役長）が広くなれば（長くなれば）、可視光線を吸収し、色がつく（第八回後半⑥⑦）

　このように考えると、フェノールフタレインやスピロランなどの変色が説明できる。（第八回後半⑧～⑬）←ポイントはπ共役長にあったのだ！！

配位子の影響（ここから複雑ですね（笑））

配位子のためにｄ軌道間の縮重が解ける（エネルギー差が生じる）

（理由）配位子が軸上に存在する。

ｄｚ²とｄｘ²-ｙ²は軸上に腹が存在するので、強く反発する←影響大

ｄｙｚとｄｘｙとｄｘｚは全て軸上が節面となっている←影響小

結果としてｄ軌道間でエネルギー差が生じて、エネルギーの高い軌道が２つ、低い軌道が３つできる。（第九回前半⑯⑰）

このエネルギー差がちょうど可視領域に対応しているときは（Ⅰ式参照）エネルギーの低いｄ軌道から高いｄ軌道へ電子が励起されることで（ｄ-ｄ遷移）、色がつく（第九回前半⑱）

３－３．光で計る分子（☆☆）

　より厳密な話（らしい）

　分子振動と回転により**双極子モーメントが変化する場合**、これらの動き（ダイナミクス）は**電磁波（＝光）と相互作用する**。（第九回後半②）

　つまり、双極子モーメントが変化しないなら、分子がどんなにアクロバティックな動きをしていても、何も起こらない！

　なぜかはよく分かんないけど、分子も電子と同じようにその振動エネルギーは量子化されている！（特定の値しかとれない！）（第九回後半④⑤）

　電場の交替（＝光の周波数）と双極子モーメントの変化の周波数が、一致したときだけエネルギーのやり取り（相互作用）が起こる。（第九回後半⑥）

　残りの部分は具体的にどんな振動があるのかとか、実験的にも観測できるぜ！とか、振動の周波数から分子の形、種類が分かるとか、その他いろんなこと分かるとか書いてあるんです。（僕もこの辺よく分からないんで…）