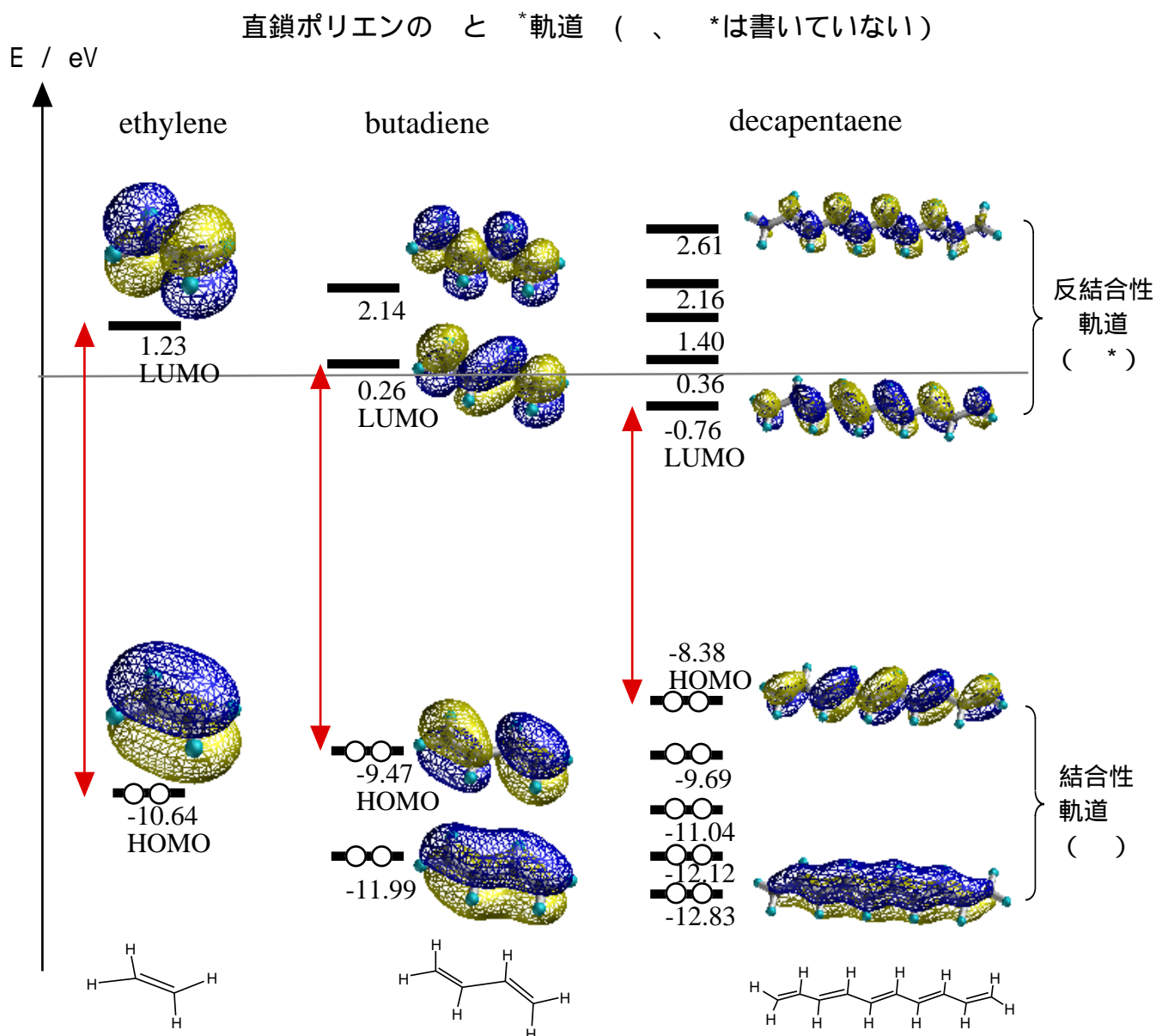
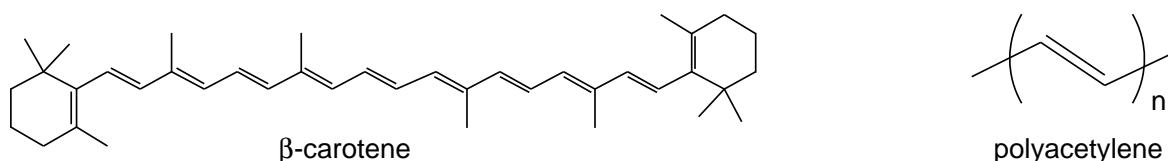


光機能物質工学 (石田) 資料 1

ポリエン分子軌道の様子は、井戸型ポテンシャル場における定常波解で近似でき、**HOMO-LUMO ギャップ**に相当する紫外可視吸収スペクトルは計算値と良く合う。系が長いと吸収極大は長波長シフト (red shift) する (ニンジン色素の β -カロテンが好例)。



芳香族化合物も 共役系的一种である。ベンゼンの場合には 電子は完全に非局在化し、全ての結合は「1.5 重」結合である。ところが、上のような直鎖ポリエンは、仮に無限に連なったとしても単結合と二重結合が交互に現れ (結合交替という)、HOMO-LUMO ギャップも残る。したがって、(未ドーブ) ポリアセチレンは半導体 (ないしは絶縁体) である。



ポリエンのHOMOとLUMO の模式的な描き方

HOMO: 2Pz 軌道の位相を、二重結合部分を結合的に、一重結合部分を反結合的に塗る。
 LUMO: 2Pz 軌道の位相を、二重結合部分を反結合的に、一重結合部分を結合的に塗る。