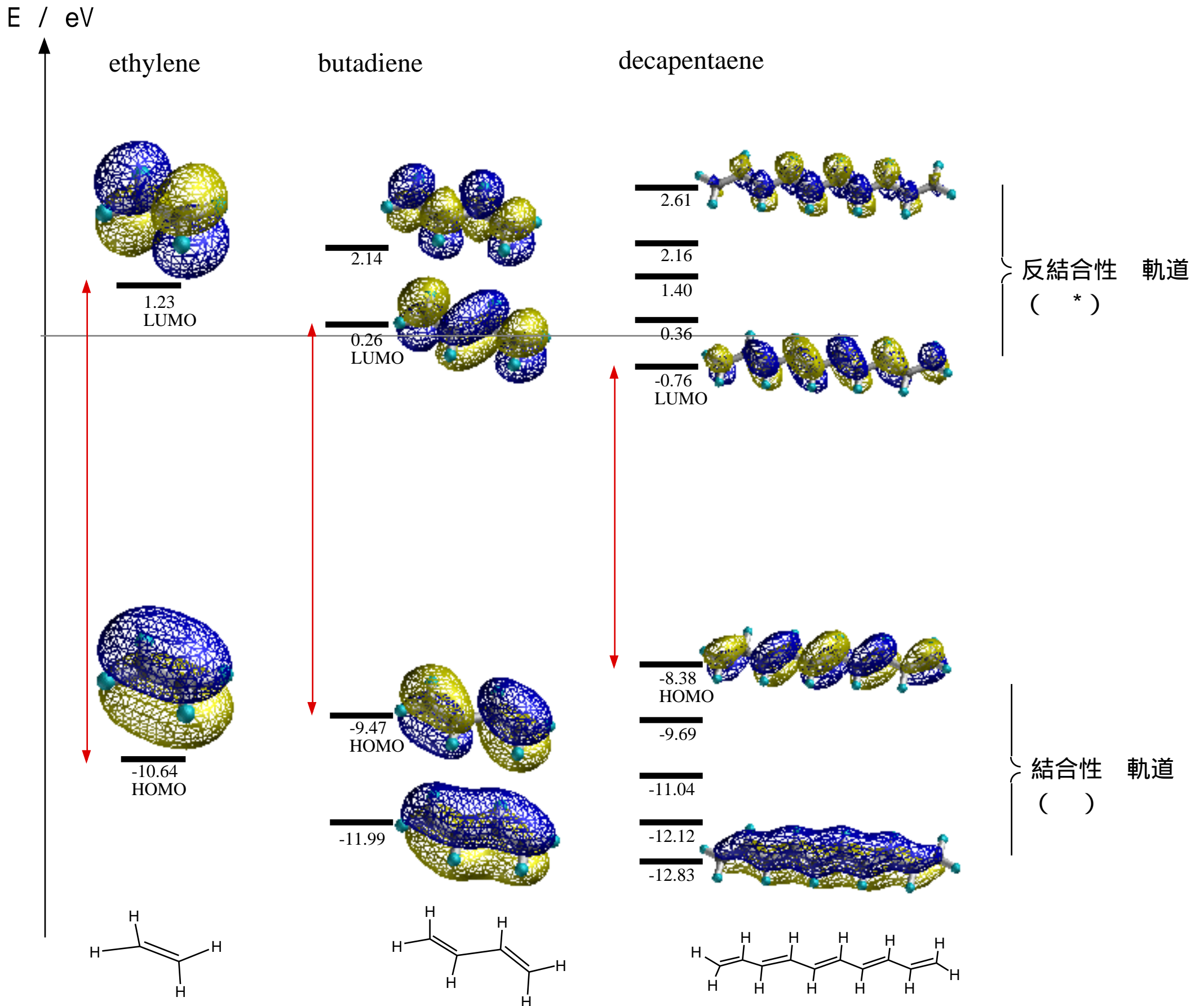


直鎖ポリエンの と *軌道

(Chem3D.Pro の中の MOPAC (PM3) による。、 *は書いていない)



共役系

sp² 混成もしくは sp 混成原子がつらなった分子骨格のこと

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、弦の振動の類推で理解できる。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(人参色素の 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) ポリアセチレンは絶縁体である。

