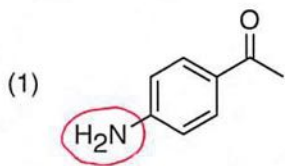


<解答例>

1. 以下の化合物の紫外可視吸収スペクトルにおける極大吸収波長を計算せよ。計算の過程も説明すること。



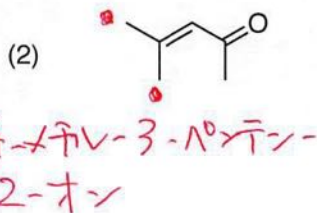
4'-アミロアセトフェン

配布プリント B を参照

$$246 + 58 = 304 \text{ nm}$$

(親発色団) (p-アミ基)
Ar-COR

実測値 309 nm

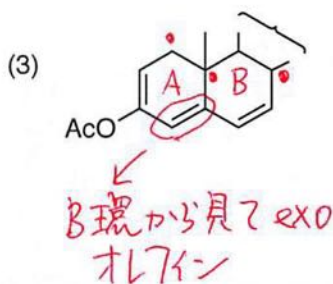


配布プリント C を参照

$$215 + 12 \times 2 = 239 \text{ nm}$$

(直鎖-共役) (β-R)

実測値 235 nm



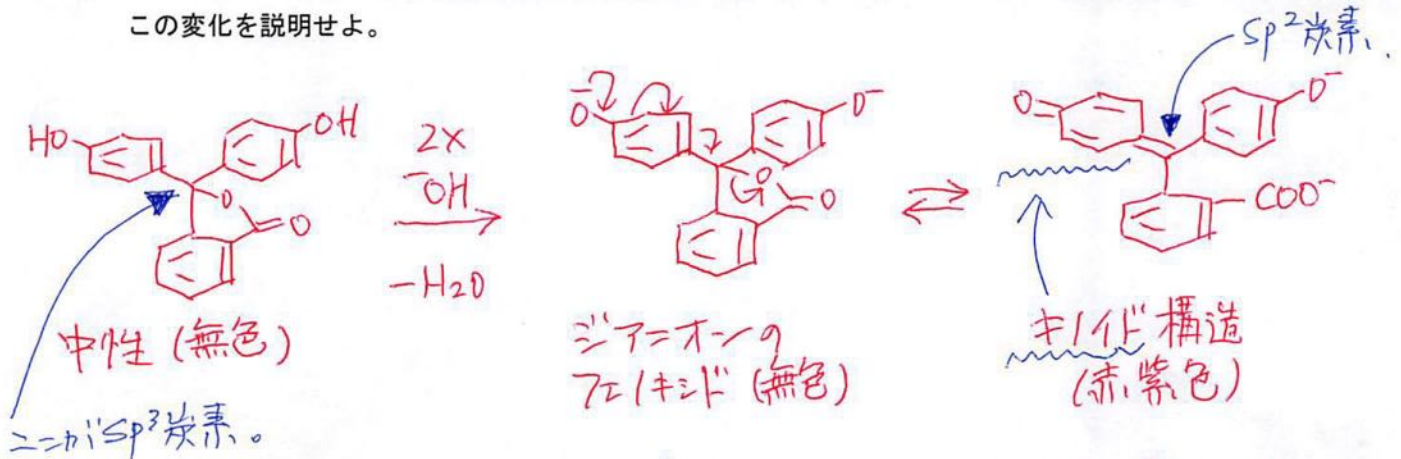
配布プリント A を参照

$$214 + 39 + 30 + 5 \times 3 + 5 = 303 \text{ nm}$$

(ジエン) (環内 cis ジエン) (追加 C=C) (追加 不飽和) (環外 オレフィン)

実測値 306 nm

2. フェノールフタレインの水溶液は中性では無色であるが、pH 8.2~12 では赤紫色を呈する。構造式を用いて、この変化を説明せよ。



フェノールフタレインは 2つのフェノール構造 (λ_{max} 210nm) と芳香族エステル (λ_{max} 約 230nm) を持つが、可視領域での吸収は見られない。
 ジア=オン (フェリキッド) になると、 λ_{max} 235nm に長波長シフトするが、中央の sp³炭素が 3つのベンゼン環の共役系を孤立させており、依然無色である。しかし、平衡でフェリキッドイオンから押し出たラクトンが開くと共役系が伸びたキイド構造を取り、着色する。

課題の回答は研究室 HP でも公開します (モバイル対応)
<http://www.agr.nagoya-u.ac.jp/~chembio/index.html>

