

不飽和数の式で、なぜ  $N\#/2$  を足すのか？

(答)

C, H, N からなる飽和化合物 ( $UN=0$ ) を考えてみる。今、直線状分子を仮定しよう (実際には分岐があっても同じ議論になる)。両末端に H があって、その間に  $CH_2$  のユニットが  $a$  個、NH のユニットが  $b$  個あったとする。この化合物の分子式は  $C_aH_{2+2a+b}N_b$  である。もしも二重結合もしくは環構造が 1 つある ( $UN=1$ ) なら  $C_aH_{2a+b}N_b$  となるはずである。これらが  $a, b$  に関わらず成立しなければならない。

$$0 = \alpha * ((2+2a+b) - 2*a - b) + \beta = 2\alpha + \beta$$

$$1 = \alpha * ((2a+b) - 2*a - b) + \beta = \beta$$

を解いて、 $\alpha = -1/2, \beta = 1$  を得る。

よって、 $UN = -1/2(H\# - 2C\# - N\#) + 1 = C\# + 1 - 1/2H\# + 1/2N\#$  となる。