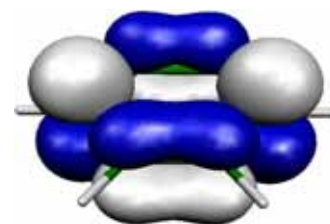
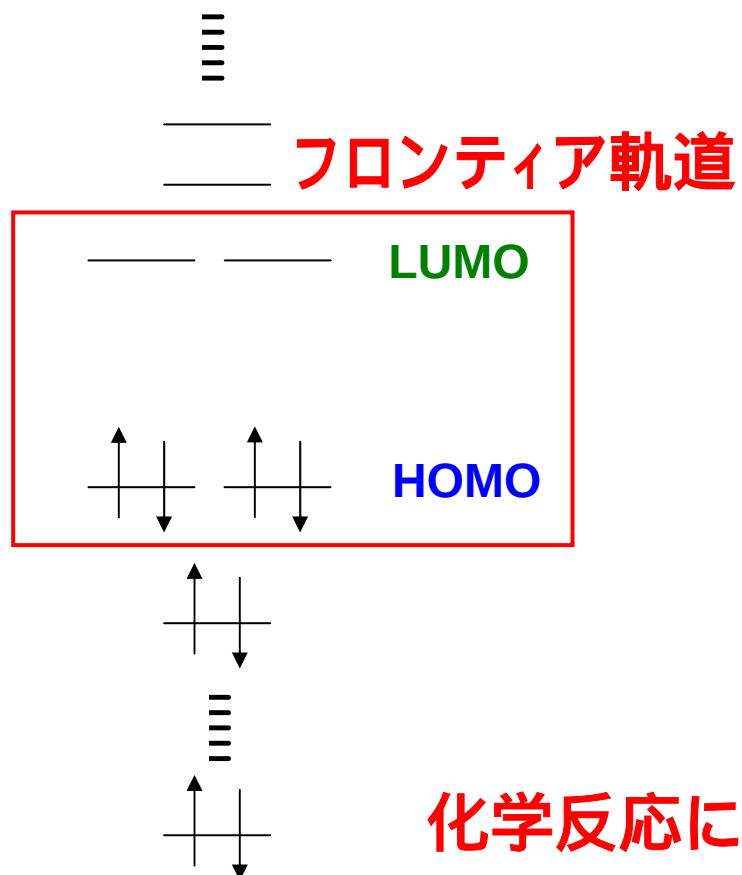


江原グループ
研究室・体験入学紹介

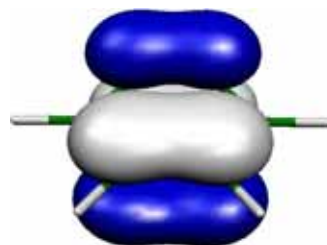
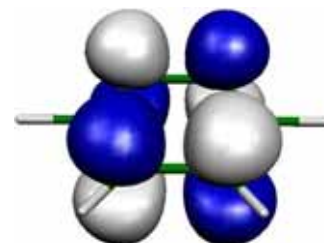
フロンティア軌道理論と
現在の量子化学

2008年8月5~8日
第5回 分子科学研究所 夏の体験入学

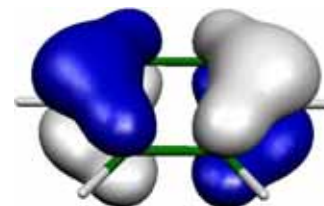
分子軌道：ベンゼンの π 軌道



LUMO (7.18eV)



HOMO (-7.78eV)

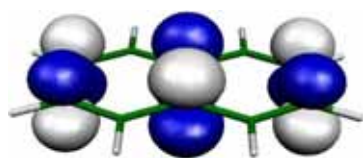


化学反応にはフロンティア軌道が重要

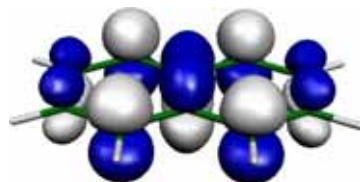
HOMO: 最高被占軌道 (Highest Occupied Molecular Orbital)

LUMO: 最低空軌道 (Lowest Unoccupied Molecular Orbital)

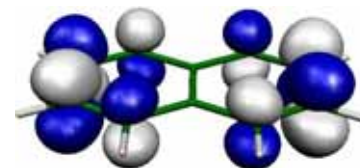
ナフタレンの軌道と反応性



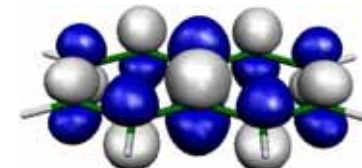
LUMO+1 (6.59eV)



LUMO+2 (8.74eV)



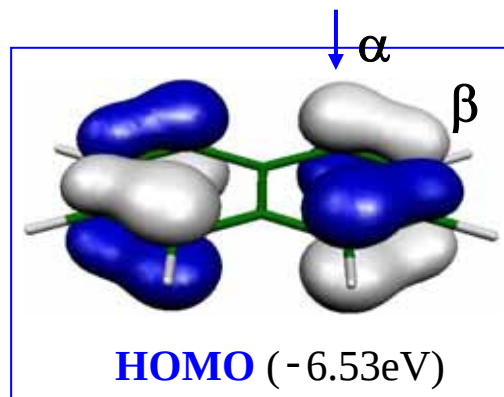
LUMO+3 (11.20eV)



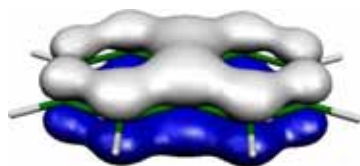
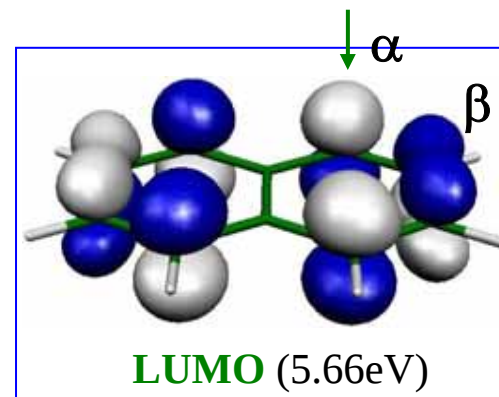
LUMO+4 (14.87eV)



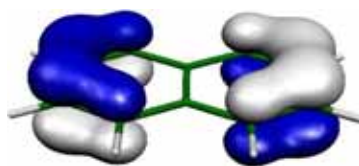
求電子反応の反応位置



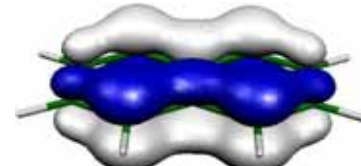
求核反応の反応位置



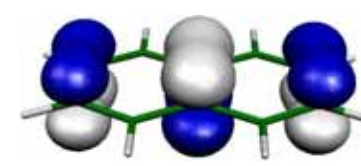
HOMO-7 (-13.37eV)



HOMO-3 (-10.98eV)



HOMO-2 (-9.07eV)

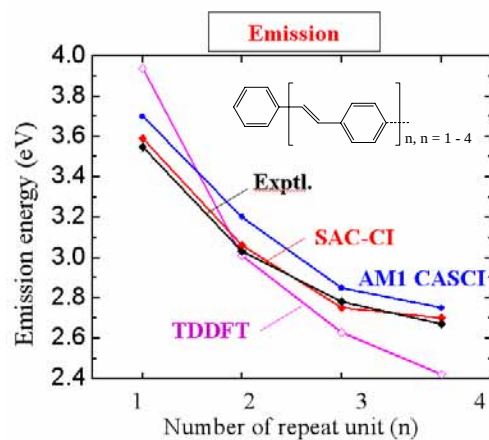


HOMO-1 (-7.23eV)

理論精密分光・光物性科学・触媒化学

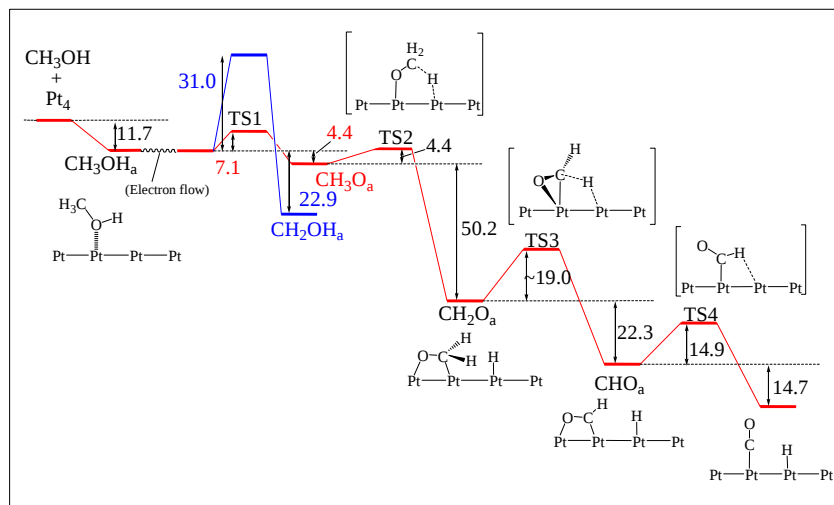
有機EL分子の発光スペクトル

励起エネルギーの共役長依存性を精密に再現



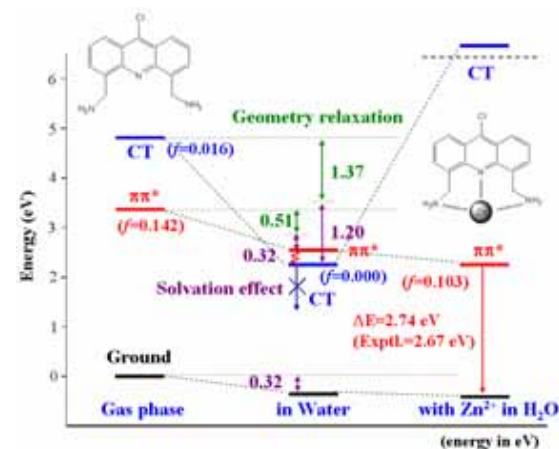
燃料電池の触媒反応

Pt表面上の酸化反応の触媒作用の解明



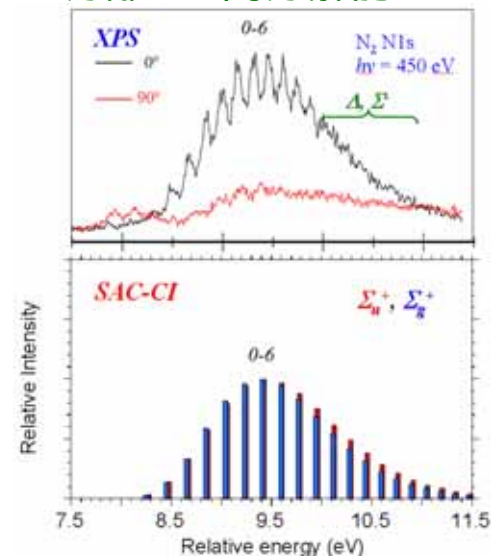
蛍光プローブ分子の光電子過程

光有機電子移動(PET)メカニズムの解明



内殻電子過程による構造緩和

対称性を分離した高分解能スペクトルの帰属



体験入学のプログラム

- 分子をコンピューターで表示してみる
興味のある分子を、可視化プログラムを使ってコンピューターでつくってみる
- プログラムで分子の電子状態を計算してみる
量子化学のプログラムで、分子の電子状態や化学反応の経路を計算してみる
- 最先端の研究にふれよう！
理論化学の最先端の研究をご紹介します