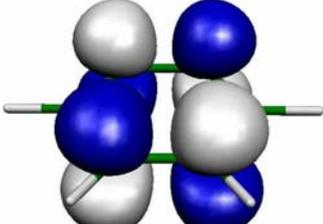
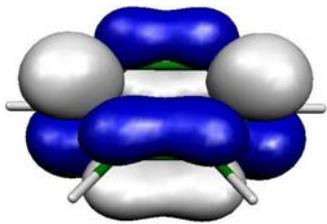
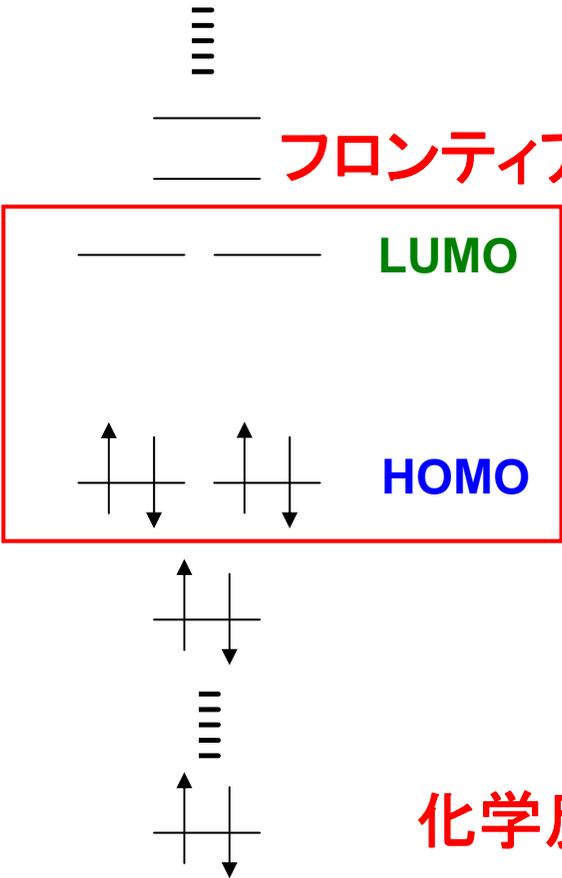
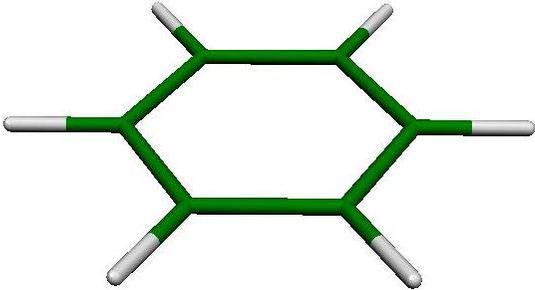


第6回 分子科学研究所 夏の体験入学  
研究室・体験入学紹介

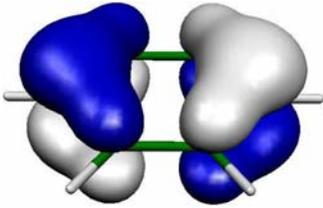
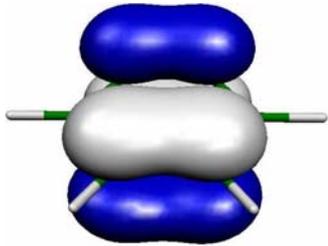
フロンティア軌道理論と  
現在の理論化学・計算化学

江原正博、福田良一

# 分子軌道：ベンゼンの $\pi$ 軌道



LUMO (7.18eV)



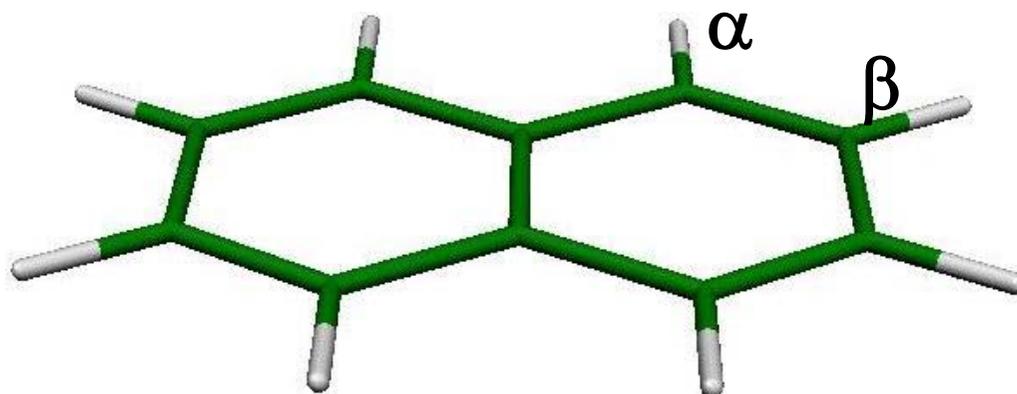
HOMO (-7.78eV)

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)

# ナフタレンの反応



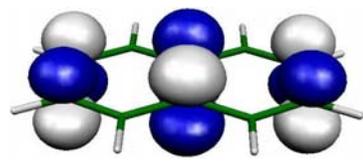
求核反応： 反応する分子が+を目指して攻撃

求電子反応： 反応する分子が-を目指して攻撃

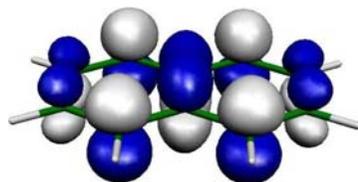
ナフタレンは求核反応も求電子反応も $\alpha$ 位で起きる。

➡ それまでの有機電子説では説明できない。

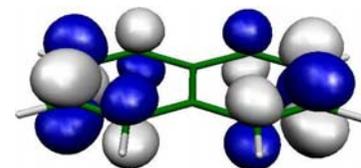
# ナフタレンの軌道と反応性



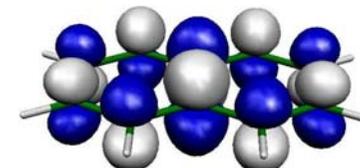
LUMO+1 (6.59eV)



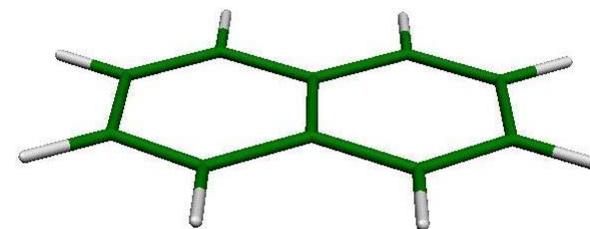
LUMO+2 (8.74eV)



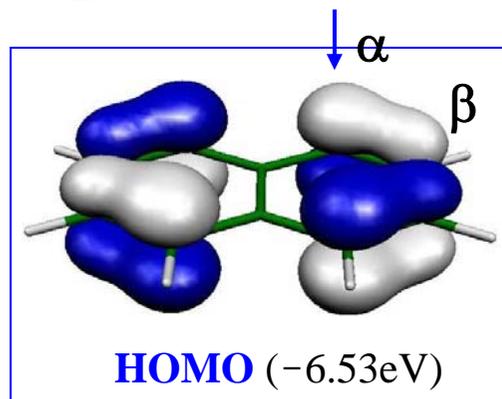
LUMO+3 (11.20eV)



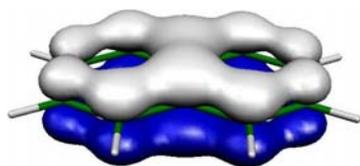
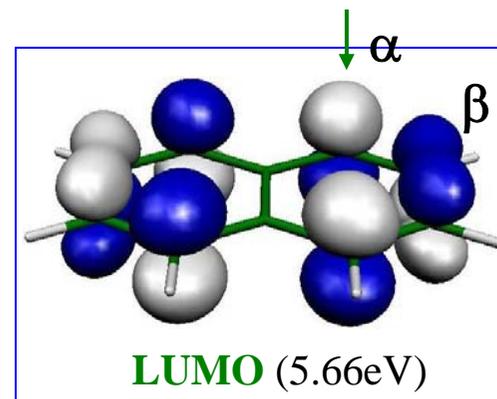
LUMO+4 (14.87eV)



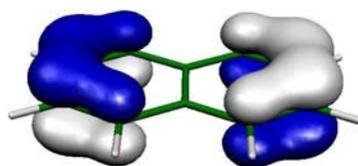
求電子反応の反応位置



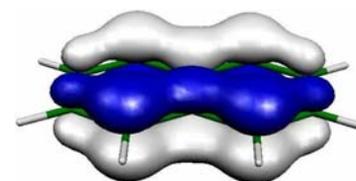
求核反応の反応位置



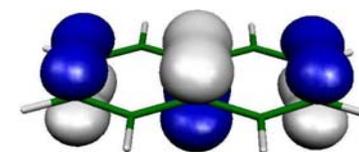
HOMO-7 (-13.37eV)



HOMO-3 (-10.98eV)



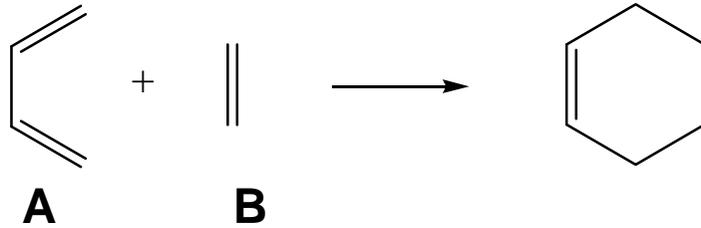
HOMO-2 (-9.07eV)



HOMO-1 (-7.23eV)

# 軌道相互作用と反応性

## Diels-Alder反応

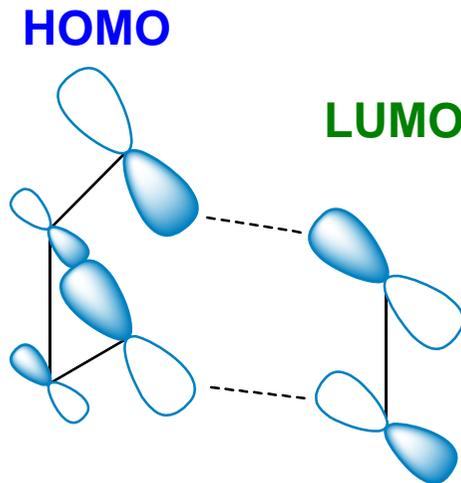
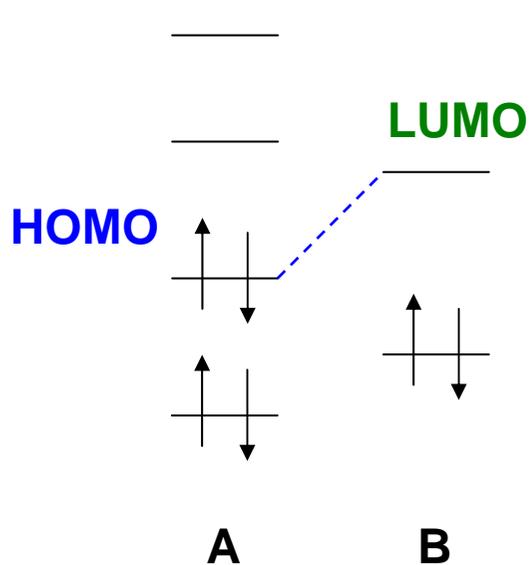


熱反応で進行する

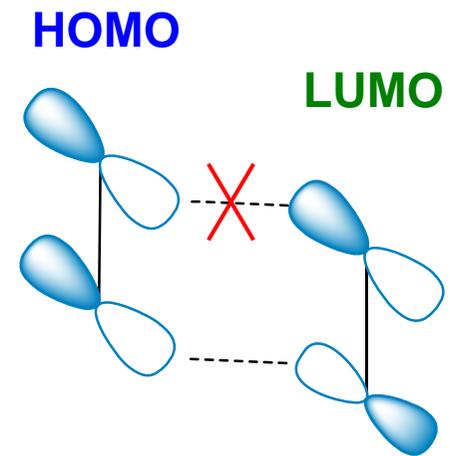


熱反応では進行しない

## 軌道相互作用



位相が合う: 反応する

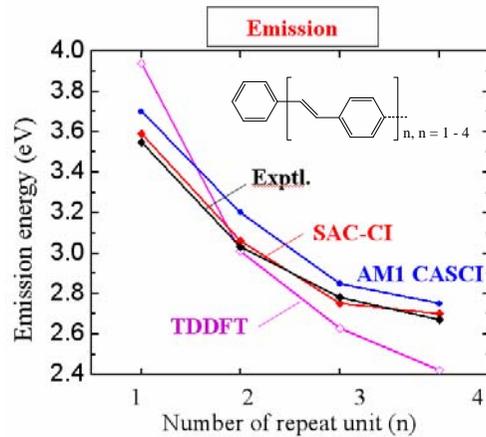


位相が合わない: 反応しない

# 理論精密分光・光物性科学・触媒化学

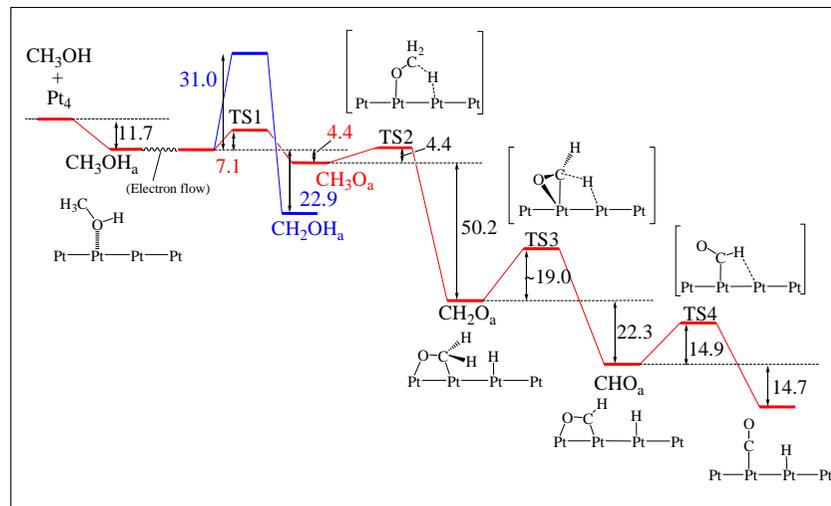
## 有機EL分子の発光スペクトル

励起エネルギーの共役長依存性を精密に再現



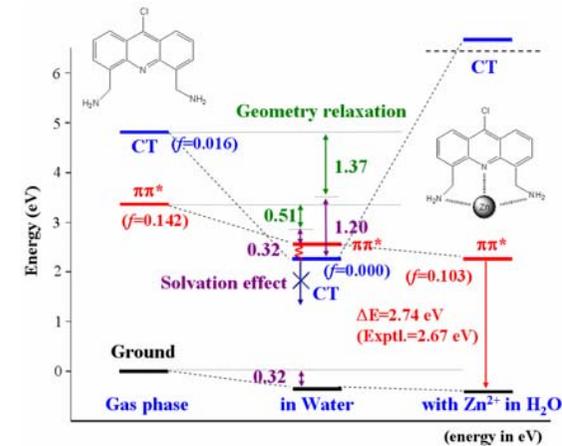
## 燃料電池の触媒反応

Pt表面上の酸化反応の解明



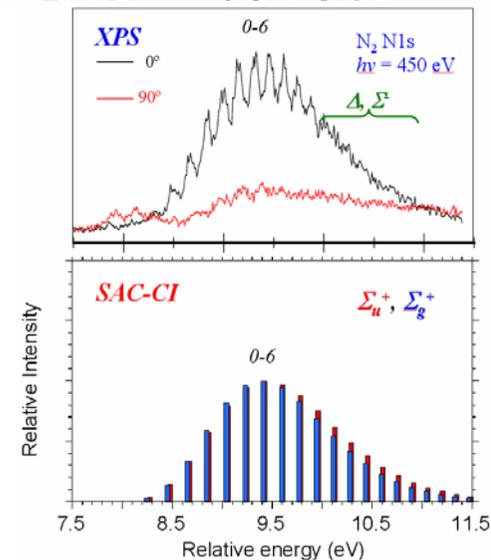
## 蛍光プローブ分子の光電子過程

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つくってみる**  
興味のある分子を、可視化プログラムを利用して、コンピューターで作ってみる。
- **プログラムで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。