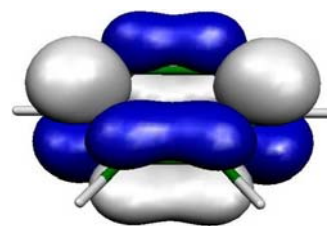
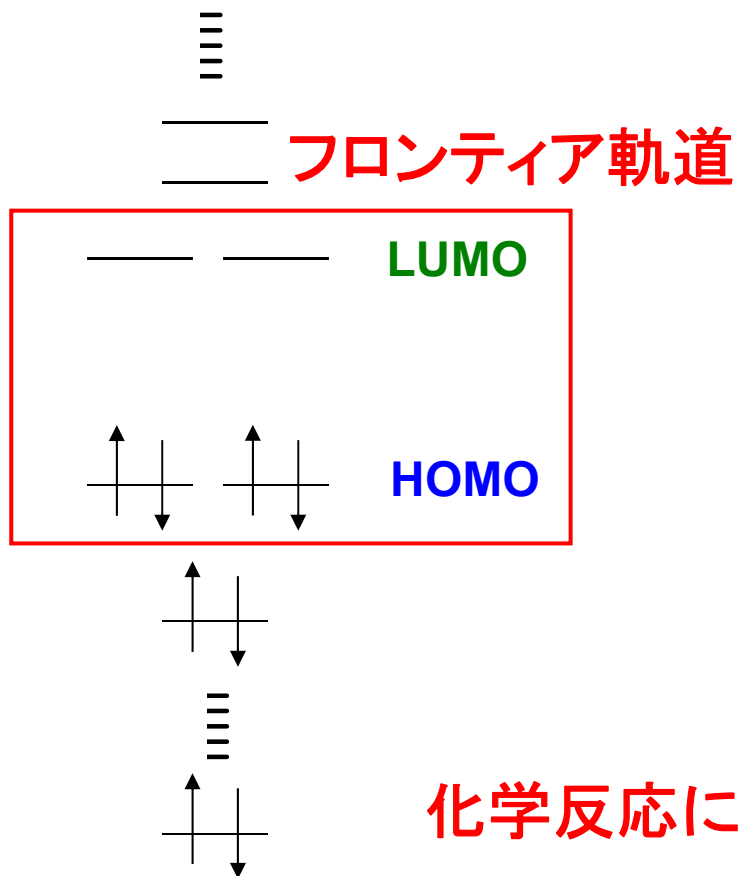
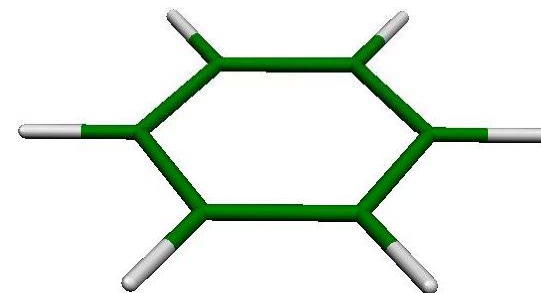


2012年度 分子科学研究所 夏の体験入学
研究室・体験入学紹介

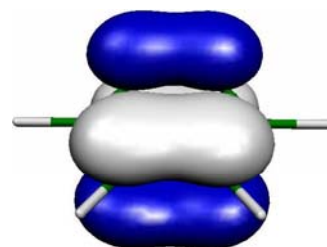
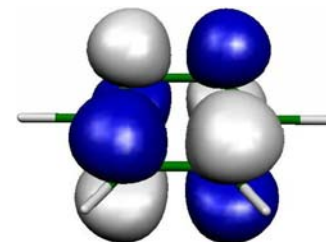
フロンティア軌道理論と量子化学計算

江原正博、福田良一

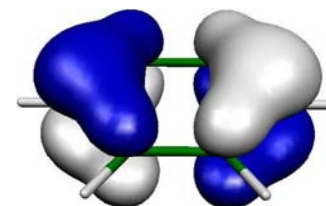
分子軌道：ベンゼンの π 軌道



LUMO (7.18eV)



HOMO (-7.78eV)

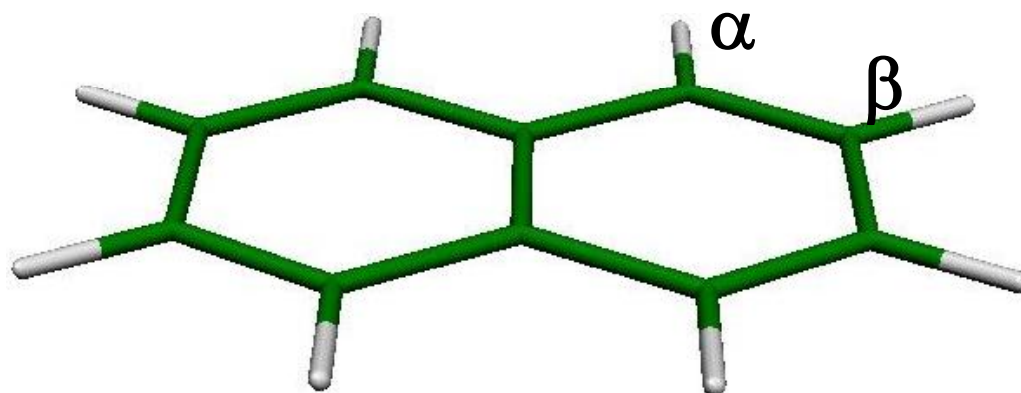


化学反応にはフロンティア軌道が重要

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



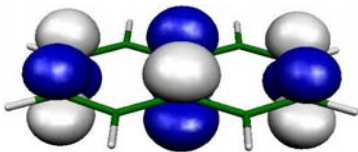
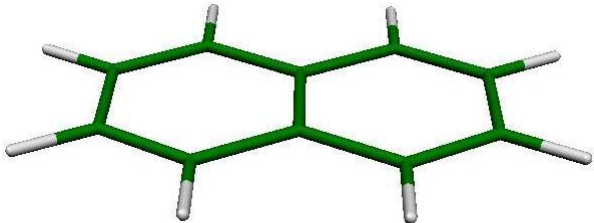
求核反応： 反応する分子が+を目指して攻撃

求電子反応： 反応する分子が-を目指して攻撃

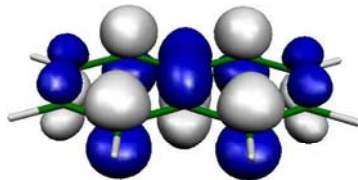
ナフタレンは求核反応も求電子反応も α 位で起きる。

➡ それまでの有機電子説では説明できない。

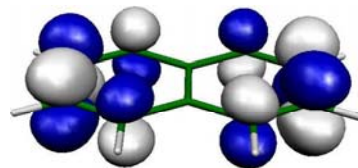
ナフタレンの軌道と反応性



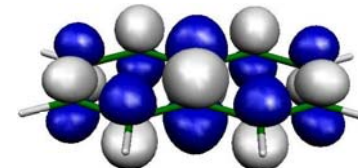
LUMO+1 (6.59eV)



LUMO+2 (8.74eV)



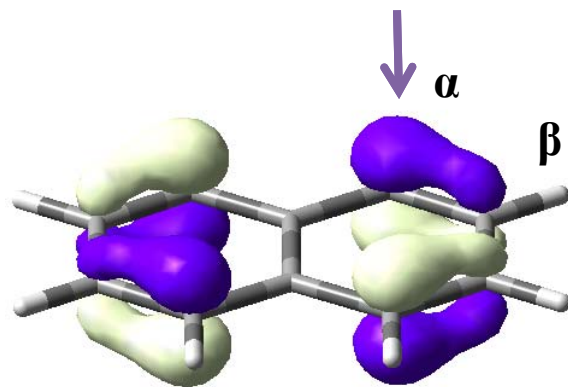
LUMO+3 (11.20eV)



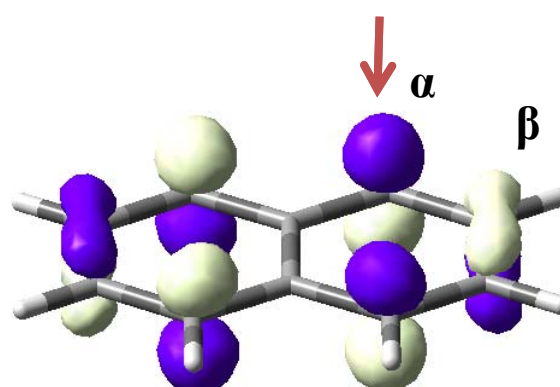
LUMO+4 (14.87eV)

求電子反応の反応位置

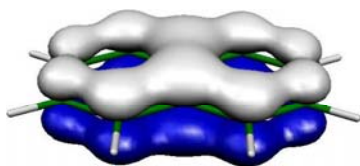
求核反応の反応位置



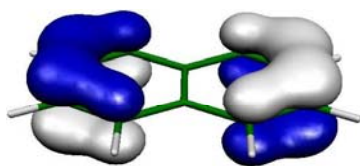
HOMO



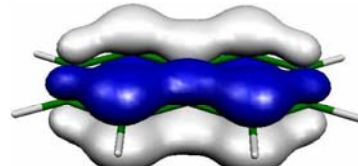
LUMO



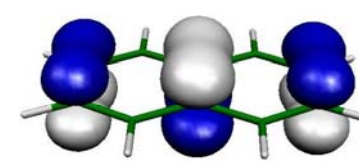
HOMO-7 (-13.37eV)



HOMO-3 (-10.98eV)

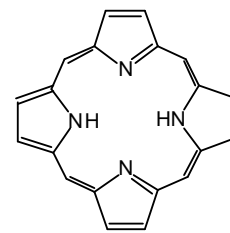
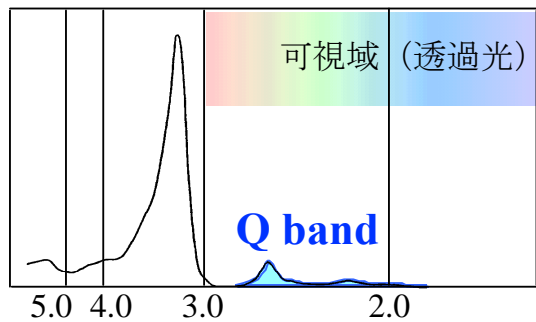


HOMO-2 (-9.07eV)

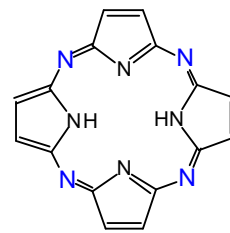
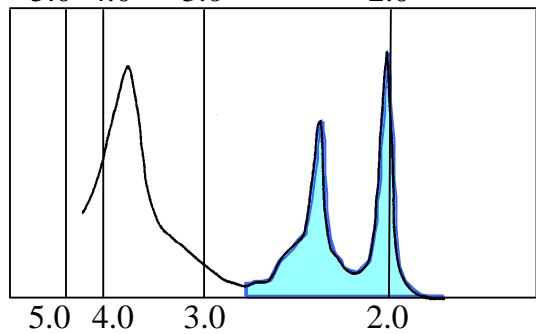


HOMO-1 (-7.23eV)

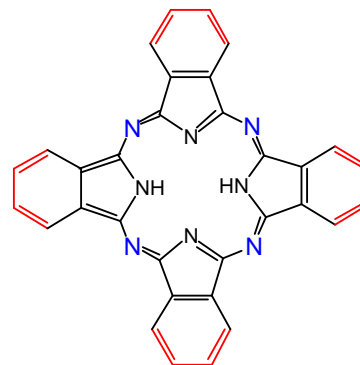
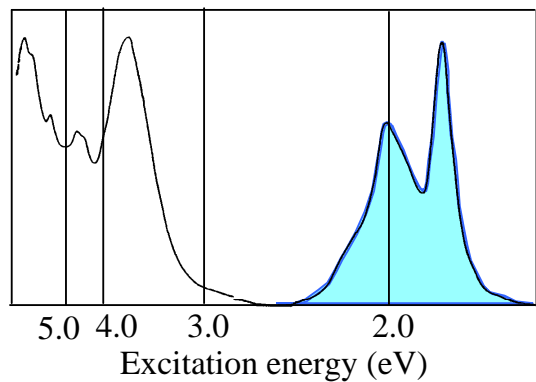
フタロシアニン類の可視吸収スペクトルの変化



Porphin



Tetrazaporphin



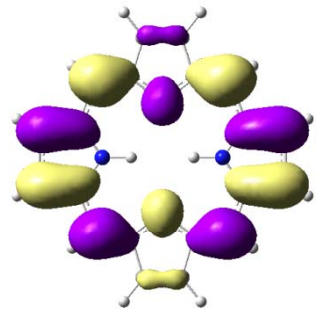
Phthalocyanine

可視吸収増大メカニズム

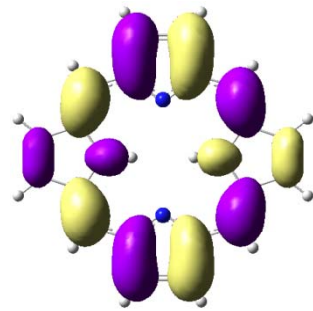


色素設計

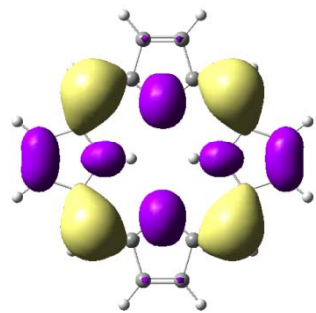
ポルフィンの光吸収：4軌道モデル



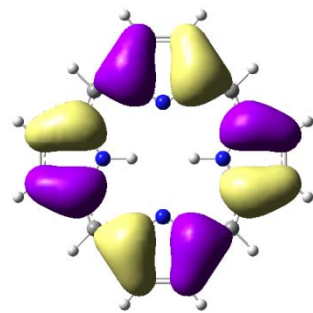
LUMO



n-LUMO

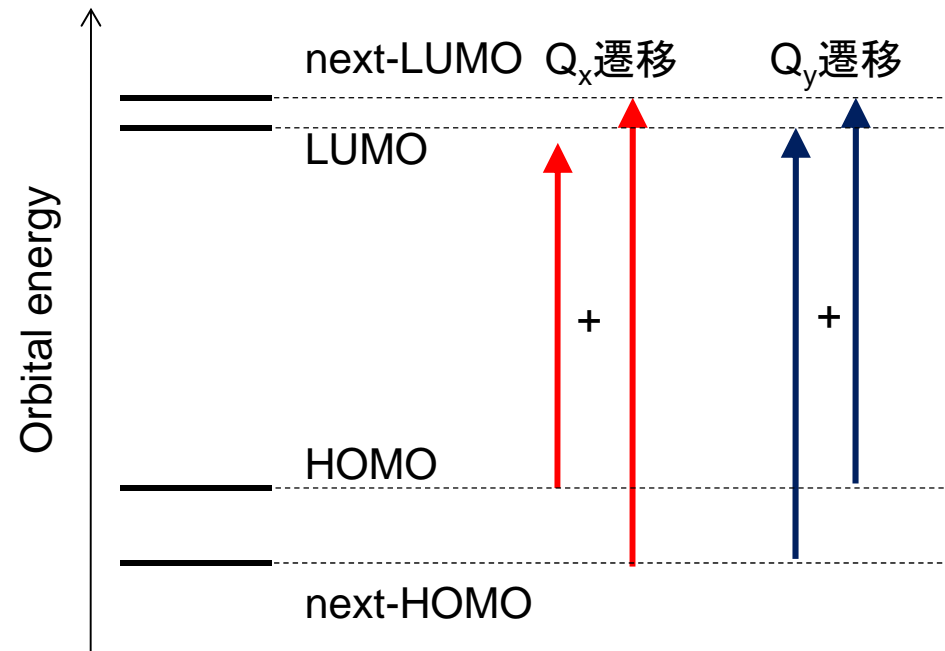


n-HOMO



HOMO

Goutermanのfour-orbital (4軌道) model:
ポルフィリンの光励起をHOMO-LUMO付近の4軌道で説明するモデル。
(定性的理解)



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紹介します。