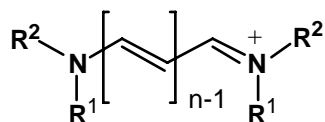
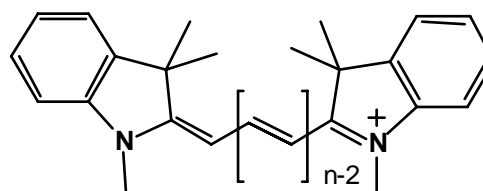


シアニン色素の New- γ を用いた INDO/S 計算太刀川達也¹、時田澄男¹、蛭田公広²、西本吉助³¹ 埼玉大学工学部応用化学科 (〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255)² 日清紡績株式会社 (〒103 - 8650 東京都中央区日本橋人形町 2-31-11)³ 岡山理科大学 (〒700-0005 岡山県岡山市理大町 1-1)

【緒言】機能性色素の構造からその励起エネルギーを正確に予測することは、分子設計の効率化につながる。われわれは、機能性色素の励起エネルギーをより精度よく予測するため、new- γ を用いた INDO/S 計算を検討している。機能性色素のひとつであるシアニン色素 (1 - 6) を対象に new- γ を適用した INDO/S 計算を行い、実測値の再現性を検討した。



- 1: $R^1 = R^2 = \text{Me}$ 4: $R^1 = \text{H}, R^2 = \text{Ph}$
 2: $R^1 = \text{H}, R^2 = \text{Me}$ 5: $R^1 = \text{Me}, R^2 = \text{Ph}$
 3: $R^1 = R^2 = \text{H}$



6

【方法】New- γ のパラメータ k の値は、Spectroactive Portion¹⁾ の概念に従い、PPP 分子軌道法の場合²⁾と同様に、シアニンの2つの窒素原子の間にある共役二重結合の数 n より k の値を算出する式: $k = 0.23n + 1.12$ に従って算出した。INDO/S 計算に用いたシアニン分子の入力座標は、AM1 分子軌道法により構造最適化した。

【結果】シアニン 1 ($n = 1 - 5$) での計算値と実測値の相関を図 1 に示す。INDO/S 計算より得られた値は、PPP 計算での値²⁾と異なり、共役鎖が短い分子で計算値が実測値より低エネルギーにみられることがわかった。今後、計算に用いる入力構造の最適化の精度を高めるなどして、実測値をよく再現する方法をさらに検討する予定である。

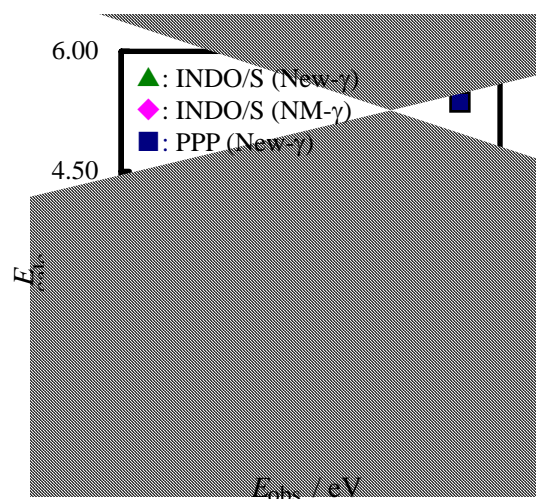


図 1. シアニン 1 の最長吸収極大エネルギーの計算値と実測値の相関

参考文献

1) K. Hiruta, S. Tokita, and K. Nishimoto, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, **1995**, 1443-1448.

2) T. Tachikawa, K. Hiruta, S. Tokita, and K. Nishimoto, *J. Jpn. Soc. Colour Mater.*, **71** **1998** 481-487.