

シアニン色素の New- γ を用いた INDO/S 計算(2)

太刀川達也¹、時田澄男¹、蛭田公広²、西本吉助³

¹ 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】平面 π 電子系のみに限られていた new- γ を用いた PPP 計算を INDO/S 計算に拡張し、色素化合物の吸収スペクトルについて、より実測値に近い計算値を得るためのパラメトリゼーションの手法を検討している。今回、機能性色素のひとつであるシアニン色素 (1 - 5) を対象に new- γ を適用した INDO/S 計算を行い、それらの最長吸収極大波長の計算値を求め、実測値の再現性を検討したので報告する。

【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 l より k の値を算出する式: $k = 0.23l + 1.12$ 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 - 4 の実測値と計算値を図1に示す。計算値は実測値より短波長に得られる傾向があるが、new- γ を用いることで計算値の再現性の向上が認められた。シアニン 1, 2 よりシアニン 3, 4 で良い再現性が得られた。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。
参考文献

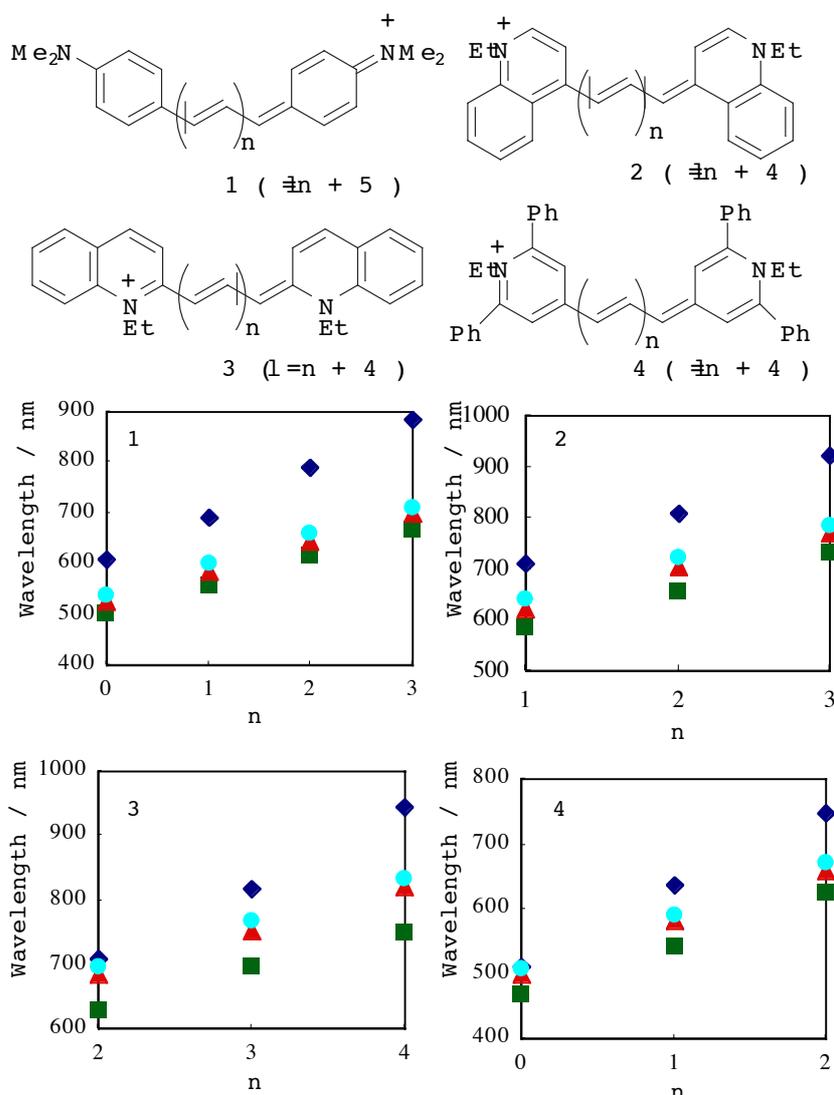


図1 シアニン 1-4 の最長吸収極大波長の計算値 (● : new- γ ; CI=(50,50), ▲ : new- γ ; CI=(25,25), ■ : NM- γ) 及び、実測値 (◆)

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