

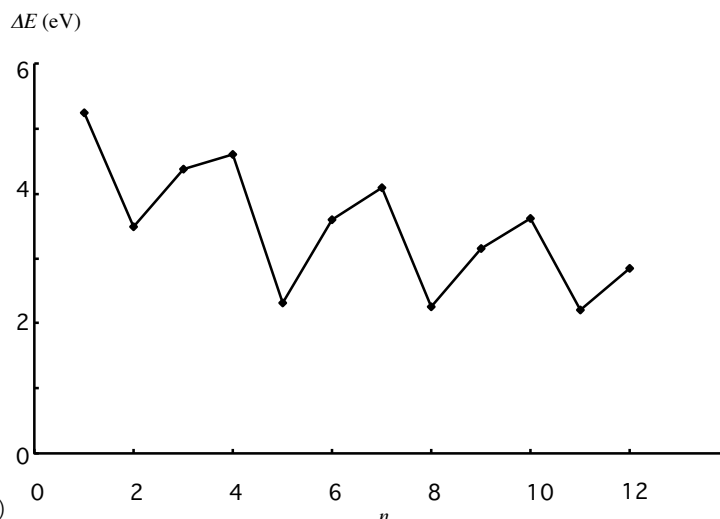
筒状フラレンにおける周期的 π 電子構造変化について

○野村泰志、成田進

信州大学繊維学部 (〒386-8567 長野県上田市常田 3-15-1)

<序>

我々は以前、一般式が C_{60+10n} ($n=1,2,\dots$) で表される筒状フラレンにおいて、その HOMO-LUMO ギャップエネルギーの n 依存性には、Fig.1 のような、 $\Delta n = 3$ の周期的変化があることを、CNDO/S 計算によって示した。そして、 π 電子共役系がフラレンチューブ側面の部分構造とも見なせる、C 原子数が 30 のペンタフェニレン構造上に局在化し易い事を、Pauling bond order (PBO) を用いた解析により確認し、その事が上記の周期的変化に関係していると結論づけた [1]。

Fig.1 C_{60+10n} の HOMO-LUMO ギャップエネルギー

本研究では、Gutman らが提唱した π 電子系に対する指標である過剰環上 π 電子容量 [2] を用いて、上記の周期的変化に対する解析を行い、その周期性の原因についての考察をし直してみる。

<解析方法>

PBO は CC 結合の二重結合性を表す指標であるのに対して、過剰環上 π 電子容量は、フラレンやベンゼン縮合系炭化水素のような系において、それらの面を構成する環に注目し、任意の環がある基準に比べ、 π 電子をどの程度過剰に保持しているかを表すものである。Gutman らによると、過剰環上 π 電子容量は、PBO を使って見積もられる結合上の π 電子量のある環に対する寄与の総和と、原子上の π 電子密度のある環に対する寄与の総和との差として定義される。この定義によると、基準は (結果的に)、ベンゼン分子やグラファイト中のベンゼン環になっている。

対象である筒状フラレンについて過剰環上 π 電子容量を計算し、その数値により環をマッピングしてみる事で、この系の π 電子構造の周期性との関連性を調べる。

計算結果および考察は当日発表する。

<参考文献>

[1] Y. Nomura et al., Chem. Phys. Lett., 375 (2003) 72-75

[2] I. Gutman et al., Chem. Phys. Lett., 397 (2004) 412-416