

複環共役炭化水素の電子状態予測法と芳香族性

酒井 章吾

岐阜大学工学部化学・生命工学科

(〒501-1193 岐阜県岐阜市柳戸 1-1)

(sakai@gifu-u.ac.jp)

1. 緒言

分子の構造は種々の性質と関連する。特に多環状共役分子はエネルギー的にも局所構造においてもいくらかの安定種があり、それらは異なった物理的、化学的性質を持っている。『これらの安定種をどのように予測するか?』今日、分子軌道法を用いれば安定構造を容易に計算できる。しかし、分子軌道法による計算は一つの予想構造に対し一つの安定構造しか得られない。この場合計算するための予想構造を決めることが重要になる。本発表においてはこの予測構造を見いだす方法と計算によるその電子状態の特性を調べ、その一致について報告する。

2. 方法論

先に我々は多環共役炭化水素の安定構造（電子状態）の予測法として CMAK (combination method between asymmetric Kekulé structures) を提案した。これを用いて対称な多環共役炭化水素に関して安定構造（電子状態）の予測を行なった。今回、これを更に拡張し、非対称分子の場合にも応用し、また最安定のみならず次に安定な構造（電子状態）の予測を可能にした。この予測方法 (ECMAK) において次の二点の Postulation を置く。

(A) 安定構造は一つの Kekulé 構造または二つの Kekulé 構造の組み合わせで表すことができる。

(B) 二番目以降の安定構造はより安定な構造の Kekulé 構造の要素はふくまない。予測構造の電子状態（局所芳香族性）を調べるため、局所、または全体の芳香族性は IDA を用いた。

3. 結果

一例として、ベンゾジシクロブテンはほぼ同程度のエネルギーを持つ二つの構造が有る。これらの構造(電子状態)は ECMAK から予測された。この他、四員環と六員環の組み合わせ分子について ECMAK の適用方法等当日説明する。

| | IDA | |
|---------------|-------------|-------------|
| | A- type | B-type |
| 4-ring | 3.04 | 1.21 |
| 6-ring | 0.36 | 1.62 |
| whole | 2.36 | 0.35 |