

企画番号：32

企画タイトル：有機結晶の呈色原理についての調査・研究

概要

<目的>

o-ニトロアニリンは橙色の化合物であり、*p*-ニトロアニリンは黄色の化合物である。これは配向性の違いによるものである。そんなニトロアニリンに興味を持ち、その色を示す原理をより詳しく知りたいと考えた。呈色原理は化合物の分子軌道を計算することで知ることができる。そこで *o*-ニトロアニリンと *p*-ニトロアニリンの分子軌道計算を行いそれぞれの分子軌道やエネルギー準位などを比較することで呈色原理について考察する。

<計画>

1. 分子軌道計算を行う。
2. 吸光度を計測する。
3. 1・2より得られた結果をもとに呈色原理について考察する。

<調査方法>

内田研究室助教の服部先生にご協力いただき、分子軌道計算と吸光度測定を行った。

<活動経過>

| 日時 | 内容 |
|--------------|-----------------------------------|
| 6月29日 | <i>o,p</i> -ニトロアニリンの分子軌道計算を行った。 |
| 7月1日 | <i>o,p</i> -ニトロアニリンの吸光スペクトルを計測した。 |
| 7月5日/7月8日 | 分子軌道計算の結果と吸光スペクトルとの関係について考察した。 |
| 9月10日~10月24日 | 報告書・ポスターの作成 |

<結果・考察>

o,p-ニトロアニリンの分子軌道計算を行うことにより、*o*-ニトロアニリンのほう HOMO-LUMO ギャップが小さく *p*-ニトロアニリンよりも長波長側にあることが分かった。また、アニリンとニトロメタンの分子軌道計算の結果と比較することで、*o,p*-ニトロアニリンの HOMO と LUMO のエネルギーの大きさの関係が考察できた。

実際の試薬と溶液では *o,p*-ニトロアニリンの色が異なった。その理由は、固体では分子間相互作用により、HOMO と LUMO のエネルギーの差が小さくなるため、少し波長が長波長側に移動したためであるとわかった。

吸光度測定を行うことにより、*o*-ニトロアニリンでは 230 nm と 380 nm 付近に吸収ピークが見られ、*p*-ニトロアニリンでは 320 nm 付近に吸収ピークが見られることが分かった。

実際の試薬の色から予想される波長の大小関係と同様な結果となり、*o,p*-ニトロアニリンの波長の関係性を示していることがわかった。