

1. 実験

1.1 使用機器

ソフトウェア：富士通 SIGRESS

OS： Windows 7 Enterprise

プロセッサ：Intel(R) Core(TM) i5-2400 CPU @ 3.10 GHz

分子の描き方やモデリング方法のチューリアル日本語版：

C:\Program Files (x86)\Fujitsu\SIGRESS 2.5.2\GettingStarted_JP.pdf

1.2 SIGRESS の起動と新規プロジェクトの作成

スタート | すべてのプログラム | SIGRESS 2.5.2 | Workspace をクリックし、SIGRESS を立ち上げた。ただし、| は「をクリックし」を意味する。左クリックを単にクリックと記述し、右クリックと区別する。○○ | とあれば、PC 画面上に「○○」と書いてある部分を探し、クリックすることを意味する。クリックしなくても、カーソルを持っていくだけで、次の選択肢が出てくる場合もある。

新規作成をクリックし、プロジェクトエクスプローラの Untitled 1 を Molecules に変更した。

1.3 フェリシアニド($[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$)の作成

プロジェクトエクスプローラ中の Molecules フォルダをマウスで右クリックし、新規作成ウィザード | 手書き を選択し、OK を右クリックした。現れたモデリングウィンドウ上で、ツールパレットの描画を選択し、スタイルバーの元素の選択の周期表をクリックし、Fe26 を選択し、OK をクリックした。混成状態の選択を sp³-四面体に、電荷を 3 に、Change the style of the selected bonds を単結合に選択し、鉄原子 1 つをウィンドウの中心に配置した。次にスタイルバーの元素の選択を C-Carbon に、混成状態の選択を sp³-四面体に、電荷を 0 に、Change the style of the selected bonds を配向結合に選択し、炭素原子 6 つを鉄原子の周囲に配置した。鉄原子をクリックし、それぞれ炭素原子に向かってドラッグすることにより結合した。次にスタイルバーの元素の選択を N-Nitrogen に、混成状態の選択を sp³-四面体に、電荷を -1 に、Change the style of the selected bonds を三重結合に選択し、窒素原子 6 つを鉄原子の周囲に配置した。窒素原子をクリックし、それぞれ炭素原子に向かってドラッグすることにより結合した。

(オプションメニュー)編集 | すべてのを選択 | により、錯体全体を選択した。

(オプションメニュー)構造整形 | 簡易整形 | により、形状を整えた。

簡易整形後、(オプションメニュー)ファイル | 名前を付けて保存 | により、プロジェクトエクスプローラ上のファイルを保存した。この時、ファイル名は[Fe(CN)₆]³⁻.csf とした。(この時、原子に異常があると表示されますが、「はい」をクリック)

1.4 HOMO/LUMO(分子軌道エネルギー)の計算

プロジェクトエクスプローラから、計算を行う csf ファイルを選択し、モデリングウィンドウを開き、(オプションメニュー)プロシージャ | 計算方法の選択と計算の実行を選択した。対象の選択を chemical sample、目的の選択を HOMO&LUMO、計算方法の選択を standard procedure とし、スタートし計算を行った。計算終了が表示されたら、計算状況のウィンドウを閉じ、(オプションメニュー)表示 | 表面の表示 | 面の表示 | OK を選択し、求められた HOMO を表示した。

Fig.1 に HOMO が表示された[Fe(CN)₆]³⁻の SCIGRESS 画像を示す。

HOMO 5.82eV

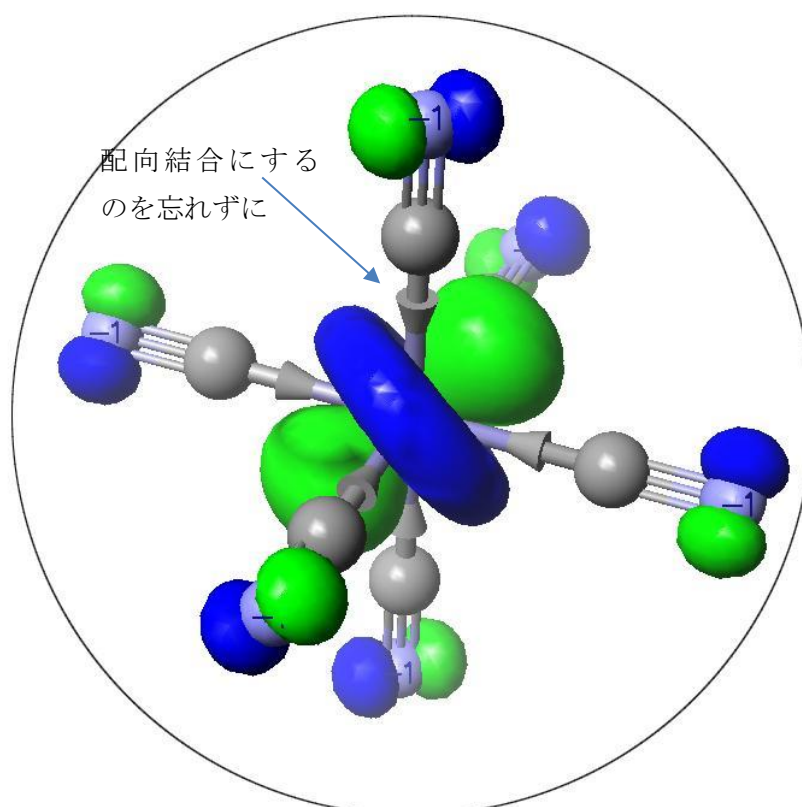


Fig.1 HOMO が表示された[Fe(CN)₆]³⁻の SCIGRESS 画像