

有機電子論の基盤シリーズ

(学部3年生・4年生および大学院生対象)

(4 研究科合同セミナー)

有機電子論の基盤1 2003年12月11日(木)15:00~16:30

有機電子論の基盤2 2003年12月11日(木)16:50~18:20

場所: 理学部 B501室

担当: 細矢 治夫 先生 (広島大学客員教授・お茶の水女子大学名誉教授)

各回のテーマと内容の概要:

「有機電子論の基盤1」 トポロジカルインデックス

グラフ理論の基礎を先ず解説する。次に、グラフの種々の特性化を紹介し、トポロジカルインデックス Z とその簡単な計算方法について詳しく解説する。

「有機電子論の基盤2」 “From How to Why”

不飽和共役炭化水素分子の電子系の性質の違いが、分子のトポロジーにどのように依存するかを紹介する。次に、それらと Z との相関関係を説明し、その謎解きの糸口を探る。

「有機電子論の基盤シリーズ」の全体の内容(全5回程度を予定)

トポロジカルインデックスについて: 分子グラフの特性化における種々の試みを紹介し、トポロジカルインデックス(Z)について詳しく説明する。飽和炭化水素の炭素原子骨格に相当するグラフの Z が沸点のような熱力学的性質と良い相関にあることを紹介し、その原因を考察する。

From How to Why: 不飽和共役炭化水素分子の電子系の性質の違いが、分子の枝分かれや環の大きさや縮合の仕方にどのように依存するか、また古典的な有機電子論等の経験的な規則を紹介し、それらの規則が数学的にどのように裏付けされるかをグラフ理論的分子軌道法によって説明する。

(次回は1月の予定)