

ケイ素, リン, 硫黄及び塩素を含む芳香族及び 複素環化合物への CNDO/S 法の拡張

高田 智*, 小野 行雄, 上田 陽**

Chemical & Pharmaceutical Bulletin, 33(8), 3077-3091(1985)

Extension of the CNDO/S Method to the Calculation of Aromatic and Heterocyclic Compounds Containing Si, P, S and Cl

Satoshi TAKATA*, Yukio ONO, and Yo UEDA**

ABSTRACT The extension of the CNDO/S calculation to aromatic and heterocyclic compounds containing Si, P, S or Cl was investigated in detail. Parameters of the second-row elements were optimized by using as many types of compound as possible. The *spd* basis sets were shown to be superior to the *sp* basis sets in the calculation. The results of this investigation showed that not only calculated transition energies but also orbital energies coincide very well with observed values without exception.

The method presented in this work is expected to be widely applicable to the calculation of the electronic states of many aromatic and heterocyclic compounds containing second-row elements.

抄録 ケイ素, リン, 硫黄及び塩素原子を含む芳香族及び複素環化合物への CNDO/S 法の拡張を行い, 第3周期原子のパラメータを多くのタイプの化合物を用いて最適化した。空の 3d 軌道を含む *spd* 基底セットの計算の方が含まない *sp* 基底セットの計算よりもすぐれていることが分った。本研究の結果から, 計算で求めた電子遷移エネルギーと軌道エネルギーの絶対値が電子スペクトルと光電子スペクトルの実測値とよく一致することが判明した。

我々の提出したパラメータと *spd* 基底セットの計算を用いれば, 第3周期原子を含むすべての芳香族及び複素環化合物の電子状態の計算に広く適用できるものと期待される。

* Fukuoka Environmental Research Center 福岡県衛生公害センター

** Faculty of Pharmaceutical Sciences, Kyushu University 九州大学薬学部