

Potential Energy Surface Topology  
II. ポテンシャルエネルギー面の形状の予測.  
H+HX (X=F, Cl, Br, I)引き抜き反応

田 中 昇

Potential Energy Surface Topology  
II. Forecast the Features of the Potential  
Energy Surfaces for H+HX (X=F, Cl, Br, I)  
Abstraction Reactions

Noboru TANAKA

Abstract

Relations between the diatomic constants and the feature of the potential energy surfaces are investigated for a modeling HHX triatomic system. By using the relations, the potential energy surface features, for H+HX (X=F, Cl, Br, I) abstraction reaction, are forecasted.

1. はじめに

励起エネルギーの反応促進効果とポテンシャルエネルギー面の形状との関連を探る動力学的研究は、化学反応の衝突過程を理解する上で多くの貢献をしてきた。これらの動力学的研究に加えて、反応分子の性質（物性パラメータ）とポテンシャルエネルギー面の形状との相関を探ることは興味深い。

先の論文において、反応ポテンシャルエネルギー面を計算するための半経験的方法（MT法）<sup>1,2)</sup>の提案とその方法を利用して反応分子の“diatomic constants”とポテンシャルエネルギー曲面の形状との相関を探る形状解析法<sup>3-5)</sup>を提案した。

本研究においては、モデル反応系（HHX系）において形状解析を行い、“diatomic constants”とポテンシャルエネルギー面の形状、

特に鞍点の位置、障壁の高さなどとの関連を明らかにした。さらに、その結果を利用すると、水素とハロゲン化水素（HX）との引き抜き反応に対して、HX分子の“diatomic constants”からポテンシャルエネルギー面の形状の予測も行うことができた。

本論文はつぎのように構成されている。第2章では、研究の背景となる反応ポテンシャルエネルギー面を半経験的に評価する方法の特徴について、ついで、著者が提出する方法（MT法）がポテンシャルエネルギー面の形状と反応分子の物性パラメータとの相関を探る方法として有用であることを論ずる。第3章では、MT法によって、いかに反応分子の“diatomic constants”とポテンシャルエネルギー面の形状との相関を探るかを明らかにする。そして、二個の水素原子（H）と水素原子と異なる原子（X）からなるモデル三原子系（HHX系）において、ポテンシャルエネルギー面の形状解析を行い、“diatomic constants”とポテンシャルエネル

昭和62年10月31日受理

\* 一般教育助教授