

課題名 (タイトル) :

## 光反応理解のための分子軌道計算

利用者氏名 : 太田英介

所属 : 袖岡有機合成化学研究室

- 
1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係  
有機化合物は光照射により励起状態に遷移し、種々の光反応を起こす。光化学反応は、ほとんどの場合、最低励起状態を経て進行するが、有機化合物は個々の最低励起状態を持ち、電子遷移にかかわる軌道の性質を知ることが、反応形式の理解には重要である。本課題では、最低励起状態のエネルギー準位や性質を計算し、実験事実と照らし合わせることで、計算化学および有機化学両側面から光化学反応を理解することを目的とした。
  2. 具体的な利用内容、計算方法  
Gaussian セミナーでの構造最適化計算 (DFT, B3LYP)
  3. 利用がなかった場合の理由  
当初の想定より光反応解析に難航し、未だ反応機構を議論できる段階に至っていない。本年度はセミナー範囲内の利用にとどまった。