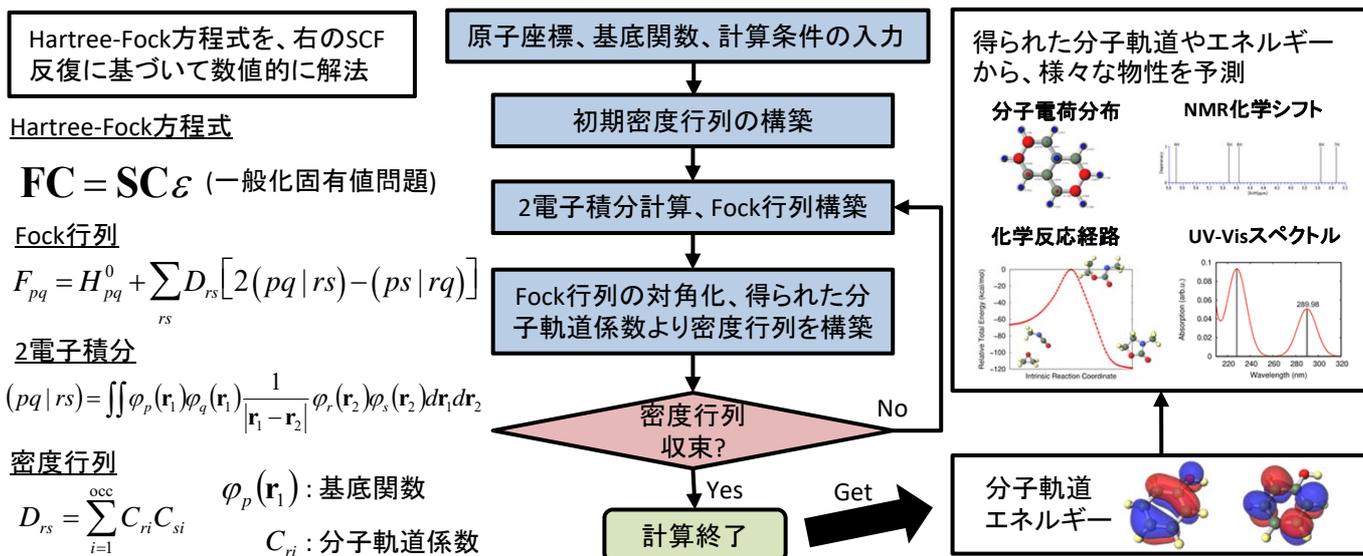


# 量子化学計算技術を用いた色素分子の吸収波長の予測

量子化学計算は分子構造の特定や、分光スペクトル予測、化学反応経路探索等、様々な物性解析が可能となるシミュレーション技術である。今回は、量子化学計算の予測性能を示すため、18個の色素分子の吸収波長を計算した。その結果、計算値と実験値との良好な相関が得られた。

## Hartree-Fock法: 分子軌道法を用いた量子化学計算の基礎理論



## 色素分子における吸収波長のシミュレーション

計算対象とした分子と吸収波長の計算値一覧

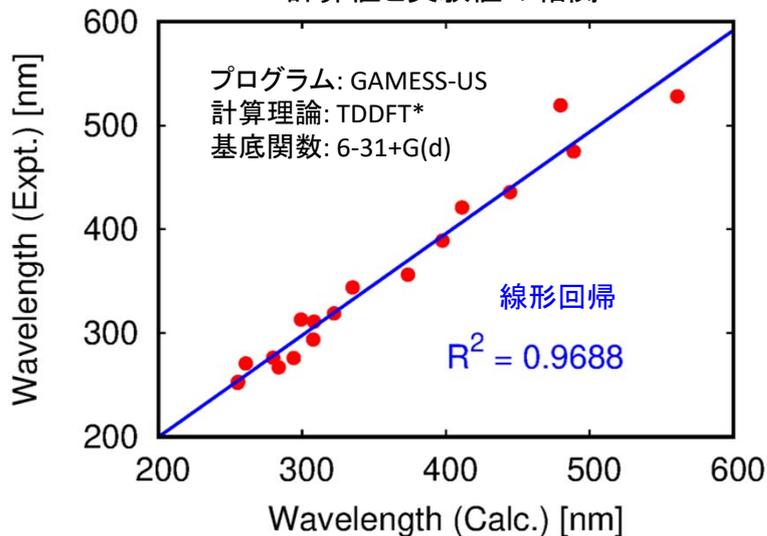
分子	計算値 (nm)	実験値 (nm)
Benzophenone	255.15	252 [1]
Benzotriazole	255.49	253 [1]
Phenol	260.83	270.75 [1]
p-Terphenyl	279.85	276.25 [1]
TCNE	283.73	267 [1]
cis-Stilbene	294.21	276 [1]
Quinoline	299.31	313 [2]
trans-Stilbene	307.68	293.75 [1]
Coumarin	308.34	311 [2]
Azobenzene	322.29	319 [1]
DAPI	335.17	344 [1]
Anthracene	373.66	356.25 [1]
5,12-Naphthacenequinone	397.65	389 [2]
Alizarin	411.33	421 [2]
Perylene	444.68	435.75 [1]
Nile Red	479.8	519.4 [1]
Tetracene	488.93	475 [1]
Rubrene	561.1	528 [2]

吸収波長の実験値の文献:

[1] <http://www.photochemcad.com/homepage.php>

[2] M. Taniguchi and J. S. Lindsey, Photochemistry and Photobiology 94, 290 (2018).

計算値と実験値の相関



\*交換相関汎関数は其々の分子に対して、実験値の再現性の良いものを選択。

実験値との良い相関が得られた。  
→ 未知化合物の吸収スペクトル予測や変色原因の特定などに適用可能!!