

MOシミュレーションによる有機低分子の吸光波長予測

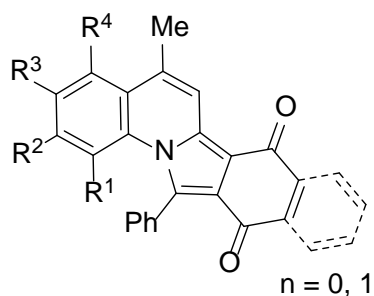
¹大阪大学大学院薬学研究科 ²近畿大学理工学部
諏訪 志典¹, 川嶋 裕介¹, 川下 理日人², 田 雨時¹, 高木達也¹

目的 プローブ分子によるイメージング技術が生命現象の解明に大きく貢献してきているが、そのプローブについては近赤外線吸収を示すような化合物が望まれている。そこでMOシミュレーションによる新規構造の導出のために、新規有機色素及びその誘導体について、量子化学計算により構造の違いによる吸光波長の変化の再現を行う。

内容 下に示す10構造の化合物に対してGaussain09を用いてMOシミュレーションを行った。DFT法によって電子基底状態における構造の最適化、TD-DFTを用いて一電子励起状態におけるエネルギーを求め、そのエネルギー差を吸光波長とした。計算レベルには真空中でB3LYP/6-31G(d)を用いて、比較にはクロロホルム中の測定値を用いた。

結果 計算値と実測値をプロットしたものが右下のグラフである。回帰分析を行ったところ相関係数が0.79と高い値が得られた。1と3、6、7のような同位置の置換基間での違いによる影響を反映できていることから、有効な手段であることが確認された。

利用した計算機	VCC
ノード時間	810時間
使用メモリ	1GB
並列化	16並列



No.	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	n
1	H	H	H	H	0
2	H	H	H	Cl	0
3	H	H	Cl	H	0
4	H	Cl	H	H	0
5	Cl	H	H	H	0
6	H	H	Br	H	0
7	H	H	Me	H	0
8	H	H	H	H	1
9			a)		0
10	H	H	H	Cl	1

