

異種四核金属錯体における 物性の予測および分子軌道計算

大阪大学大学院 基礎工学研究科 氏名 坂本和隆

目的 光誘起触媒として反応性の探索を行っている異種四核金属錯体に関して、軌道計算などお駆使することで、光によって触媒反応が進行する機構を解明する

内容 Gaussian 16 を利用して、異種四核金属錯体の構造最適化を行い、紫外可視吸収スペクトル計算や分子軌道計算を行った。

結果 錯体の吸収スペクトルおよびその遷移に該当する軌道を可視化することで、触媒活性との比較や最適と考えられる波長を明らかにした。

利用した計算機 SQUID

ノード時間 2500時間

使用メモリ 200GB

