

# モリブデン錯体を用いた可視光駆動型の脱水素化反応 における錯体の励起状態計算

上田 瑛太郎<sup>1</sup>、笠原 汰央<sup>2</sup>、森下 大成<sup>1</sup>、坊農 由磨<sup>1</sup>、劔 隼人<sup>1</sup>

<sup>1</sup>大阪大学大学院工学研究科、<sup>2</sup>大阪大学大学院基礎工学研究科

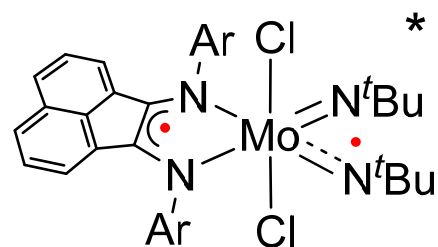
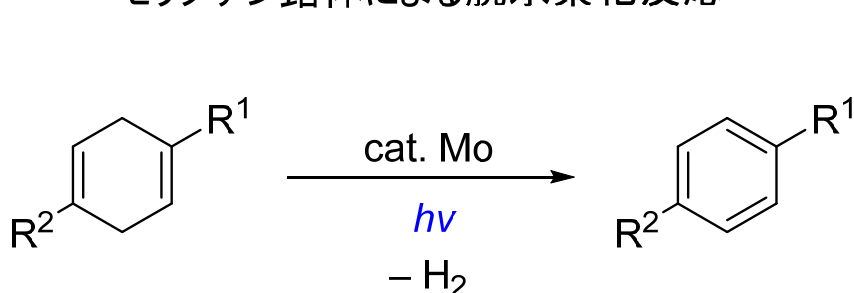
**目的** モリブデン錯体の可視光励起を利用した1,4-シクロヘキサジエン誘導体の脱水素化反応について、DFT計算を用いて錯体の分子軌道および励起状態の構造を明らかにすることを目的とする。

**内容** Gaussian 16 を利用して、錯体の基底状態、および励起状態それぞれの構造最適化とスピン密度計算を検討し、それらの比較を行った。

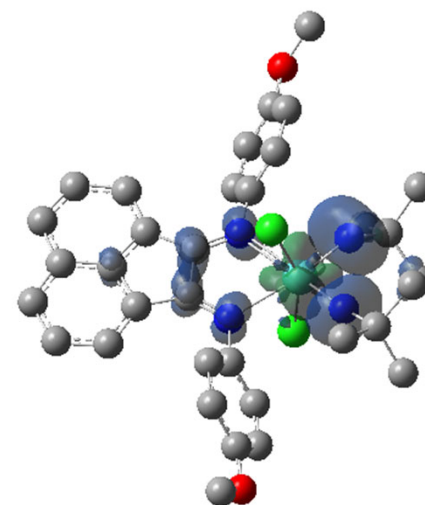
**結果** 可視光照射下で生成する励起状態のラジカル性の反応活性種について、その構造および詳しい電子状態を明らかにすることに成功した。

利用した計算機：SQUID ノード時間：2300 時間 使用メモリ：200 GB

モリブデン錯体による脱水素化反応



**Reactive species**



DFTにより明らかにした反応活性種とそのスピン密度分布