

成果の概要を記入してください。必要に応じてページを加えても構いませんが、pdf のファイルサイズの上限は2MB とします。

Write up your research report in this area. Total file size should be less than 2 MB in PDF format.

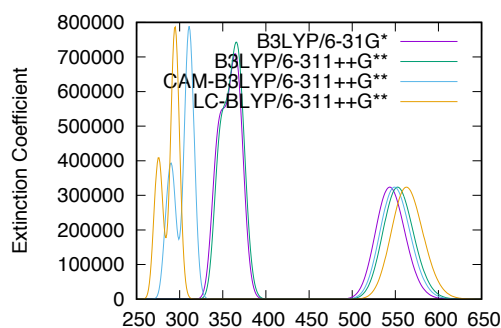


Figure 1 人工色素フタロシアニンにマグネシウムを中心金属として導入したものの吸収スペクトルを、計算精度を変えて比較。

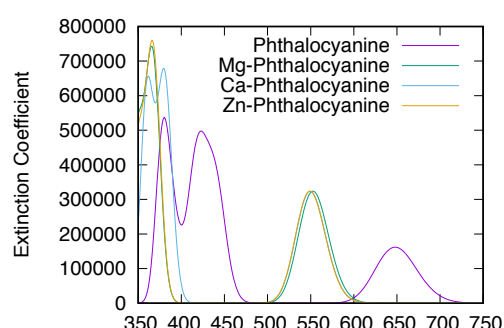


Figure 2 人工色素フタロシアニンに様々な中心金属(地球の地殻での存在度が比較的大きいもの)を導入したものの吸収スペクトル。

M型矮星周りにおいて実現可能な光合成について調べるために、クロロフィルなどで知られる光合成色素の励起状態のデータベースを作成している。データベースを作成してからは、より長波長の光環境で活性のある光合成色素を設計・提案する。現在はデータベースを作成している段階であり、クロロフィル、バクテリオクロロフィル、カロテノイドなどの色素を中心金属や側鎖、溶媒などを変えて励起状態を計算している。ここで示したのは長波長を吸収する人工色素が既に作成されているフタロシアニンの計算結果であり、**Figure 1**においては計算精度のベンチマークを行った。長距離相互作用を考慮した汎関数を用いるべきであることが示され、さらに他の手法と比較してこのポルフィリン系の分子の吸収特性を精度良く計算できる手法を選ぶ必要も出た。**Figure 2**では地球の地殻において存在度の大きい金属をフタロシアニンの中心に導入したときの吸収スペクトルである。ここでは、中心金属を持たない通常の色素の方が第一励起状態のエネルギーが小さく、この原因を探るためにHOMO/LUMOの可視化をした。**Figure 3**によると、HOMO/LUMO周辺のオービタルが、中心金属を持つ場合とそうでない場合で顕著に異なることが示された。これらの量も色素設計をする上で重要であるので、今後の解析に取り込む。

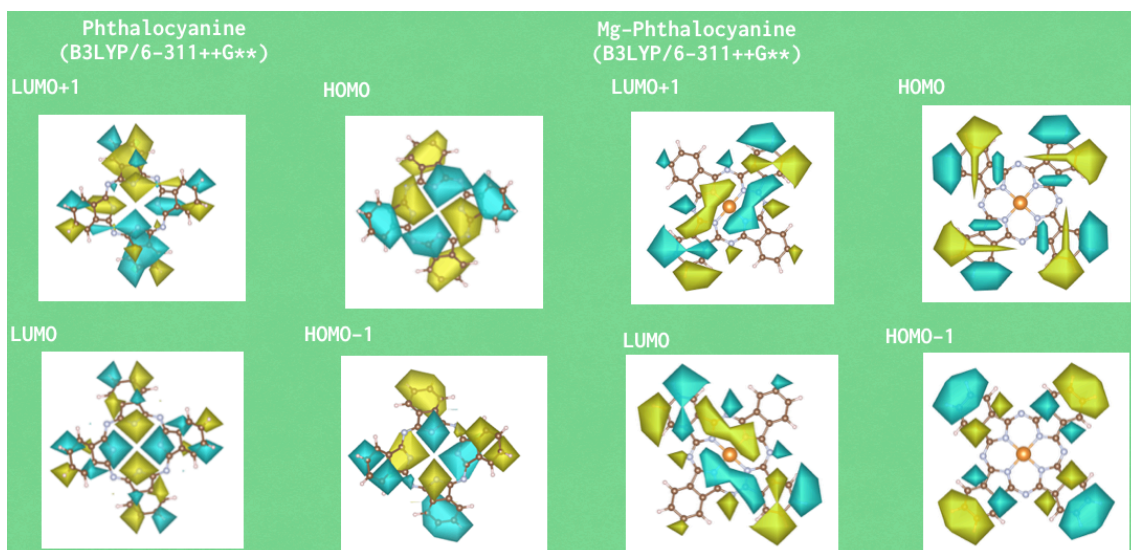


Figure 3 人工色素フタロシアニン（左）と、マグネシウムを中心金属として導入したものの（右）の HOMO/LUMO 周辺のオービタル。ここでの計算手法は B3LYP/6-311++G**。