

博士論文概要 「環境情報からのメッセージ」 環境生命学専攻

名前	指導教員	論題	論文要約
黄 智勇	松本真哉	X 線構造を用いた半経験的計算法と TD-DFT 計算法によるアントラキノン系色素の吸収特性の検討	色素の電子状態の検討に、種々の分子軌道計算の手法が用いられる。最近では、吸収スペクトルの計算に時間に依存した密度汎関数法がよく用いられているが、吸収波長の定量性に加え、遷移状態に関連する分子軌道などが詳細に議論される例は限られる。本論文では、精度の高い結晶構造を用いて、幾つかの半経験的手法と密度汎関数法を用いて吸収スペクトルを計算し、遷移状態と分子構造の関係などについて検討した結果を報告した。