

天辰 禎晃（あまたつ よしあき）

【研究課題名】局所的らせん柔構造を有する新規な光機能性分子素子の理論設計



秋田大学工学資源学研究所 准教授

【E-mail】amatatsu@ipc.akita-u.ac.jp

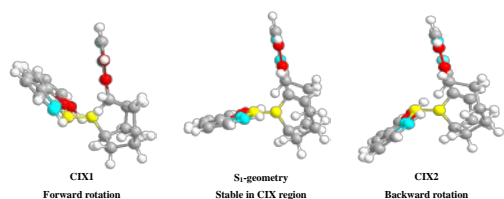
【専門】計算化学

【キーワード】計算化学、光化学反応、分子設計、
 π 電子共役系、電子励起状態

計算化学的手法により π 電子共役系を有する新規な光機能性分子の設計を行う。また、分子設計における指針を得るため、基本的な π 電子共役分子の光化学反応に関する理論的な検討も併せて行う。

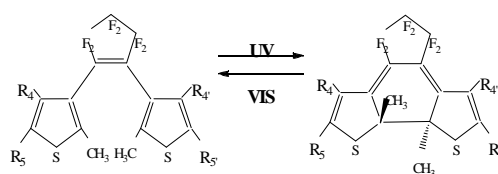
〈研究グループアクティビティー〉

メチレン鎖架橋により局所的らせん柔構造を制御した光機能性分子素子の理論設計



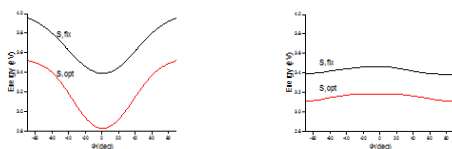
*P, P'*らせん異性体間の直接変換によるスムーズな回転をする光駆動型分子モーター

ジアリールエテン類の光閉環・開環反応を利用した分子素子の理論設計



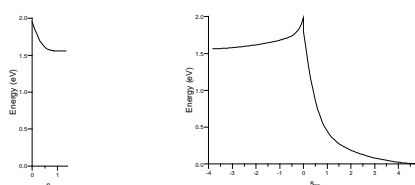
置換基 R_5 との振電相互作用による蛍光モジュレーション機能を有するジアリールエテン類

高周期元素多重結合を有する分子の電子励起状態に関する理論的解明



アゾベンゼン (PhN=NPh ; 左) とその類縁体ジフェニルホスフェン (PhP=PPh ; 右) の S_1 におけるフェニル振れに関するポテンシャル面の相違

基本的な π 電子共役系分子の光化学的挙動に関する理論的解明



アズレンの S_1 - S_0 内部転換：IRC 解析による S_1/S_0 の円錐交差における非平面化の確認

Yoshiaki Amatatsu

【Research Subject】 Theoretical Design of New Photofunctional Molecular Devices with a Locally Flexible Helical Structure



Associate Professor

**Graduate School of Engineering and Resource Science
Akita University**

【E-mail】 amatatsu@ipc.akita-u.ac.jp

【Speciality】 Computational Chemistry

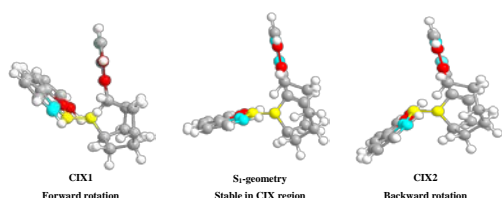
【Keywords】 Computational Chemistry, Photochemical Reaction,
Molecular Design, π conjugated system, Excited States

We are challenging to design photofunctional molecular devices computationally. We also theoretically examine the photochemical reactions of prototypical π conjugated molecules in order to obtain useful information in the molecular design.

Research Group Activity

Theoretical Design of Photofunctional Molecular Devices with a Locally Flexible Helical Structure

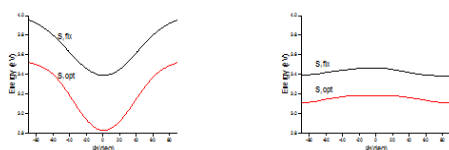
Controlled by Polymethylene Bridge



Light-driven molecular rotary motor with smooth and direct conversion from *P*-helical isomer into another one

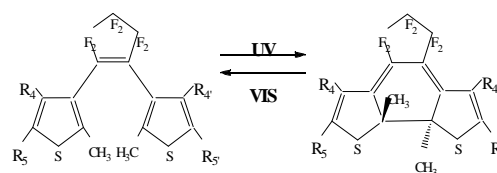
Theoretical Study on Excited States of Multiple Bond Compounds

Containing Heavier Main Group Elements



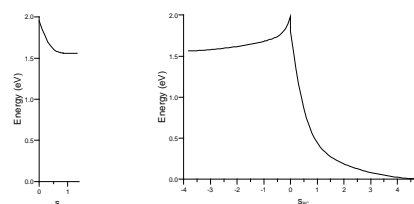
S_1 potential energy surfaces of the phenyl torsion: azobenzene(left),diphenyldiphosphene(right)

Theoretical Design of Photofunctional Diarylethenes



Fluorescence modulation through vibronic interaction between diarylethene skeleton and substituent R_5 .

Theoretical Study on the Photochemistry of Prototypical π Conjugated Molecules



IRC of the S_1 - S_0 internal conversion of azulene:

Non-planar S_1/S_0 conical intersection