

## C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-SO<sub>2</sub> 錯体の低温マトリックス環境下での光化学反応

### (3) 計算化学的検討

(産総研<sup>1</sup>、東京電機大学<sup>2</sup>) ○伊藤文之<sup>1,2</sup>、宮崎淳<sup>2</sup>

Photoreactions of the C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>—SO<sub>2</sub> complex in a low-temperature matrix (II): A pursuit of reaction pathways (<sup>1</sup>AIST, <sup>2</sup>Tokyo Denki University) ○Fumiyuki Ito,<sup>1,2</sup> Jun Miyazaki<sup>2</sup>

In the last conference we explored the reaction pathways of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>—SO<sub>2</sub> complex following UV excitation via S<sub>1</sub>-S<sub>0</sub> transition (250-300 nm) by using density functional calculations. We will present preliminary results on a dynamical aspect of this reaction obtained computationally. *Keywords* : Matrix-isolation; density functional theory; infrared spectroscopy; T<sub>1</sub> state

我々は一昨年・昨年の本学会で、低温 Ar マトリックス中におけるエチレン C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> と二酸化硫黄 SO<sub>2</sub> の光誘起反応生成物の赤外分光と、密度汎関数法による同定について発表した<sup>1)3)</sup>。本研究では、光励起に伴い SO<sub>2</sub> が項間交差により S<sub>1</sub>→T<sub>1</sub> 緩和を行ってから C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> と反応するという仮定の下、T<sub>1</sub> ポテンシャル曲面上での錯体の挙動を非経験的分子動力学計算により検討したので、その予備的な結果について発表する。

先ず B3LYP-D<sub>3</sub>/6-31+G(d)レベルで S<sub>0</sub> 状態における C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>—SO<sub>2</sub> 錯体の構造最適化を行った。Frank-Condon 状態を初期構造として、同錯体の T<sub>1</sub> 状態での時間発展を Gaussian (09 および 16) の BOMD・ADMP を用い 1ps 程度追跡した。30K に仮定した初期運動量分布から 10 本程度のトラジェクトリーを得た結果、ほぼ全ての場合において単一の構造 (図 1) に収束することがわかった。この構造は、我々が先に同定した反応生成物 (図 2) の T<sub>1</sub> 状態と同一である。反応経路におけるポテンシャルエネルギー変化 (図 3) は、この反応チャンネルが barrier-less であることを示している。詳細は当日発表する。



図 1

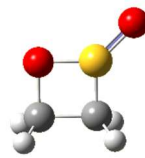
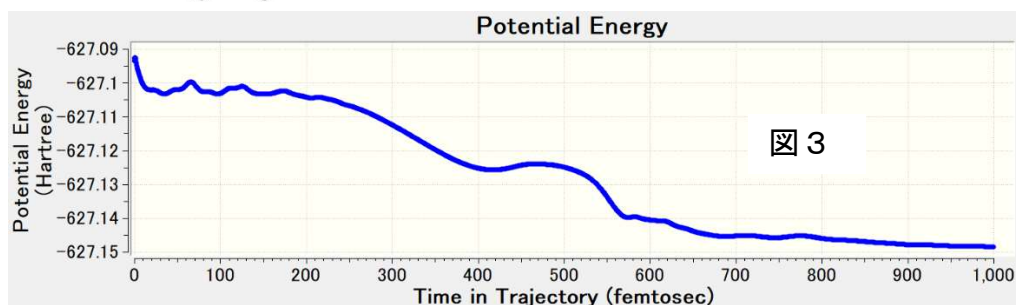


図 2



- 1) 日本化学会第 103 春季年会、K201-4am-01. 2) 日本化学会第 104 春季年会、A1452-3pm-01. 3) Takahashi *et al.*, *Molecules* **29**, 5362 (2024).