

S_1 電子状態を介した 3,5-dimethylisoxazole の光異性化過程に関する非断熱 *ab initio* 動力学研究

(上智大院理工¹・上智大理工²) ○木村 美都稀¹・南部 伸孝²

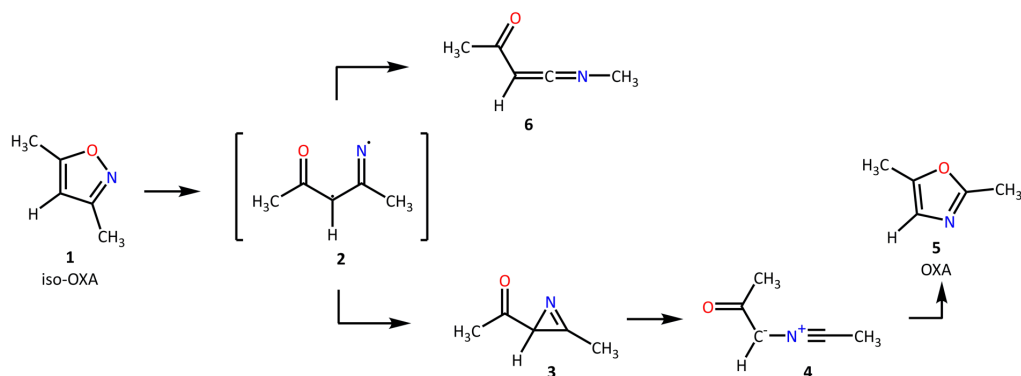
Nonadiabatic *ab initio* chemical reaction dynamics for the photoisomerization reaction of 3,5-dimethylisoxazole via the S_1 electronic state (¹*Graduate School of Science and technology, Sophia University*, ²*Faculty of Science and Technology, Sophia University*) ○Mizuki Kimura¹, Shinkoh Nanbu²

Since the 1960s, research has been conducted on isoxazole, a versatile molecule used in pharmaceuticals, corrosion inhibitors, agrochemicals, and other fields. It is known to undergo isomerization when exposed to light. Nunes *et al.* proposed a reaction mechanism for photoisomerization by performing photoirradiation experiments on 3,5-dimethylisoxazole in an Ar matrix. Upon light irradiation of compound **1**, compounds **3**, **4**, **5**, and **6** were observed. In particular, the formation of **6** has attracted attention in recent years because of its role in pharmaceutical synthesis. In this research, we aim to elucidate the photoexcited isomerization of 3,5-dimethylisoxazole to the S_1 state by full-degree-of-freedom *ab initio* molecular dynamics calculations, taking into account non-adiabatic transitions.

Keywords : isoxazole; photoisomerization; Nonadiabatic *ab initio* Dynamics

isoxazole は五員環からなる分子であり、製薬、農芸化学、防錆剤などの分野で応用されている。さらに、isoxazole は光異性化することが知られている。Nunes ら¹⁾は、Ar matrix 上で 3,5-dimethylisoxazole への光照射実験を行った。化合物 **1** に光を照射すると、化合物 **3**, **5**, **6** が観測された。本研究では非断熱遷移を考慮した全自由度 *ab initio* 分子動力学計算により、3,5-dimethylisoxazole の S_1 状態への光励起による異性化反応を解明することを目的とした。

基底関数を cc-pVDZ+*sp* を用い、4 状態を考慮した 12 電子 11 軌道の XMS-CASPT2 法を 52 軌道、SA4-CASSCF 法を 300 軌道、500 fs 間計算を実施した。結果、化合物 **3** に異性化する収率はそれぞれ、0.558, 0.560 であった。さらに、XMS-CASPT2 では化合物 **4**, **5** への異性化も確認された²⁾。



- 1) C. M. Nunes, I. Reva, and R. Fausto, *J. Org. Chem.*, **78**, 10657-10665 (2013)
- 2) M. Kimura and S. Nanbu, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **27**, 62-76 (2025)