

13 族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明

Investigation of optical properties of organometallic complexes containing group 13 elements

京都大学大学院 工学研究科 高分子化学専攻 伊藤 峻一郎

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、13 族元素を含有する金属錯体の光学特性について、量子化学計算を用いた解析を行ってきた。当研究室ではこれまでに、13 族元素であるホウ素やガリウムなどを中心元素とする種々の錯体を合成し、それらの吸収・発光特性に関する評価を行ってきた。今回、それらの特性を評価するため、Gaussian 16 を用い、密度汎関数理論(DFT) 計算並びに時間依存(TD-)DFT 計算を行った。

対象とする分子は Fig. 1 に示したアルミニウム錯体(X = H)であり、真空中一分子を仮定した計算を行った。基底状態における構造最適化条件として、遠距離相互作用を考慮したCAM-B3LYP 汎関数を用い、基底関数として 6-31+G(d,p)を採用した。続いて、得られた基底状態における最適化構造を用い、TD-DFT 計算によって一重項励起状態における構造最適化を行った。得られたそれぞれの最適化構造は、振動計算によって対応するポテンシャルエネルギー曲面上の極小構造であることを確かめた。さらに、Franck-Condon-Herzberg-Teller 法を用いて Huang-Rhys 因子を計算することにより、分子の振電相互作用の強さを見積もった。これらの結果より、分子の光化学過程に対して寄与の大きい基準振動モードは配位6員環の面外振動モードおよび芳香環の回転振動モードであることを見出した。

これらの他に、ホウ素錯体やケイ素錯体を含有する他の低分子・共役系高分子の吸収・発光特性の評価や予測についても検討した。

発表論文(謝辞あり)

Ito, S.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Inorganics*, **2019**, 7, 100.

Kawano, Y.; Ito, Y.; Ito, S.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Submitted*.

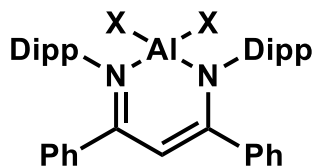


Fig. 1 Chemical structure of LAIH. (X = H, Dipp = 2,6-diisopropylphenyl).

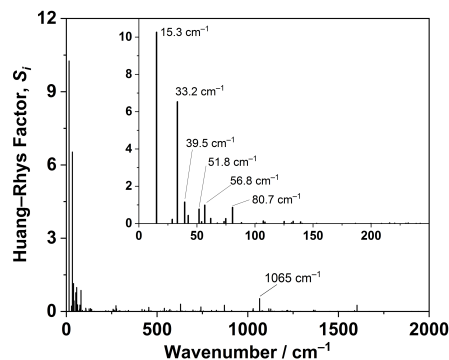


Fig. 2 Calculated Huang-Rhys factors for LAIH.