

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^[1]。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 **LAICl** 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 6-311++G(d,p)を採用した。得られた基底状態における最適化構造を用い、種々の汎関数を用いた TD-DFT 計算を行った結果を Table 1 に示す。

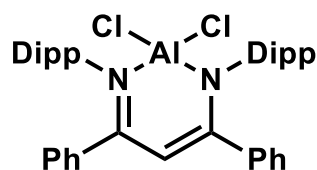


Fig. 1 Chemical structure of **LAICl**.
(Dipp = 2,6-diisopropylphenyl).

この結果、経験的パラメータを含む M06 汎関数が実験値を最も精度よく再現することが明らかとなり、この系を評価するモデルとして最適な条件を見出すことができた。

Table 1. Results of the series of TD-DFT calculations

functional	basis set	E_{S0-S1} / eV	λ / nm	f^b
CAM-B3LYP	6-311++G(d,p)	3.76	329	0.5287
M06	6-311++G(d,p)	3.58	347	0.4033
M06-HF	6-311++G(d,p)	3.67	337	0.5191
MN15	6-311++G(d,p)	3.61	344	0.6967
ω B97X-D	6-311++G(d,p)	3.78	328	0.5313
Exp ^a		3.21	386	

^a Determined from UV-vis absorption spectrum in toluene/2-methylpentane (99/1 v/v) solution (1×10^{-5} M). ^b Oscillator strength.

発表論文(謝辞あり)

特になし

発表論文(謝辞なし)

[1] Chujo, Y. *et. al. J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 18131; *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4*, 5564.