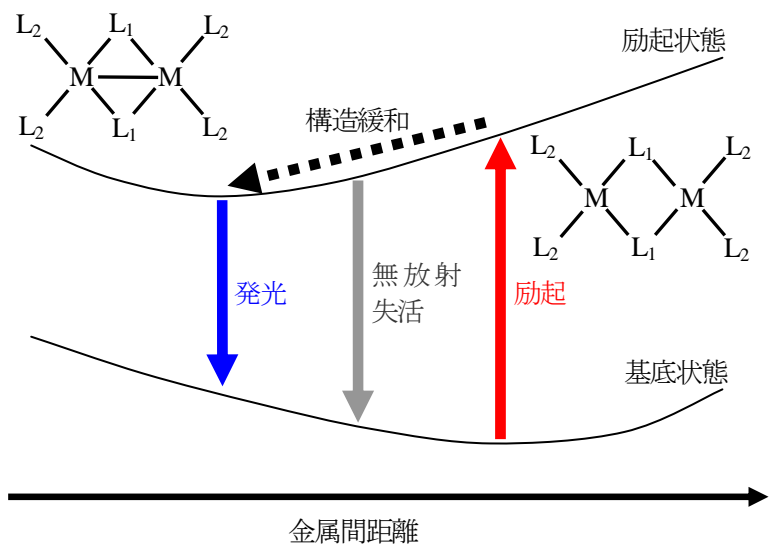


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-1. 電子状態
小項目	1-1-9. 錯体化学

概要（200字以内）	
<p>発光錯体や光誘起スピン転移錯体などの金属錯体は光デバイスやメモリなどへの応用から非常に興味を持たれている。これらの金属錯体に対して理論計算で機能の発現予測や設計を行うことは、新規錯体の開発や設計に向けて非常に有効な手段である。しかし、現状では実際に用いられるサイズの金属錯体を満足できる精度で計算することは非常に難しく、今後の理論の開発とデータの蓄積により大きく発展させる必要がある。</p>	
現状と最前線	
<p>計算機性能の向上と理論の進展により、数十原子からなる金属錯体を含む化学反応の反応熱や遷移状態の障壁などの予測が十分な精度で計算可能になってきており、実験のデータをサポートするだけでなく、反応経路の予測や新しい合成経路の提案、新しい化合物の予測などができるようになってきた。金属錯体の中には発光や光誘起スピン転移を起こす錯体が存在し、光デバイスやメモリへの応用から非常に興味を持たれている。これらの錯体では光励起により基底状態から励起状態に遷移した後に、発光やスピン状態の変化などの新しい機能が発現する。理論計算でこのような機能の発現を明らかにするためには、基底状態だけでなく励起状態の計算も正確に行う必要があり、非常に精度の高い理論が要求され、未だに理論計算で取り扱いにくい問題である。例えば、図にあるような二核金属錯体の発光現象の場合は金属間に結合が生じる可能性があり、光励起後の安定構造は基底状態の安定構造からの変化が大きい。このような錯体を理論で扱うためには励起状態での構造緩和、無放射失活による基底状態への緩和、項間交差、発光の一連の過程を全て明らかにする必要があり、現状の手法では計算時間がかかり過ぎて十分な精度での計算は不可能である。分子サイズが大きい金属錯体の場合には、最低限の必要な構造で電子状態計算を行い、構造緩和や発光のスペクトルなどの静的な情報しか得ることができない。また、光誘起スピン転移錯体では光吸収に伴いスピン状態が変化するためにメモリやスイッチへの応用から非常に興味をもたれているが、未だ有効な錯体は見つかっておら</p>	

ず、理論計算による予測と設計が可能になれば材料設計において大きな進展が望める。しかし、これらの錯体は理論的に扱いにくい鉄が含まれていることが多く、十分な精度の計算が非常に難しい。以上の問題を解決することができれば、理論が主導する新規の機能性錯体の予測や設計が可能になり、効率的な設計と開発に向けて有効な手段になる。



新版錯体化学基礎と最新の展開 基礎錯体工学研究会

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

複雑な電子状態の記述を可能とする理論の開発により、理論による金属錯体の電子状態の予測から発光やスピン転移現象を明らかにする。

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

光励起、無放射失活、項間交差、発光などの一連の過程を理論で取り扱う方法の開発と励起状態ダイナミクスにより様々な構造における動的な情報を明らかにする。

キーワード

1. 理論計算 2. 金属錯体 3. 発光 4. 光機能性 5. 分子設計

(執筆者： 中尾 嘉秀)