



# 積層共役錯体酸化種を用いた 超低エネルギー電子励起状態の観測

大阪大学大学院理学研究科化学専攻 福田 貴光

**目的** 高積層型共役錯体の酸化種を用いた，極めて低い励起エネルギーを有する電子励起状態の実現とそのメカニズムの解明

**内容** Gaussian09を用いた密度汎関数法による励起エネルギーを含む電子状態計算を行った。

**結果** 異なる酸化状態の錯体に対して，実験で得られた超低エネルギー領域に観測される光励起状態を良く再現できることが示された。これにより，積層共役錯体を示す，興味深い分光特性の発現メカニズムを分子軌道レベルで解明することができた。

利用した計算機 : NEC Express5800/120Rg-1×128ノード  
PCクラスタシステム  
アプリケーション : Gaussian09  
使用メモリ : 8 GB  
並列化 : 4並列

