

# セリウムを含む多核クラスター錯体の電子状態解析

(大阪大学 大学院基礎工学研究科)

川上 友美、玉木 颯太、松崎 光真、森 裕樹、長江 春樹、劔 隼人

## 【目的】

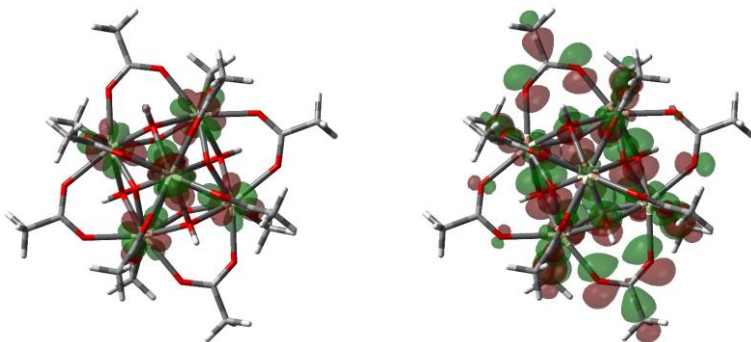
セリウムを含む多核金属錯体の光応答性について、DFT計算による電子状態解析と電子遷移に関わる軌道の解明、ならびに要する遷移エネルギーに対するセリウム以外の金属の影響を明らかにする。

## 【内容】

実験的に単離同定された各種多核金属錯体の構造を元にして再安定構造を計算して分子軌道を図示し、さらに含まれる金属の違いによる分子軌道の違いや光励起に必要なエネルギー差の変化を見積もった。また、実際の遷移に関わる分子軌道を明らかにした。

## 【結果】

DFT計算により光応答性に関わる分子軌道に対する個々の金属の影響を明らかにすることに成功した。また、光応答性を示さない多核金属錯体との相違点を明確にすることで、4価セリウムの空の4軌道の軌道準位が光応答性に最も影響を与えることを明らかにした。



セリウム6核錯体のHOMO/LUMO軌道

利用した計算機	SQUID
ノード時間	16000時間
使用メモリ	200GB