

キューバン型ヨウ化銅錯体の発光機構解析

近畿大学 大学院 総合理工学研究科 中島将吾、鬼頭宏任

目的 ホスフィン化合物が配位したキューバン型CuI錯体の発光機構を明らかにする

内容 量子化学計算ソフトウェアORCAを使用した励起三重項状態(T_1)の構造最適化計算を実行し、発光メカニズムに関与する分子軌道を調べた。

結果 ここでは既報のトリフェニルホスフィンが配位したCuI錯体に対して、複合電子状態計算手法 ω B97X-3cを適用した結果を示す。 T_1 状態の最適化構造では、Cu-Cu間距離が近接した歪んだキューバン型になり、そのSOMOを解析することでコア骨格内の電子遷移(3CC)から発光することが分かった。これは別の計算手法を用いた先行研究の結果と一致した。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
使用した資源:1ノード 76コア並列
ソフトウェア: ORCA 6.1.1 AVX2最適化

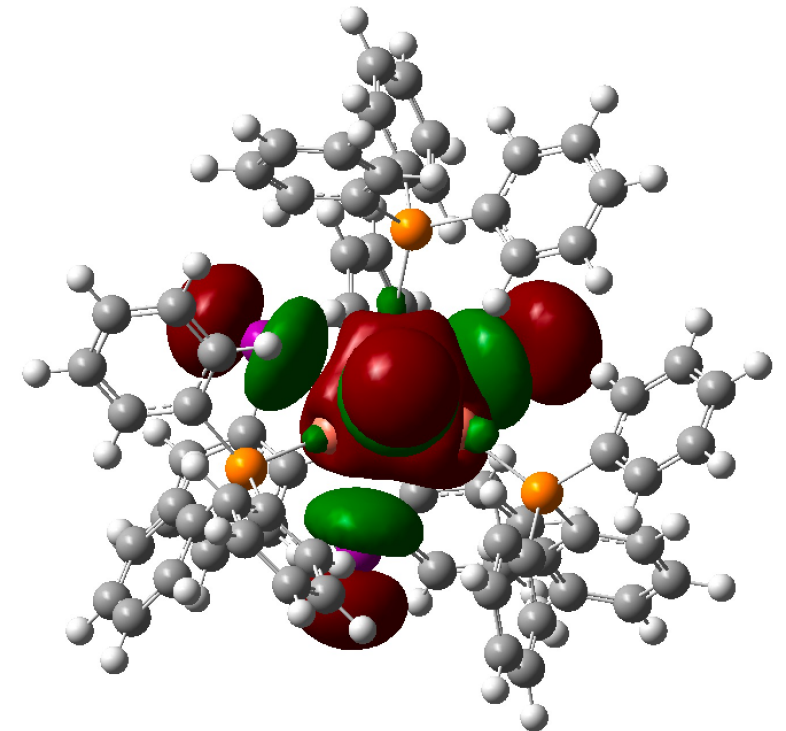


図 ω B97X-3c計算から $[\text{Cu}_4\text{I}_4(\text{PPh}_3)_4]$ の T_1 最適化構造とSOMO-1