

配位結合部位を導入した縮環共役分子の電子構造についての理論研究

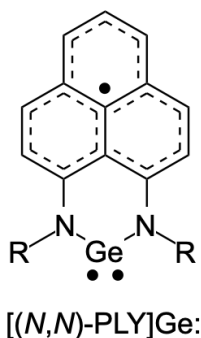
(阪大基礎工¹・阪大院基礎工²・阪大 QIQB³・阪大 RCSEC⁴・阪大 CSRN⁵・阪大院工⁶・阪大 ICS-OTORI⁷) 中筋 千尋¹・岸 亮平^{2,3,4}・吉田 航²・北河 康隆^{2,3,4,5}・中野 雅由^{2,3,4,5,7}・兒玉 拓也^{6,7}・蔦巣 守^{6,7}

Theoretical study on electronic structures of fused-ring conjugated molecules with coordination sites (¹*Faculty of Engineering Science, Osaka University*, ²*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*, ³*QIQB, Osaka University*, ⁴*RCSEC, Osaka University*, ⁵*CSRN, Osaka University*, ⁶*Graduate School of Science, Osaka University*, ⁷*ICS-OTRI, Osaka University*) ○ Chihiro Nakasuji,¹ Ryohei Kishi,^{2,3,4} Wataru Yoshida,² Yasutaka Kitagawa,^{2,3,4,5} Masayoshi Nakano^{2,3,4,5,6}, Takuya Kodama,^{6,7} Mamoru Tobisu^{6,7}

Fused-ring conjugated molecules have attracted attention as building blocks for functional molecular materials since their changed and spin states can be tuned easily and finely owing to their flexible π -electronic structures. In this study, we investigate the electronic structure of germylenes bearing a (*N,N*)-PLY ligand based on quantum chemical calculations. We compare the energy level structures of frontier orbitals and the spatial distribution of the unpaired electron with those of germylenes bearing a NacNac-type ligand.

Keywords : *Fused-Ring Conjugated Molecules; Quantum Chemical Calculation; Coordination Site; Substituent Effect*

縮環共役分子は、その π 電子状態の柔軟性により、電荷やスピンなどの状態制御が容易かつ精密に可能な機能分子材料のビルディングブロックとして注目される。本研究では、フェナレニルに配位結合部位を導入した (*N,N*)-PLY 配位子¹を有するゲルミレン [(*N,N*)-PLY]Ge: の電子構造を、量子化学計算に基づき検討する。縮環構造を持たない NacNac 型配位子²を有するゲルミレン³との比較により、フロンティア軌道の準位構造や不対電子の空間分布について議論する。



- (1) Mukherjee, A.; Sau, S. C.; Mandal, S. K. *Acc. Chem. Res.* **2017**, *50*, 1679–1691.
- (2) Tsai, Y.-C. *Coord. Chem. Rev.* **2012**, *256*, 722–758.
- (3) Yu, J.; Qin, Y.; Tan, G.; Wang, H.; Cheng, H.; Wang, W.; Li, A. *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 5688–5694.