

トリス(2,2'-ビピリジン)ルテニウム(II)錯体のフロンティア軌道エネルギーにおける置換基効果に関する理論研究

(阪大院基礎工¹・阪大 CSRN²・阪大 QIQB³・阪大 RCSEC⁴・阪大 ICS⁵) 佐藤 宏賢¹・
 ○北河 康隆^{1,2,3,4}・甘水君佳¹・長奎吾¹・上村泰吾¹・岸亮平^{1,3,4}・中野雅由^{1,2,3,4,5}
 Theoretical study of substituent effect on frontier orbital energies of tris(2,2'-bipyridine) ruthenium(II) complex (¹Graduate School of Engineering Science, Osaka University, ²Center for Spintronics Research Network (CSRN), Osaka University, ³Center for Quantum Information and Quantum Biology (QIQB), Osaka University, ⁴Research Center for Solar Energy Chemistry (RCSEC), Graduate School of Engineering Science, Osaka University, ⁵Innovative Catalysis Science Division (ICS), OTRI, Osaka University) Hiromasa Sato,¹ ○ Yasutaka Kitagawa,^{1,2,3,4} Naoka Amamizu,¹ Keigo Cho,¹ Taigo Kamimura,¹ Ryohei Kishi,^{1,3,4} Masayoshi Nakano^{1,2,3,4,5}

2,2'-bipyridine (bpy), which is one of the heterocyclic compounds forms stables complexes with metal ions using its lone pairs on nitrogen atoms. The complex with Ru(II) ions, tris(2,2'-bipyridine) ruthenium(II) (**1**) (Fig. 1) is, especially, used as a photosensitizer for the artificial photosynthesis systems. In such systems, it is preferable to design the substituents of ligands, and to optimize the frontier orbital energy for each compound. Our group has reported that the frontier orbital energy can be controlled by substituents of ligands on *fac*-Ir(ppy)₃,¹⁾ however a relationship between substituents, substitution sites and frontier orbital energies has not been clarified. For that reason, in this study, we aim to elucidate the relationship based on the DFT calculations with model complexes introduced various substituents and the multivariate analysis.

Keywords : Tris(2,2'-bipyridine) ruthenium(II) complex, Frontier orbital energy, Density functional theory (DFT), Substituent effect, Materials Informatics

複素環式化合物である 2,2'-ビピリジン (bpy) は、窒素原子上の非共有電子対を用いて金属イオンに配位し、安定な錯体を形成する。特に Ru(II)イオンとの錯体、トリス(2,2'-ビピリジン)ルテニウム錯体 (**1**) (Fig. 1) は、現在、人工光合成の光増感剤などとして利用されている。このような光増感材では、目的物に合わせてフロンティア軌道エネルギーを設計することが望ましい。当研究グループでは、*fac*-Ir(ppy)₃ 錯体において、フロンティア軌道エネルギーが、配位子への置換基の導入により制御できることを報告したが¹⁾、置換基、導入位置と、フロンティア軌道エネルギーの関係について究は未だ明らかになってはいない。そこで本研究では、導入置換基とフロンティア軌道エネルギーの関係を定量的に示すことを目的とし、様々な置換基を導入したモデル錯体の DFT 計算の結果から、重回帰式を求めることにより、フロンティア軌道エネルギーと置換基との関係を明らかにすることを試みた。詳細は当日報告する。

1) Y. Natori et al., *Molecules* **2018**, *23*, 577.

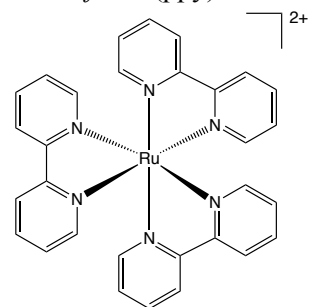


Fig.1 Tris(2,2'-bipyridine) ruthenium(II) complex (**1**)