



コンピュータ解析で金属錯体の発光を検証 — 2次元分光化学系列表を初めて作成 —

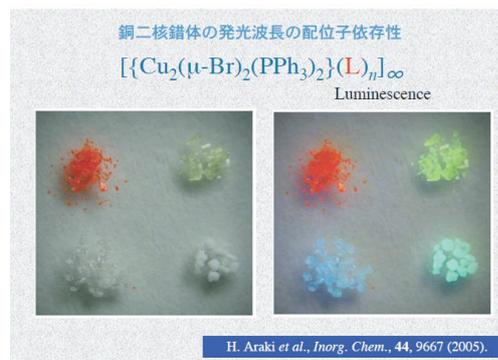
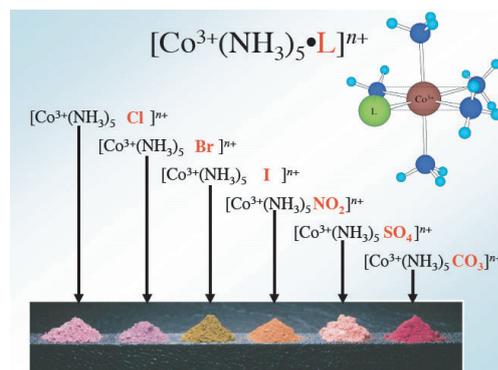
創造工学部 創造工学科 教授 石井 知彦

研究シーズの概要

石井知彦研究室の研究テーマは、新しい機能性材料の設計や開発。なかでも、有機物と無機物とからなる金属錯体という物質の伝導性や磁性、光応答性などを中心的に研究しています。金属錯体は、有機化合物、無機化合物のどちらとも異なる特徴的性質があり、現在、盛んに研究が行われています。

様々な物質に紫外線を当てると、原子を構成している電子軌道の一つである d 軌道（異なる5つの軌道で構成）が分裂し、その際その分裂幅のエネルギーに対応した波長の光が発生しますが、その光を検出することで物質の構造を推測することができます。この光応答性の研究サンプルとして銅錯体を使っています。金属の中でも銅は他の金属に比べ化学修飾性が高く、光応答性の研究サンプルとして有用なため、この銅に有機物を加えた銅二核錯体を中心に発光波長の配位子依存性についての研究を行っています。通常、銅に有機物を加えただけなら見た目では何色に発色するのかわかりません。しかし、紫外線を照射すると、紫外光のエネルギーが吸収され、加えられた有機物の種類や量に応じた発色が起こります。石井研究室では、他大学の研究者らと協力し、銅と有機物の配位子の d 軌道の波動関数を計算することで、それらの合成前に発色する色を予測することが出来ることを突き止めました。そして、それら研究を基に分光学の理論をベースに金属錯体の2次元分光化学系列を世界に先駆けて作成しました（2009年イギリス化学会誌）。

金属錯体の発光の原理を利用すると、その媒体を例えばディスプレイなどの素材として使うことも考えられます。従来の素材が単一波長の光しか発光できないのに対して、錯体を使うと連続性を持った波長光の作成が可能になり、また、明るさもあり、寿命も長いなどのメリットも分かっています。



【利用が見込まれる分野】 化学工業、非鉄金属製造分野、電子部品・デバイス製造分野、医療分野

研究者プロフィール

石井 知彦 / イ シ イ ト モ ヒ コ



メールアドレス ishii.tomohiko@kagawa-u.ac.jp
 所属学部等 創造工学部 創造工学科 材料物質科学コース
 職位 教授
 学位 博士(理学)
 研究キーワード 錯体化学の量子材料化学、コンピュータ材料設計

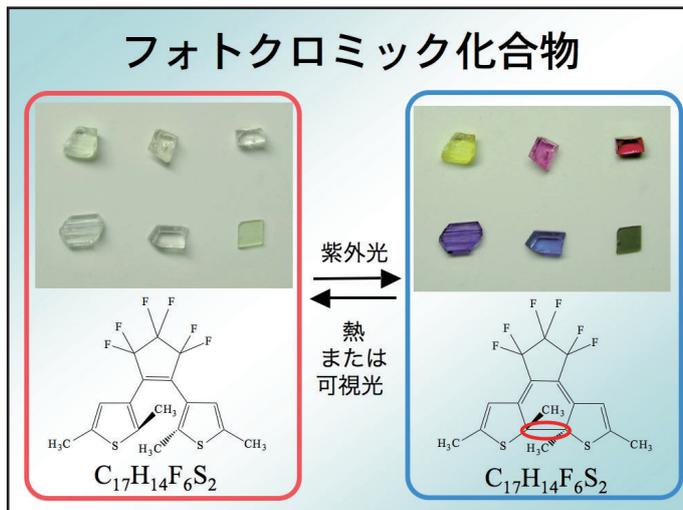
問い合わせ番号：EN-09-004

本研究に関するお問い合わせは、香川大学産学連携・知的財産センターまで
 直通電話番号：087-832-1672 メールアドレス：ccip-c@kagawa-u.ac.jp

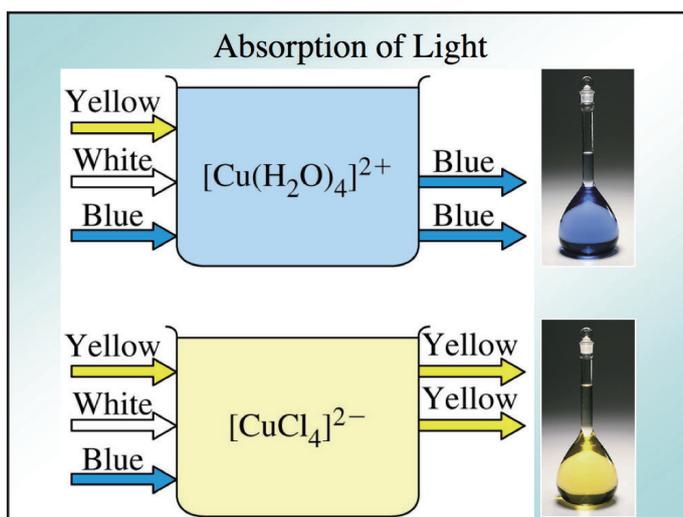
DV-Xα法による新材料設計

DV-Xα法は、分子軌道計算法のひとつであり、物質の全電子を含めた計算を行い、内殻電子と価電子とを同時にシミュレーションできます。また、紫外線の照射などによる各種励起状態の計算が基底状態と同じように行えるなどの特徴があります。石井研究室では、このDV-Xα分子軌道法を用いて、金属錯体の他、DNAと化学物質の相互作用の研究、光応答性や熱電性能の高い材料の開発など機能性材料に関するいろいろな研究を行っています。人間の血液中を流れるヘモグロビンも一種の金属錯体で、磁場の影響を受けることが分かっています。金属錯体の研究は、工学分野だけではなく、医療分野など様々な領域で役立っています。

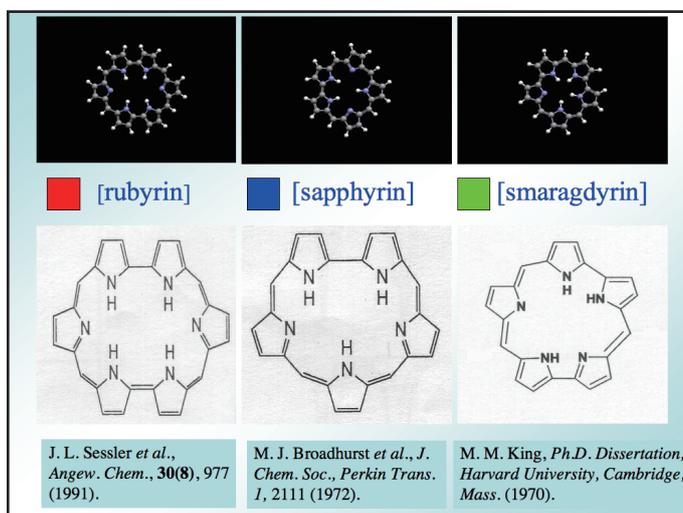
石井研究室では、試験材料となる金属（単結晶）の内部構造を解析するための単結晶X線解析装置を保有しています。このX線解析装置と電子論や量子力学の知識を駆使したコンピュータ解析により金属錯体の特性を調べています。



フォトクロミック化合物—紫外光にあると発色し、紫外光がなくなるともとの色に戻る特徴を有した可逆的化合物



錯体の光の吸収作用



宝石の名前にちなんだポルフィリン系化合物
— それぞれルビー、サファイア、エメラルドのような発色をする —