マテリアル先端リサーチインフラ利用報告書
ARIM User's Report

【Release：2025.07.24】　【Update：2025.07.24】

課題データ / Project Data

課題番号 Project Issue Number	22MS0016
利用課題名 Title	コラニュレン骨格を有する錯体の合成と性質に関する量子化学計算
利用した実施機関 Support Institute	自然科学研究機構 分子科学研究所 / IMS
機関外・機関内の利用 External or Internal Use	外部利用/External Use
ARIM半導体基盤PF 関連課題 Related to ARIM-SETI	指定なし / No Designation
横断技術領域 Cross-Technology Area	物質・材料合成プロセス/Molecule & Material Synthesis
重要技術領域 Important Technology Area	マテリアルの高度循環のための技術/Advanced materials recycling technologies
キーワード Keywords	量子化学計算

利用者と利用形態 / User and Support Type

利用者名（課題申請者） User Name (Project Applicant)	山田 美穂子
所属名 Affiliation	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科物質創成科学領域
共同利用者氏名 Names of Collaborators Excluding Supporters in the Hub and Spoke Institutes	松本 大河
ARIM実施機関支援担当者 Names of Supporters in the Hub and Spoke Institutes	江原 正博
利用形態 Support Type	共同研究/Joint Research

利用した主な設備 / Equipment Used in This Project

利用した主な設備 Equipment ID & Name	MS-302：大規模量子化学計算

報告書データ / Report

概要（目的・用途・実施内容） Abstract (Aim, Use Applications and Contents)	金属錯体の光機能制御には、高効率な光吸収と錯体形成および機能発現に適した配位子の設計が求められる。本課題では、平面芳香族化合物と異なる性質を示す湾曲状芳香族コラニュレン骨格に配位部位を導入し、その構造と性質を量子化学計算を用いて検討することで、機能性金属錯体の設計・合成と機能制御を目指した。
実験 Experimental	コラニュレン骨格を有する配位子、錯体および対照化合物のGaussian　16を用いたDFT計算により分子構造最適化および振動計算を行い、TD-DFT計算によりエネルギー計算や吸収スペクトルのシミュレーションを行った。
結果と考察 Results and Discussion	湾曲状コラニュレン骨格に配位部位を導入した配位子を設計し、コンフォメーション異性体の構造最適化および振動計算を行った。この結果を、測定結果と合わせて検討し、配位子および錯体の構造に関する情報を得た。今後、さらなる研究により、得られた錯体の機能制御を目指す。学会発表および論文発表の準備も進める。
図・表・数式 Figures, Tables and Equations	
その他・特記事項（参考文献・謝辞等） Remarks(References and Acknowledgements)	本課題の遂行にあたり、ご対応・ご支援いただいた分子科学研究所計算化学研究センター江原正博教授に深く感謝いたします。また、共同研究者の奈良先端科学技術大学院大学の河合壯教授に感謝いたします。

成果発表・成果利用 / Publication and Patents

DOI（論文・プロシーディング） DOI (Publication and Proceedings)	
口頭発表、ポスター発表および、その他の論文 Oral Presentations etc.	
特許出願件数 Number of Patent Applications	0件
特許登録件数 Number of Registered Patents	0件