

フェナレニル型配位子を有するガリレンの紫外可視吸収スペクトルの量子化学計算

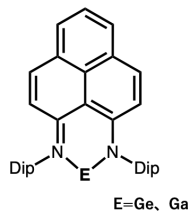
(阪大基礎工¹・阪大院基礎工²・阪大 QIQB³・阪大 ICS-OTRI⁴・阪大 RCSEC⁵・阪大 CSRN⁶・阪大院工⁷) ○川崎 愛矢¹・中筋 千尋²・岸 亮平^{2,3,4,5}・北河康隆^{2,3,4,5,6}・向井 虹渡⁷・兒玉 拓也^{4,7}・鳶巣 守^{4,7}

Quantum Chemical Calculations for the UV/vis Absorption Spectrum of Gallylene Bearing a Phenalenyl-based Ligand (¹*Faculty of Engineering Science, Osaka University*, ²*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*, ³*QIQB, Osaka University*, ⁴*ICS-OTRI, Osaka University*, ⁵*RCSEC, Osaka University*, ⁶*CSRN, Osaka University*, ⁷*Graduate School of Engineering, Osaka University*) ○Manaya Kawasaki,¹ Chihiro Nakasuji,² Ryohei Kishi,^{2,3,4,5} Yasutaka Kitagawa^{2,3,4,5,6} Nijito Mukai,⁷ Takuya Kodama,^{4,7} Mamoru Tobisu^{4,7}

Recently, germylene and gallylene complexes with a phenalenyl (PLY)-based ligand have been synthesized. Theoretical spectral assignments of these complexes are important for the analysis of their electronic structures, which are the origin of their interesting reactions and physico-chemical properties. In this study, we investigated UV/vis absorption spectrum of the gallylene by quantum chemical calculations.

Keywords : Phenalenyl; Gallylene; Quantum Chemical Calculations

配位結合部位を導入した PLY は、典型元素や遷移元素と錯体を形成し、触媒反応における優れた電子バッファ部位として作用するため、これらのカルベン様錯体は興味深い反応性や物性を示す。最近、フェナレニル (PLY) 型配位子を有するガリレン錯体が合成された¹⁾。トルエン溶媒中での紫外可視吸収スペクトルの測定から、 $\lambda_{\max} = 505 \text{ nm}$ に極大を持つ吸収帯が観測された。現在、この錯体に関与する反応について検討が行われており、その反応機構の解明において量子化学計算に基づくスペクトルの帰属は重要となる。本研究では、ガリレン錯体ならびに、同じ配位子を有する開殻のゲルミレン錯体²⁾に対する励起状態計算を実行し、両錯体の紫外可視吸収スペクトルの実験結果との比較から、計算手法の依存性を検討し議論した。



- 1) Kodama, T. et al., *Inorg. Chem.* **2023**, 62, 6554-6559.
- 2) Kodama, T. et al., *Inorg. Chem.* **2023**, 62, 7861-7867.