

分光化学系列の新展開：配位子場分裂制御への二次元的アプローチ

(香川大創造工¹・岡山理大教育推進機構²・関西学院大理³)

○石井 知彦¹・坂根 弦太²・小笠原 一禎³

New Spectrochemical Series: A Two-Dimensional Approach to Controlling Ligand Field Splitting (¹*Faculty of Engineering and Design, Kagawa University*, ²*Institute for the Advancement of Higher Education, Okayama University of Science*, ³*Faculty of Science, Kwansei Gakuin University*) ○Tomohiko Ishii,¹ Genta Sakane,² Kazuyoshi Ogasawara³

This work presents a comprehensive analysis of ligand field splitting and spin states in six-coordinated octahedral metal complexes ML_6 . A novel two-dimensional spectrochemical series was developed, integrating 17 metal ions and 29 ligands to systematically evaluate ligand field splitting trends using the DV- $X\alpha$ and relativistic DVME molecular orbital methods (Fig. 1). The work also explores spin polarization calculations to predict spin state transitions, offering valuable insights into magnetic material design. The findings demonstrate that ligand field splitting and spin states can be precisely controlled through the interplay of metal ions and ligands. This work enhances our understanding of electronic structures and magnetic properties in coordination compounds, paving the way for innovative applications in material science and coordination chemistry.

Keywords : *Ligand Field Splitting; Two-Dimensional Spectrochemical Series; Electronic States; Spin States; Magnetic Materials*

本研究では、八面体六配位金属錯体における配位子場分裂の制御とスピン状態の予測に関する包括的な解析を行った¹⁾。従来の分光化学系列を拡張し、金属イオンおよび配位子の組み合わせを二次元マトリックスで表した新しい分光化学系列を構築した (Fig. 1)。DV- $X\alpha$ 分子軌道法と相対論版 DVME 法を用いて配位子場分裂エネルギーを定量化し、その結果をもとに 29 種類の配位子と 17 種類の金属イオンの組み合わせにおけるエネルギー分裂の傾向を明らかにした。また、スピン分極計算を通じて、スピン状態の遷移条件を定量的に評価し、磁性材料設計への応用の可能性を検討した。本研究の成果は、金属錯体の電子構造と物性に関する理解を深めるとともに、新規材料設計の指針となることが期待される。

1) "Exploring Spin States and Ligand Field Splitting in Metal Complexes: a Theoretical Analysis of Spin-Orbital Interactions and Magnetic Properties", T. Ishii, K. Ogasawara, and G. Sakane, *Dalton Transactions*, **2024**, 53, 7175-7189.

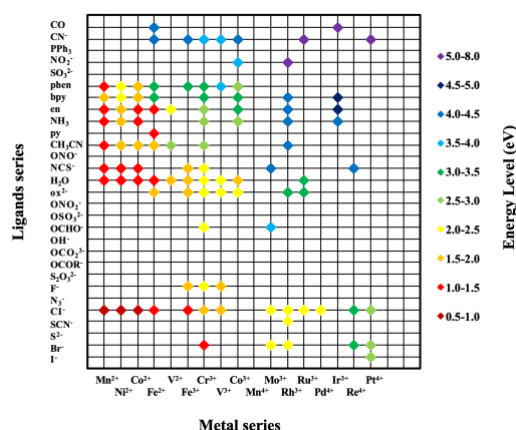


Fig. 1 2D Spectrochemical series.