

研究タイトル：

シミュレーションによる励起状態ダイナミクスの研究

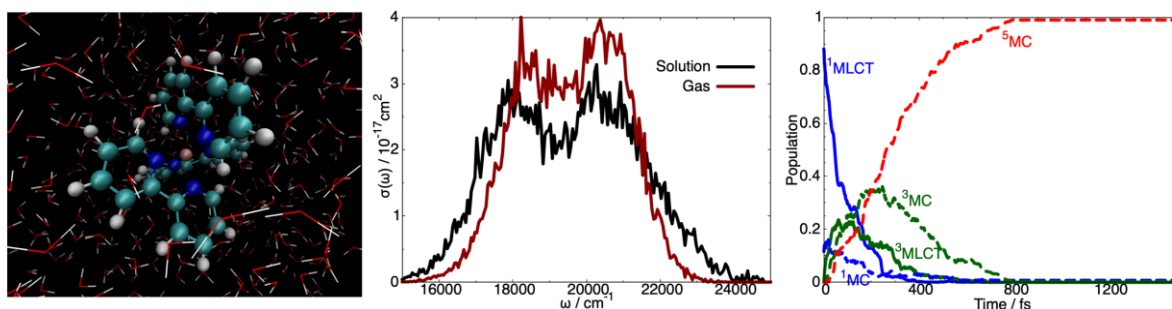
氏名：	井内 哲 / IUCHI Satoru	E-mail：	s.iuchi@numazu-ct.ac.jp
職名：	准教授	学位：	博士(理学)
所属学会・協会：	分子科学会、日本化学会、理論化学会		
キーワード：	量子化学、分子動力学シミュレーション、励起状態		
技術相談 提供可能技術：	・計算化学(量子化学・分子動力学計算)による化学現象解析		



研究内容： 遷移金属錯体の励起状態ダイナミクスのシミュレーション解析

量子化学計算や分子動力学法を用いたコンピュータシミュレーションによって、溶液や界面での物質の構造や電子状態とそれらのダイナミクスを分子レベルで理解することを目指しています。現在は、特に金属錯体ならびに有機色素の励起状態に興味を持って研究を行っています。

金属錯体に関する研究では、特に遷移金属錯体の励起状態ダイナミクスに関するシミュレーション研究を進めています。物質が光を吸収して励起状態になると、エネルギー的に安定な状態へと緩和していきます。特に、状態密度が高く、複数のスピン多重度がある遷移金属錯体の励起状態では、スピン状態の変化と構造変化を含む超高速の緩和が起こります。この複雑なダイナミクスをシミュレーションするため、遷移金属錯体の励起状態を高速計算できるモデルハミルトニアンを開発を行っています。それを用いた分子動力学シミュレーションを通じて、遷移金属錯体における光励起後の緩和ダイナミクスのメカニズム解明を目指しています。



分子動力学シミュレーションにより計算された $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ 水溶液(左図)の吸収スペクトル(中央図)と光励起後のpopulation変化(右図)。S. Iuchi and N. Koga, *J. Phys. Chem. Lett.* 14, 4225 (2023).

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	