

倉重佑輝（くらしげゆうき）

【研究課題名】遷移金属錯体の複雑失活過程とスピン対称性変化の理論解析



神戸大学大学院 システム情報学研究科 准教授

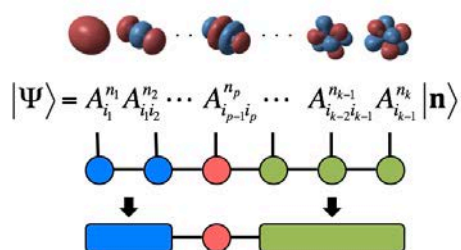
【E-mail】 kurashige@kitty.kobe-u.ac.jp

【専門】 理論化学, 量子化学, 電子相関理論

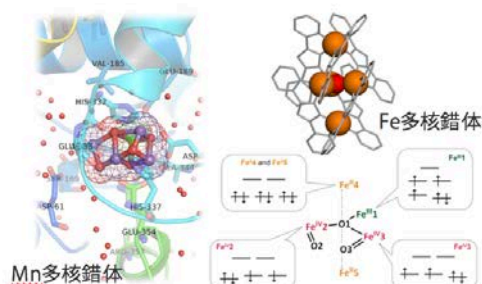
【キーワード】 電子状態理論, 金属錯体, 触媒反応,
 π 共役分子, 励起状態計算

光反応では分子の電子構造に内在する大きな自由度すなわち柔軟性が露となります。高度に複雑な電子状態を扱う多参照理論と密度行列繰り込み群法を融合させた独自の方法を用いて、金属錯体のスピン対称性の変化を含む複雑な光反応過程の解析を行います。

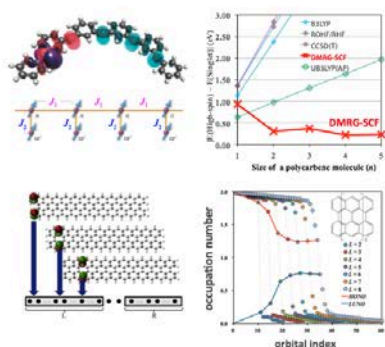
〈研究グループアクティビティー〉

新規電子状態理論の開発と
高性能計算アルゴリズム実装

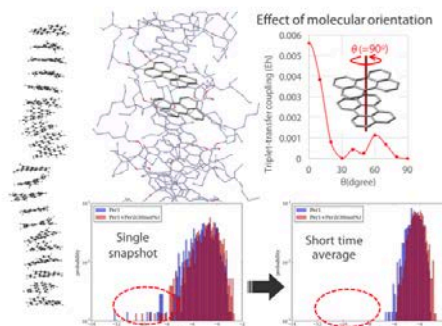
遷移金属錯体など凝縮重電子系に向けた
ab initio 密度行列繰り込み群法の開発

金属酵素活性中心や多核金属錯体
を介した触媒反応の理論解析

光合成系IIマンガンクラスター(Mn四核錯体)
と人工系(Fe五核錯体)の多電子構造解析

 π 共役分子系の分子物性予測

ポリカルベンやグラフェンナノリボン等
マルチラジカル状態とスピン相関解析

 π 共役分子集合体の量子輸送や
励起ダイナミクスの解析

分子集合体中の三重項移動の予測
分子配向と移動効率の相関の解析

Yuki KURASHIGE

【Research Subject】 Theoretical analysis of photochemical reactions of transition metal complexes — the complex processes involving spin symmetry changes —



Associate Professor
Graduate School of System Informatics
Kobe University

【E-mail】 kurashige@kitty.kobe-u.ac.jp

【Speciality】 Theoretical chemistry, Quantum chemistry

【Keywords】 Metal complex, π -conjugated systems, Excited states

Using the density-matrix renormalization group algorithm based multireference electronic-structure methods, we will investigate the excited-state dynamics in π -conjugated organic crystals and complexes with metal clusters, in which high-dimensionality in the quantum states is embodied.

Research Group Activity

