

倉重佑輝（くらしげゆうき）

【研究課題名】有機金属複合体など凝縮重電子系複合体の光反応の理論的研究



自然科学研究機構 分子科学研究所 助教

【E-mail】kura@ims.ac.jp

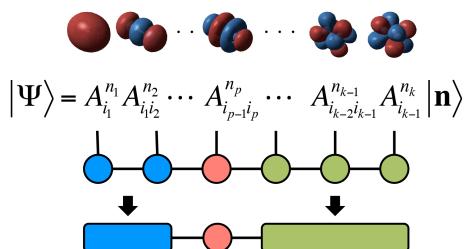
【専門】電子相関、量子化学

【キーワード】電子状態理論、多核金属錯体、金属酵素、励起状態計算、π共役分子

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、有機結晶や金属複合体など複合体の励起ダイナミクスの解析を行います。

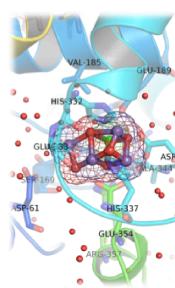
〈研究グループアクティビティー〉

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



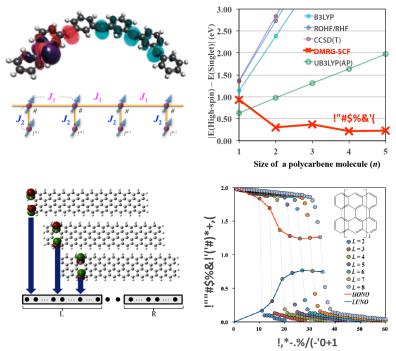
遷移金属錯体など凝縮重電子系のための
ab initio 密度行列繰り込み群法の開発

多核金属錯体・酵素の反応解析

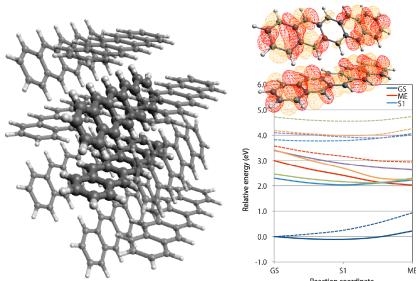


多参照電子状態理論による光合成系II
マンガンクラスターの電子構造解析

π共役分子系の物性予測



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ニン相關解析

有機結晶の光物性と
励起ダイナミクスの解析

ポリアセン結晶の singlet-fission による
多重励起子生成のメカニズム

Yuki KURASHIGE

【Research Subject】 Entangled quantum states in photochemistry of π -conjugated molecules and complexes with transition metal clusters



Assistant Professor

Institute for Molecular Science

E-mail kura@ims.ac.jp

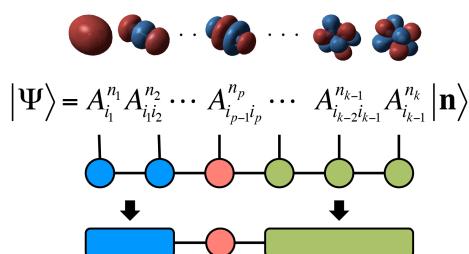
Speciality Electron correlation, Quantum chemistry

Keywords Electronic-structure theory, Polynuclear metal complex, Metalloenzyme, Excited electronic-states, π -conjugated systems

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

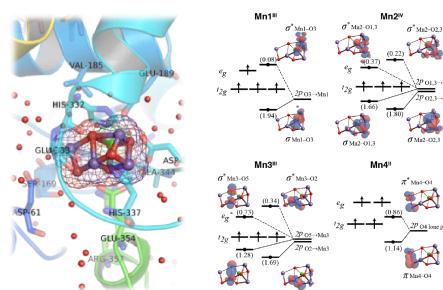
Research Group Activity

Development of new methods in molecular electronic-structure theory



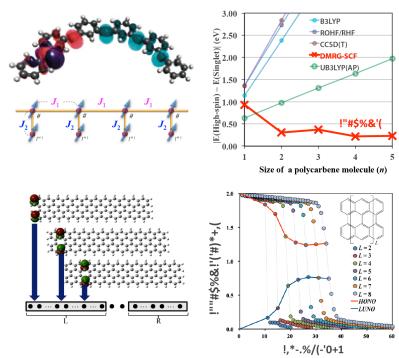
Development of *ab initio* density-matrix renormalization group (DMRG) methods for entangled quantum states

Catalytic reactions of metalloenzymes and polynuclear metal complexes



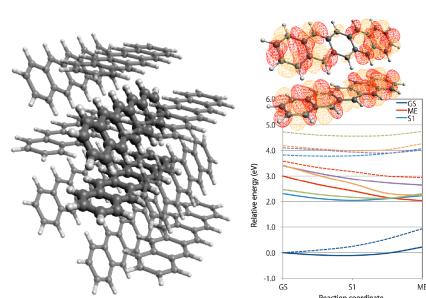
Entangled quantum electronic wavefunctions of the Mn_4CaO_5 cluster in photosystem II

Electronic properties of π -conjugated molecules



Novel quantum states of electron spins in polycarbones and graphene nanoribbons

Excited-state dynamics in crystals of organic compounds



Singlet-fission in pentacene crystals for designing efficient organic solar cells