

# 第7回錯体物性化学講演会

## 榑 茂好 教授

京都大学福井謙一記念研究  
センター リサーチリーダー  
京都大学名誉教授



電子状態理論や統計力学に基づき、遷移金属元素や有機官能基、ヘテロ元素、典型金属を有する複合電子系の構造、結合性、電子状態、反応過程、触媒作用を明らかにする理論化学の研究の第一人者である榑 茂好先生（京都大学福井謙一記念研究センター リサーチリーダー）をお招きして、講演会を開催いたします。皆さまのご来聴をお待ち申し上げます。

**日時：2013年5月14日（火）16:30～18:00**

**場所：理学部2号館3階 化学第1講義室(2349室)**

**講演タイトル：遷移金属錯体の構造と反応の理論的研究：  
MOF、分子性結晶、溶媒効果などを中心にして**

**要旨：**遷移金属錯体の理論化学・計算化学研究は、DFT法が提案され、手軽に使用可能になるに従い、非常に活発に行われるようになってきている。しかし、MOFや金属錯体の分子性結晶のような大きな系、溶媒和が強い系などの構造、電子状態、分子物性、反応過程に関する理論的計算は依然として容易では無い。我々のグループでは、これらの研究対象について理論的研究を行って来た。例えば、Hoffmann型MOFへのCO<sub>2</sub>はCS<sub>2</sub>の吸着、それに伴うスピン状態の変化、周期的分子性結晶の構造、溶媒和が重要なシスプラチンの加水分解反応などについて、最近の結果を紹介する。

連絡先：理学研究院化学部門 大場正昭  
E-mail: ohba@chem.kyushu-univ.jp, Tel: 092-642-2570