

はじめに

金属錯体は、金属イオンに配位子として無機イオン、分子や有機化合物と結合した錯体ばかりでなく、金属酸化物などからなる宝石、貴石や顔料が含まれていて、これらの多くに見られる美しい色は遷移金属イオンによるものである。これらの色は中心金属の違いのみならず、その回りに結合している配位子や配位立体構造によっても変幻自在に変わり、私達の目を楽しませてくれる。しかし、色は色覚による主観的で定性的なものである。色の原因を科学的に理解し、解明するには、色を定量化して比較できる電子スペクトルが最も重要な実験手段である。金属化合物を含む錯体の色の原因は 20 世紀中頃までの錯体の系統的な電子スペクトルの研究と同時に 20 世紀半ば以降に量子力学を応用して確立された基礎理論によって解明されてきた。本書は、まず遷移金属錯体の色の主な原因である d-d 電子遷移の電子スペクトルの基礎理論である結晶場理論・配位子場理論と角重なりモデルを解説し、基底状態—励起状態間の d-d 電子遷移における吸収や発光スペクトルが遷移金属イオン、配位子や配位構造にどのように影響されるかを最近の特殊な研究例を含めて明らかにする。また、金属と配位子間の電荷移動遷移やランタニド化合物の 4f-4f 電子遷移の電子スペクトルについて言及する。さらに、結晶二色性や円二色性から磁気キラル二色性や外場による色の変化（クロモトロピズム）と身近な顔料や宝石の色の原因となっている集積化の色すなわち電子スペクトルへの影響について概説する。特に、先人が見出した金属錯体の発色現象を端緒として、これらの電子遷移に伴う分光学的性質に基づく新しい多様な機能物性が見いだされている。このような温故知新で、金属錯体の名称に色名を含むものを手がかりにして、それらの色に関わる機能物性が幅広く応用されつつあることを最新の研究成果を通して紹介する。