

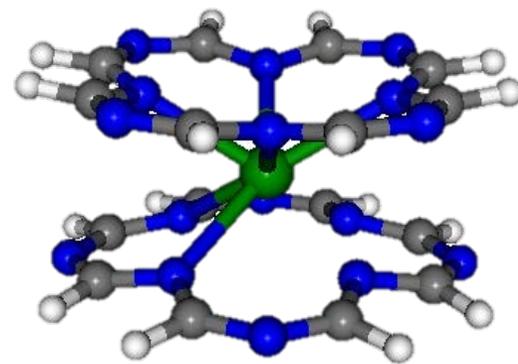
# 希土類フタロシアニン類縁体二層型錯体の電子構造の理論研究

大阪大学理学研究科化学専攻 齊藤 正剛

目的：希土類フタロシアニン類縁体二層型錯体の4f 電子構造を量子化学計算によって解析する

内容：中心金属がLu, モデル配位子を用いた二層型錯体の構造最適化、中心金属がGd, Tbのエネルギー計算をGaussian 09上で行った。

結果：構造最適化とシングルポイント計算の結果、シンプルなモデル配位子はフタロシアニン類縁体のモデルとしては適切でないと判明した。錯体の性質の理解のためにはより複雑な配位子を考慮するべきと考えられる。



希土類モデル錯体の図

利用した計算機	Pcクラスタ
アプリケーション	Gaussian 09
CPU時間	5時間22分
使用メモリ	4GB