

新規有機ラジカル化合物における 多重度および構造異性体のシミュレーション

大阪府立大学大学院 工学研究科

重森 実, 水野一彦, 池田 浩

- 目的 : 新規有機ビラジカル化合物の構造異性体におけるS-Tギャップの算出
- 内容 : 当研究室が合成したビラジカル (1) は, 分子内に*p*-キノジメタン骨格を有していることから一重項ビラジカルとして期待できる.
本研究では, 基質1がどのような多重度をとるか, また, 構造異性体によって多重度がどのように変化するかをシミュレートした.
- 結果 : 予想に反して, 全ての構造異性体についてビラジカルではなく, 閉殻構造をとることが明らかとなった.

