

開殻 π 電子系分子集合体の物性評価

大阪大学大学院基礎工学研究科 鈴木修一

- 目的 開殻 π 電子系分子集合体における電子（スピン）構造を計算し、物性評価を行う。
- 内容 Gaussian16 を利用して、各種開殻 π 電子系分子とその集合体について、軌道計算、電荷分布、スピン密度分布等の計算を行った。
- 結果 代表的な結果を以下に例として記述する。ジヒドロフェナジンラジカルカチオンの固体状態における近赤外吸収が特殊なダイマー構造（ π ダイマー）構造に由来すること、また π ダイマーにおけるスピン間には反強磁性的相互作用が働いていることを解明した。

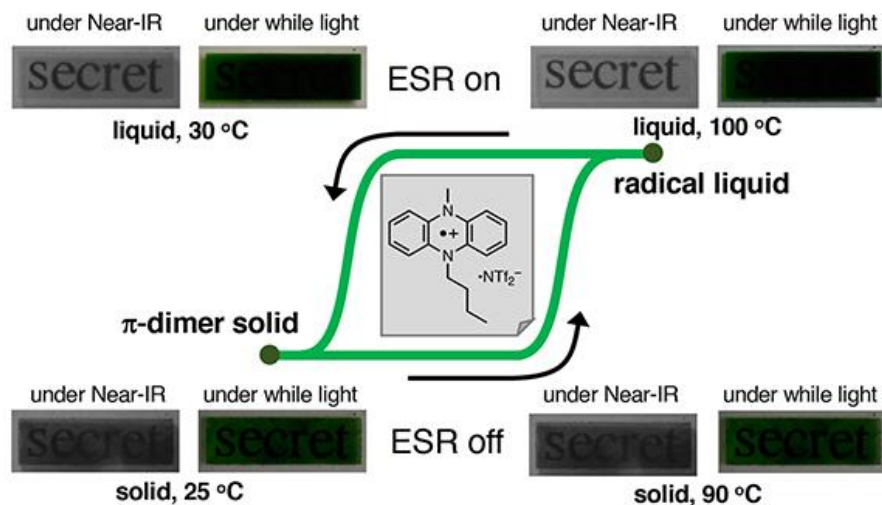


図1. 計算に利用した開殻 π 電子系の相転移挙動

利用した計算機 OCTOPUS