

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。代表的な開殻 π 電子系ユニットであるニトロニルニトロキシドの6個がガドリニウムイオンに配位した複核錯体を合成し、その磁氣的性質を実験および計算結果から明らかにした (*Inorg. Chem.* **2022**, 61, 3018)。

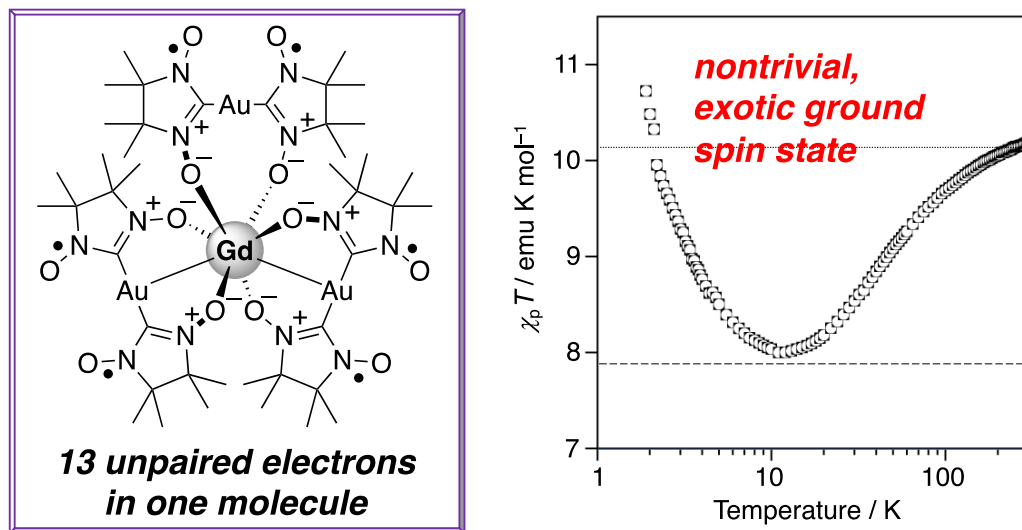


図1. 計算に利用した新規開殻 π 電子系複核錯体と磁氣的挙動

利用した計算機 OCTOPUS