

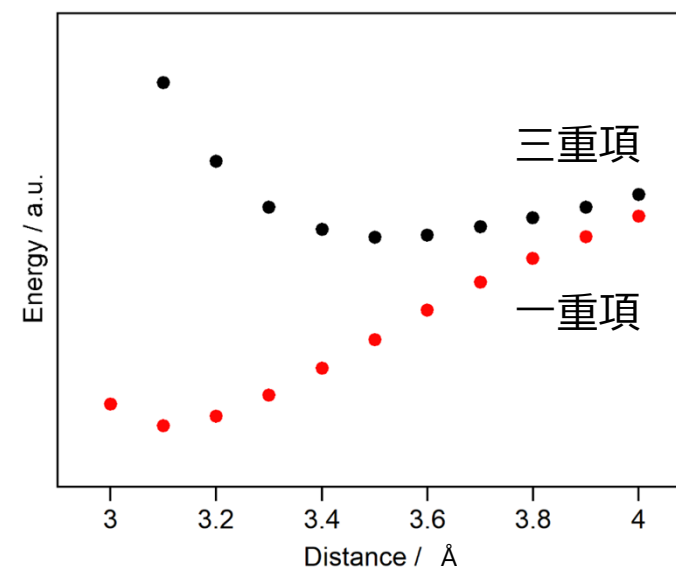
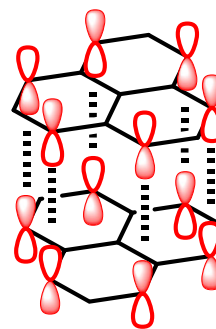
有機ジラジカルの創出と機能開拓

大阪大学大学院 基礎工学研究科 氏名 清水 章弘

目的 DFT 計算を駆使することにより、分子間の磁氣的相互作用の発現が期待される新規有機ジラジカルを設計する。

内容 Gaussian 16 を利用して、有機ジラジカルの構造最適化や一点計算を行い、スピン密度の解析や励起エネルギーの計算を行った。

結果 フェナレニルラジカルの π ダイマーについて、面間距離を変化させてエネルギー計算を行い、基底一重項状態と熱励起三重項状態のエネルギー差から、分子間の磁氣的相互作用の大きさを見積もった。



利用した計算機 OCTPUS