

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、TD-DFT 等の計算を行い、実験結果を比較、補足した。

結果 特異な開殻 π 電子系分子集合体における光吸収特性の帰属を行うことで (図 1)、それが示す新奇現象のメカニズム解明に成功した。

(*Angew. Chem., Int. Ed.* 2023)

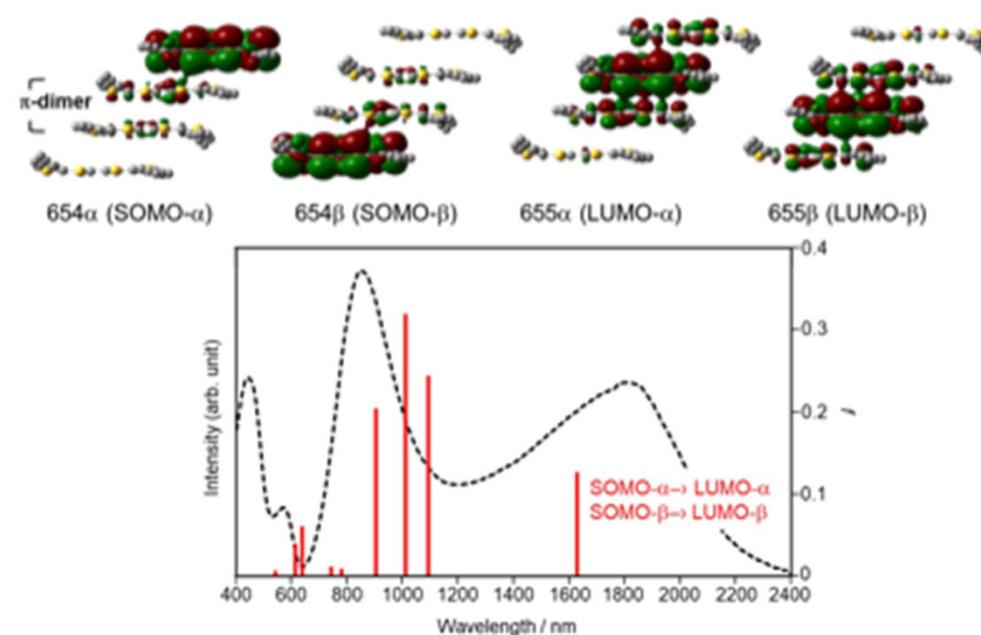


図 1. テトラチアフルバレンラジカルカチオン塩の TDDFT 計算の結果

利用した計算機 OCTOPUS