

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, 池田 浩, 水野一彦

- 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
(一重項—三重項のエネルギーギャップ)の算出.
- 内容: 現在合成中の新規有機ビラジカルは, 閉殻構造をとり得ることから,
三重項だけでなく, 一重項ビラジカルになる可能性がある.
本研究では, 実際にその分子がどのような多重度をとり得るのか, また,
構造異性体によって多重度は変化するのか計算を行う.
- 結果: まだシミュレーションを始めていない. 今後, 順次構造異性体について,
計算を行っていく予定である.

