



多層構造を有するフタロシアニン錯体の π 電子構造に関する研究

大阪大学大学院理学研究科化学専攻

福田 貴光

目的 巨大芳香環化合物であるフタロシアニン配位子 (Pc) を垂直方向に4分子積層した錯体 (右下図) の π 電子に由来する分光特性を理解する。

内容 Gaussian09を用いた密度汎関数法による分子構造の最適化, および電子状態計算を行った。

結果 異なる酸化状態の分子に対して電子状態を計算した結果, いずれの場合においても, 実験で得られた分光特性を良く再現できることが示された。これにより, 4層型Pc錯体が示す, 低エネルギー領域における特異的な分光特性のメカニズムを理解することができた。

利用した計算機	: NEC Express5800/120Rg-1×128ノード PCクラスタシステム
アプリケーション	: Gaussian09
使用メモリ	: 8 GB
並列化	: 4並列

