

課題名 (タイトル) :

**Bi-layer 系分子性導体の磁性の解明**

利用者氏名 : 草本 哲郎

所属 : 和光研究所 基幹研究所 加藤分子物性研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年我々はプロモチアゾールカチオンを含む  $\text{Ni(dmit)}_2$  アニオンラジカル塩において、単位格子中に強磁性的および反強磁性的な磁気挙動を示すアニオンラジカル層が共存することを明らかにした。本課題は Gaussian ソフトウェアを用いて、結晶中において隣接するアニオンダイマー間に働くスピン相互作用を計算し、この系の磁性の起源を明らかにすることを目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian を用いて  $\text{Ni(dmit)}_2$  アニオンラジカル単分子の電子状態を計算した。その後、アニオンラジカルの 2 量体間に働く磁気相互作用を計算した。

3. 結果

$\text{Ni(dmit)}_2$  アニオンラジカルの 2 量体間に働く磁気相互作用について、Broken symmetry 法を用いて計算した。その結果、結晶中でみられる様々な二量体間相互作用について、反強磁性に比べ強磁性的に相互作用する状態がより安定であるという結果を得た。