

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

理研での所属研究室名 : 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電子状態については過去の報告例や実験結果に見合う計算結果が得られた。すなわち、ラジカル電子の存在する分子軌道=LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital)は分子骨格全体に広がった $\pi$ 軌道であった。この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が、全て強磁性であるという結果を得た。これは我々が磁気測定実験で得た結果とは一致しない。さまざまに条件を変えて電子状態計算を行った結果、本計算で使用した汎関数 B3LYP が二量体間相互作用の計算には適切でない可能性が示唆された。

4. 今後の計画・展望

様々な汎関数や計算手法を用いて 2 量体の電子状態計算を行い、本計算に適した計算手法、条件を明らかにする。そしてアニオンラジカル二量体間に働く相互作用を計算する。

5. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用

した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容 3,4 に記載。