

課題名 (タイトル) :

機能性ラジカル分子の電子状態の解明

利用者氏名 : 草本 哲郎

所属 : 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

ラジカル分子は、不対電子に基づく伝導性、磁性、非線形光学特性、および化学反応性を示し、多機能性分子として注目されている。私は新奇な物理物性を示すラジカル分子を創製し、その物性発現のメカニズムを解明する研究を行っている。ラジカル分子が示す様々な物理物性は、分子の電子状態に起因している。すなわちラジカル分子の物性を理解するためには、分子の電子状態を正確に理解することが重要である。本課題は、伝導性や磁性、光機能性を示すラジカル分子の電子状態や、ラジカル分子間、もしくはラジカル—常磁性イオン間に働く磁気相互作用を分子軌道計算により調べることで、機能性ラジカル分子の構造—物性—電子状態を統一的に理解することを目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian09 を用いて、我々が最近合成したトリチルラジカル誘導体 PyBTM が配位した中性の金錯体の電子状態ならびに励起エネルギーを DFT および TD-DFT 法を用いて計算した。

3. 結果

DFT 法による分子軌道計算の結果、金錯体のスピン密度は主に PyBTM の中心炭素原子上にあるものの、その炭素原子に結合している 3 つの芳香環上にも分布していることが示唆された。また SOMO 準位付近の占有軌道は対配位子である C_6F_5 部位に主に分布している一方、非占有軌道は PyBTM 骨格上に分布しているという結果が得られた。TD-DFT 法を用いた計算の結果、この錯体は C_6F_5 部位から PyBTM 部位への分子内電荷移動遷移を示すことが予想され、我々が以前報告したカチオン性の PyBTM—金錯体とは異なった電子状態および物性を有する可能性が示唆された。

4. まとめ

PyBTM が配位した金錯体の分子軌道計算を行い、この錯体がカチオン性の PyBTM—金錯体とは異なる電子状態および物性を示す可能性が示唆された。