

## 密度汎関数理論法を用いたダブルデッカー型テルビウム(III) フタロシアニン錯体の構造と磁気異方性に関する理論研究

(阪大基礎工<sup>1</sup>・阪大院基礎工<sup>2</sup>・阪大 QIQB<sup>3</sup>・阪大 RCSEC<sup>4</sup>・阪大 ICS<sup>5</sup>・阪大 SRN<sup>6</sup>)  
 ○益田晃希<sup>1</sup>・津田雅大<sup>2</sup>・甘水君佳<sup>2</sup>・林優太<sup>2</sup>・佐々木啓介<sup>2</sup>・西田光博<sup>1</sup>・本城一樹<sup>1</sup>・岸亮平<sup>2,3,4,5</sup>・北河康隆<sup>2,3,4,5,6</sup>

Theoretical study on structure and magnetic anisotropy of double-decker phthalocyanine terbium (III) complexes using density functional theory method. (<sup>1</sup>Faculty of Engineering Science, Osaka University, <sup>2</sup>Graduate School of Engineering Science, Osaka University, <sup>3</sup>QIQB, Osaka University <sup>4</sup>RCSEC, Osaka University, <sup>5</sup>ICS-OTRI, Osaka University, <sup>6</sup>RSN-OTRI, Osaka University) ○Koki Masuda,<sup>1</sup> Masahiro Tsuda,<sup>2</sup> Naoka Amamizu,<sup>2</sup> Yuta Hayashi,<sup>2</sup> Keisuke Sasaki,<sup>2</sup> Mitsuhiro Nishida,<sup>1</sup> Kazuki Honjo,<sup>1</sup> Ryohei Kishi,<sup>2,3,4,5</sup> Yasutaka Kitagawa<sup>2,3,4,5,6</sup>

In recent years, single-molecule magnets such as lanthanide complexes have been actively studied for application to high-density memories and quantum computers. The origin of single molecule magnets is usually a magnetic anisotropy of the metal ion. The relationship between molecular orbital of the complex and magnetic anisotropy, however, has not been elucidated well. In this study, we focused on a double-decker terbium(III) phthalocyaninato complex.<sup>1)</sup> In this complex, we examined the relationship by calculating its electronic structure and magnetic anisotropy parameter (*D*) using the density functional theory (DFT) calculations. We also examined an effect of substitution groups (X) introduced to the phthalocyaninato ligands on the relationship.

**Keywords:** Single-molecule magnets, Terbium phthalocyaninato complex, Quantum chemical calculation, Density functional theory, Magnetic anisotropy

高密度記録媒体や量子コンピューターへの応用を目指して、ランタニド錯体などを用いた単分子磁石が近年盛んに研究されている。単分子磁石特性は、一般的には金属イオンの磁気異方性である。しかし、現在のところ、錯体の電子状態と磁気異方性との関係は十分に明らかになっていない。そこで本研究では、ダブルデッカー型テルビウム(III) フタロシアニン錯体<sup>1)</sup>に着目し、密度汎関数理論(DFT)法を用いて電子状態を求め、磁気異方性パラメータ(*D*)を計算した。またフタロシアニンに置換基(X)を導入した系についても同様に計算した。置換基(X)の位置はFig. 1に示した。

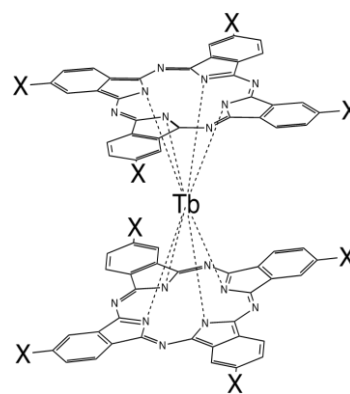


Fig. 1 ダブルデッカー型テルビウム(III) フタロシアニン錯体のモデル

1) N. Ishikawa et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, 125, 8694-8695; K. Katoh et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 9967-9976.