

## バソクプロインコバルト(II)錯体における電子状態と磁気異方性の相関に関する理論研究

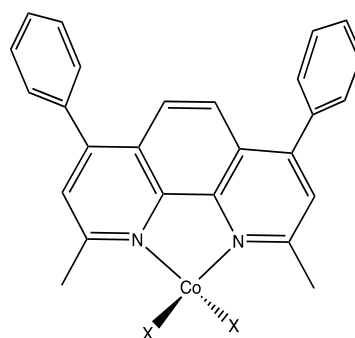
(阪大院基礎工<sup>1</sup>・阪大基礎工<sup>2</sup>・阪大 QIQB<sup>3</sup>・阪大 RCSEC<sup>4</sup>・阪大 ICS-OTRI<sup>5</sup>・阪大 SRN-OTRI<sup>6</sup>)○津田雅大<sup>1</sup>・益田晃希<sup>2</sup>・甘水君佳<sup>1</sup>・佐々木啓介<sup>1</sup>・林優太<sup>1</sup>・西田光博<sup>2</sup>・本城一樹<sup>2</sup>・岸亮平<sup>1,3,4,5</sup>・北河康隆<sup>1,3,4,5,6</sup>

Theoretical study on relationship between electronic structure and magnetic anisotropy in bathocuproine cobalt(II) complexes (<sup>1</sup>*Graduate School of Engineering Science, Osaka Univ.*, <sup>2</sup>*Faculty of Engineering Science, Osaka Univ.*, <sup>3</sup>*QIQB, Osaka Univ.*, <sup>4</sup>*RCSEC, Osaka Univ.*, <sup>5</sup>*ICS-OTRI, Osaka Univ.*, <sup>6</sup>*SRN-OTRI, Osaka Univ.*) ○Masahiro Tsuda,<sup>1</sup> Koki Masuda,<sup>2</sup> Naoka Amamizu,<sup>1</sup> Keisuke Sasaki,<sup>1</sup> Yuta Hayashi,<sup>1</sup> Mitsuhiro Nishida,<sup>2</sup> Kazuki Honjo,<sup>2</sup> Ryohei Kishi,<sup>1,3,4,5</sup> and Yasutaka Kitagawa<sup>1,3,4,5,6</sup>

The single molecular magnets (SMMs) have been studied to realize the high-density recording mediums, quantum computers and so on. In recent years, there have been reported many SMMs with lanthanide ions, however it is desirable to realize the SMMs with more abundant and inexpensive 3d metal ions. For molecular design of the SMMs, it is crucial to clarify the relationship between the magnetic anisotropy and electronic structure, which has not been discussed well. In this study, therefore, we examine the electronic structures and magnetic anisotropy of a series of bathocuproine cobalt (II) complexes that show the SMM property by using density functional theory (DFT) calculation, and discuss about the effect of coordinated halogen ions. The result indicated that complexes with more d-p hybridized orbitals showed weaker magnetic anisotropy suggesting that the d-p orbital hybridization lower the magnetic anisotropy of the complex.

**Keywords :** single molecular magnets, cobalt (II), quantum chemistry, 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、単分子磁石が精力的に研究されている。現在ではランタニドイオンを用いた系が多数報告されているが、より豊富で安価な 3d 金属錯体で実現されることが望ましい。単分子磁石の設計には磁気異方性と電子状態の関係について理解する必要があるが、現在のところ十分な議論がなされていない。そこで本研究では単分子磁石特性が報告されているバソクプロインコバルト(II)錯体[Co(bcp)X<sub>2</sub>] (X=Cl,Br,I bcp=bathocuproine) (Fig. 1) の電子状態と磁気異方性の関係を密度汎関数理論 (DFT) 計算により議論した。計算結果より、配位したハロゲンの p 軌道と金属の d 軌道との d-p 混成の大きさと、磁気異方性の大きさに相関があることが示された。当日は錯体の電子状態と磁気異方性パラメータ (*D*) に与える影響について議論する。



**Fig. 1.** Illustration of Co(bcp)X<sub>2</sub>