

## 密度汎関数(DFT)法を用いたジスプロシウム(III)メタロセン錯体の電子状態と磁気異方性に関する理論研究

(阪大院基礎工<sup>1</sup>・阪大基礎工<sup>2</sup>・阪大 CSRN<sup>3</sup>・阪大 QIQB<sup>4</sup>・阪大 RCSEC<sup>5</sup>・阪大 ICS<sup>6</sup>)  
 ○長奎吾<sup>1</sup>・津田雅大<sup>2</sup>・甘水君佳<sup>1</sup>・上村泰五<sup>1</sup>・林優太<sup>2</sup>・佐々木 啓介<sup>2</sup>・岸亮平<sup>1,4,5</sup>・北河康隆<sup>1,3,4,5</sup>・中野雅由<sup>1,3,4,5,6</sup>

Theoretical study on electronic structure and magnetic anisotropy of dysprosium(III) metallocene complex using density functional theory (DFT) method. (<sup>1</sup> Graduate School of Engineering Science, Osaka University, <sup>2</sup> Engineering Science, Osaka University, <sup>3</sup> Center for Spintronics Research Network, Osaka University, <sup>4</sup> Center for Quantum Information and Quantum Biology, <sup>5</sup> Osaka University Research Center for Solar Energy, Osaka University, <sup>6</sup> Innovative Catalysis Science Division, OTRI, Osaka University)

○Keigo Cho,<sup>1</sup> Masahiro Tsuda,<sup>2</sup> Naoka Amamizu,<sup>1</sup> Taigo Kamimura,<sup>1</sup> Yuta Hayashi,<sup>2</sup> Keisuke Sasaki,<sup>2</sup> Ryohei Kishi,<sup>1,4,5</sup> Yasutaka Kitagawa,<sup>1,3,4,5</sup> Masayoshi Nakano<sup>1,3,4,5,6</sup>

The single-molecule magnets (SMMs) consisting of mononuclear lanthanide complexes have attracted much attention due to their applicability to the molecular memory. The magnetic anisotropy is a very important factor for the SMMs. A dysprosium metallocene complex with a  $C_5$  rotation axis has been intensively studied because of its very large magnetic anisotropy. For a design of the SMMs, it is crucial to clarify the relationship between the magnetic anisotropy and electronic structure. However it has not been discussed well in those complexes. In this study, therefore, we focus on the dysprosium complex  $[\text{Dy}(\text{Cp}^{\text{tBu}})_2]^+$ , which consists of  $\eta^5$  hexa-*tert*-butyl ligands, as shown in Fig. 1. Its electronic structure is elucidated by density functional theory (DFT) calculations, and the magnetic properties are discussed based on the obtained magnetic anisotropy parameter ( $D$ ).

**Keywords :** Single-Molecule Magnets; Dysprosium Metallocene Complexes; Quantum Chemical Calculation, Density Functional Theory (DFT) Method; Magnetic Anisotropy

近年、単核のランタニド錯体を用いた単分子磁石 (SMMs) が単分子メモリへの応用という観点から注目を集めている。磁気異方性は単分子磁石 (SMMs) としての機能発現に非常に重要である。 $C_5$  の回転軸を持つジスプロシウムメタロセン錯体 (Fig. 1) は、非常に大きな磁気異方性を有することから精力的に研究されてきた<sup>1)</sup>。単分子磁石の設計には磁気異方性と電子状態との関係について理解する必要があるが、現在のところ、これらの錯体においては十分な議論がなされていない。そこで本研究では  $\eta^5$  の配位構造を有するジスプロシウム錯体  $[\text{Dy}(\text{Cp}^{\text{tBu}})_2]^+$  に着目した。この錯体の電子状態を密度汎関数理論 (DFT) 計算より明らかにし、磁気異方性パラメータ ( $D$ ) を求めることにより磁気特性を議論した。

1) C.A.P. Goodwin et al., *Nature*. **548**, 439-442 (2017).

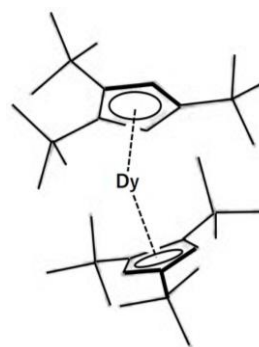


Fig.1 検討した  $[\text{Dy}(\text{Cp}^{\text{tBu}})_2]^+$  錯体の構造