

## 配位ハロゲン種によるバソクプロインコバルト(II)錯体の電子状態変化に関する理論研究

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

Theoretical study on change in electronic state of cobalt(II) bathocuproine complex by halogen ligands. (<sup>1</sup>*Faculty of Engineering Science, Osaka University*, <sup>2</sup>*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*, <sup>3</sup>*Center for Spintronics Research Network, Osaka University*, <sup>4</sup>*Center for Quantum Information and Quantum Biology, Osaka University*, <sup>5</sup>*Research Center for Solar Energy, Graduate School of Engineering Science, Osaka University*, <sup>6</sup>*Innovative Catalysis Science Division, OTRI, Osaka University*)

○Masahiro Tsuda,<sup>2</sup> Keigo Cho,<sup>1</sup> Naoka Amamizu,<sup>1</sup> Taigo Kamimura,<sup>1</sup> Yuta Hayashi,<sup>2</sup> Keisuke Sasaki,<sup>2</sup> Ryohei Kishi,<sup>2,4,5</sup> Yasutaka Kitagawa,<sup>2,3,4,5</sup> Masayoshi Nakano<sup>2,3,4,5,6</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 by using density functional theory(DFT) calculation and discuss about the effect of coordinated halogen ions.

**Keywords :** Single molecular magnets (SMMs); bathocuproine cobalt(II) complexes; density functional theory(DFT) calculation; 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<sup>1)</sup> (Fig. 1) の電子状態を密度汎関数理論 (DFT) 計算により解析し、配位したハロゲンが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考察した。

1) Lukáš Smolko et al. *New J. Chem.*, **2016**, 40, 6593-6598

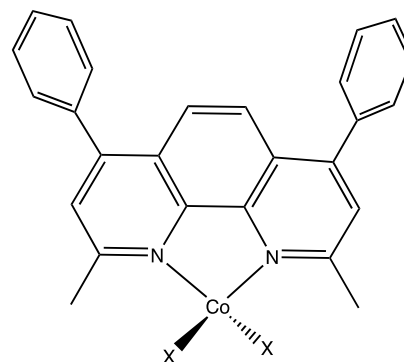


Fig. 1  
バソクプロインコバルト(II)錯体