

スピンおよび電荷分極型共鳴構造を持つアズレン縮環分子の電子構造と物性についての理論研究

(阪大院基礎工¹・阪大 QIQB²・阪大 RCSEC³・阪大 CSRN⁴・阪大 CSRN⁵) ○坂井 亮太¹・杉森 亮太¹・岡田 健治¹・土田 聖也¹・岸 亮平^{1,2,3}・北河 康隆^{1,2,3,4}・中野 雅由^{1,2,3,4,5}

Theoretical Study on Electronic Structures and Properties of Azulene-Fused Conjugated Molecules having Spin- and Charge-Polarized Resonance Structures (¹Graduate School of Engineering Science, Osaka University, ²Center for Quantum Information and Quantum Biology, Osaka University, ³Research Center for Solar Energy Chemistry, Osaka University, ⁴Center for Spintronics Research Network, Osaka University, ⁵Innovative Catalysis Science Division, Institute for Open and Transdisciplinary Research Initiatives, Osaka University) ○Ryota Sakai,¹ Ryota Sugimori,¹ Kenji Okada,¹ Seiya Tuchida,¹ Ryohei Kisihi,^{1,2,3} Yasutaka Kitagawa,^{1,2,3,4} Masayoshi Nakano^{1,2,3,4,5}

Fused-ring conjugated molecules involving azulene units are known to exhibit unique electronic structures and properties. In this study, we investigate the relationship between the structures and properties of several azulene-fused molecules exhibiting both the spin- and charge-polarized resonance structures by quantum chemical calculations.

Keywords: Azulene; Non-Alternant Hydrocarbon; Quantum Chemical Calculation; Open-shell Character

代表的な非交互炭化水素であるアズレン骨格を含有する縮環共役分子は、六員環のみから成る系には見られない特徴的な電子構造や物性を示す¹⁾。これらのアズレン縮環分子では、化学修飾によりその電子構造や物性を制御できると期待される。本研究では、2つのアズレン骨格を含有し、スピンおよび電荷分極型共鳴構造を併せ持つ種々のアズレン縮環分子系の幾何構造、電子構造、物性の関係を量子化学計算に基づき検討した。まず六員環のみから成る縮環共役分子との比較のため、ペリレンと Fig. 1 に示すその構造異性体である分子 **1** について検討する。分子 **1** では Fig. 1 に示すような共鳴構造によりスピンおよび電荷分極構造が現れると考えられる。発表では **1** およびその他の構造異性体に対するジラジカル因子やスピンおよび電荷密度分布などの計算結果の比較により、縮環構造の違いが電子状態および物性に与える影響を検討する。

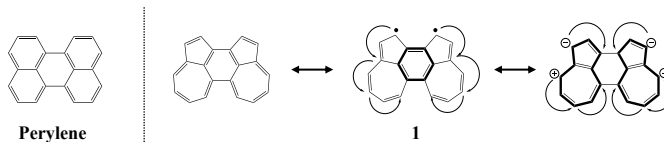


Figure 1. Resonance structure of **1**.

[1] A. Konishi, M. Yasuda, *Chem. Lett.* **2021**, 50, 195-212.