

「分子磁性体のab initio計算」

講演者氏名	鷹野 優
所属	大阪大学大学院理学研究科化学専攻量子化学研究室（山口研究室）
講演タイトル	「分子磁性体のab initio計算」
講演概略	分子磁性体は光や分子修飾によって磁性を制御することができる機能性物質として期待される。分子磁性発現機構の解明により得られた知見は分子磁性体の設計指針となるだけでなく、磁氣的相互作用が重要である金属含有タンパク質等の反応機構の解明にも役立つと考えられる。そこで本研究ではab initio分子軌道法、密度汎関数法を用いて様々な分子磁性体の磁氣的相互作用を調べ、分子磁性発現機構、金属含有タンパク質等の反応機構の解明を試みた。