

磁化率解析ソフト MagSaki の開発と利用

崎山 博史

山形大学理学部物質生命化学科(〒990-8560 山形市小白川町 1-4-12)

【緒言】

磁化率の温度依存性がスピン角運動量だけに基づいて解釈できる場合には、磁化率の理論式は単純な形となり、実測データの解析も容易である。これに対して、スピン角運動量に加えて軌道角運動量が関わる場合には、理論式が複雑（あるいは式で表すことが不可能）になり、解析も困難となる。先に発表者は軌道角運動量の寄与が大きい高スピンコバルト(II)錯体の二核錯体について磁化率の式を導き[1]、解析ソフト MagSaki を開発した[2]。今回は従来のソフトに磁気交換相互作用の異方性を考慮する解析モードを加え、MagSaki について磁気解析をおこなった。

【方法】

MagSaki の開発、改良には RealBasic を用いた。

【結果】

二核高スピンコバルト(II)錯体においてコバルト間に反強磁性的相互作用が働く場合、磁化率が極低温で下がりきる場合と、いったん下がるが再び大きくなる場合がある。再び大きくなる理由は、一般的に常磁性不純物または零磁場分裂によるものであると考えられる。前述の磁化率の式で等方的な磁気交換相互作用を仮定した場合には極低温部分の磁化率の増加を説明できないが、磁気交換相互作用の異方性を考慮した場合には零磁場分裂による挙動として実測値を再現できる。発表ではその他いくつかの解析例[3]を示す。

参考文献

- 1 Hiroshi Sakiyama, Rie Ito, Hitoshi Kumagai, Katsuya Inoue, Masatomi Sakamoto, Yuzo Nishida, and Mikio Yamasaki, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2001, 2027-2032, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2001, 2705.
- 2 Hiroshi Sakiyama, *J. Chem. Software*, 2001, **7**, 171-178.
- 3 Md. Jamil Hossain, Mikio Yamasaki, Masahiro Mikuriya, Atsushi Kuribayashi, and Hiroshi Sakiyama, *Inorg. Chem.*, 2002, **41**, 4058-4062.