

三核高スピンコバルト(II)化合物の磁化率解析ソフト

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。前回（2005年秋）、軌道角運動量の寄与が大きい高スピンコバルト(II)イオンを二つ含む化合物について磁化率解析をおこなうソフトウェアMagSakiを発表した。今回は三つの高スピンコバルト(II)イオンを含む化合物の磁化率を解析するソフトMagSakiTについて発表する。

【方法】

MagSakiTの開発にはRealBasicを用いた。

【結果】

まず、ABA二等辺三角形型の三核構造を仮定し（図1）、磁化率の式を導いた。 n 核（ n は自然数）のコバルト(II)錯体の場合 $12^n \times 12^n$ の永年行列式を解かねばならないが、基底クラマース項間の磁気交換相互作用だけを考える近似法[1]を用いることでこの問題を解決した。

発表ではMagSakiTを用いた二等辺三角形型三核高スピンコバルト(II)化合物の磁化率解析例についても報告する。

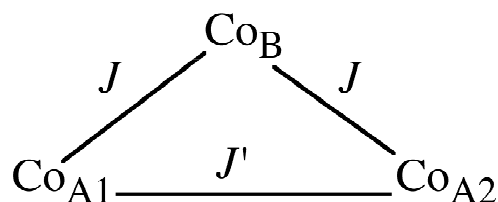


図1 三核コバルト(II)構造

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.