

二核コバルト(II)錯体のための 完全自動磁化率解析プログラムの開発

○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】

遷移金属二核錯体の交換相互作用に関する研究は50年以上前からおこなわれてきた。しかし正八面体型高スピンコバルト(II)錯体の場合は、軌道角運動量の寄与のために、現在でも解析が難しい。発表者は2001年にコバルト(II)錯体のための磁化率解析ソフトウェア MagSaki を開発し、2007年には交換相互作用の異方性も考慮した MagSaki (A) を発表した。このソフトウェアは四つの磁氣的パラメータを与えることで磁化率の温度依存性をシミュレートでき、また実測の磁化率データから磁氣的パラメータを決定することもできる。しかし磁気解析にはパラメータに関する正しい知識が必須であり、それなしでは過った解を求めてしまうこともあった。そこで今回、完全自動で磁化率解析をおこない、磁氣的パラメータを正しく求めるプログラムを新たに開発した。

【方法】

計算は Macintosh iBook (Mac OS 9.2) でおこなった。プログラミングには RealBASIC を用いた。

【結果と考察】

磁気解析で求めるパラメータは、ローカルなコバルトについての三つのパラメータと交換相互作用をあらわすパラメータの合計四つであり、これらは磁気挙動に与える影響がそれぞれ異なるため、決定可能である。

コバルト周りの歪みの程度を示すパラメータ ν が変化することで生じる零磁場分裂の変化を図1に示した[1]。実測データに基づいて解を求める場合、交点が $\nu = 0$ と $\nu = -4$ にあるため、 $\nu < 0$ 、 $0 < \nu < -4$ 、 $\nu > -4$ の三つの範囲それぞれについて、異なる解が得られる可能性がある。そこで今回、それぞれの範囲に入る三つの ν の値を初期値としてパラメータを最適化し、得られた三通りの解を総合的に判断してパラメータを決定するプログラムを開発した。

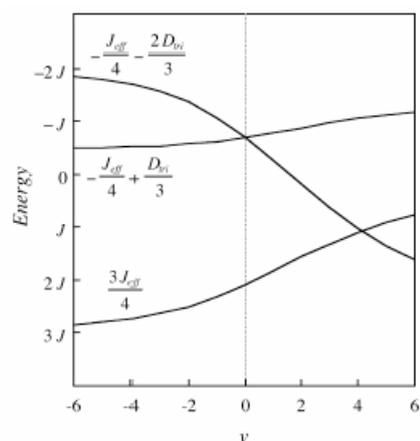


図1 零磁場分裂に及ぼす ν の影響