

四核高スピンコバルト(II)化合物の磁化率解析ソフト(1)

○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】高スピンコバルト(II)イオンを含む化合物の多くは、軌道角運動量の寄与が無視できないため磁気データを解釈することが難しい。そこでコバルト(II)イオンを含む化合物の磁化率解析ソフトウェアの開発を行っている。今回は四核コバルト錯体をターゲットとしたソフトウェア開発の第一段階として、すべてのコバルトが等価であり相互作用が等方的であると仮定し、四面体型及びバタフライ型四核構造(図1)について磁化率解析を行うソフトウェアを開発した。

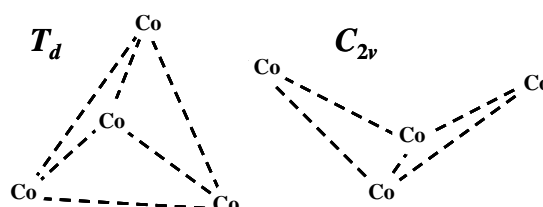


図1 正四面体型四核構造(左)とバタフライ型四核構造(右)。

【方法】磁化率の理論式は、四核銅(II)錯体についての Hatfield らの方法[1]を参考に導出した。プログラミングには Realbasic を用いた。

【結果】本ソフトウェアは、正四面体型及びバタフライ型四核コバルト(II)錯体に関する合計6パターンのモデルについて、磁化率のシミュレーションと実測データに対するパラメータ最適化を行うことができる。シミュレーションの一例を図2に示す。ここでは C_2 対称のバタフライ型構造で3種類の相互作用(J , J' , J'')を仮定している。本ソフトウェアでは、スピン軌道相互作用やコバルト周りのアキシヤル歪みについても考慮することができ、様々なタイプの四核コバルト(II)錯体について磁化率解析を行うことができる。

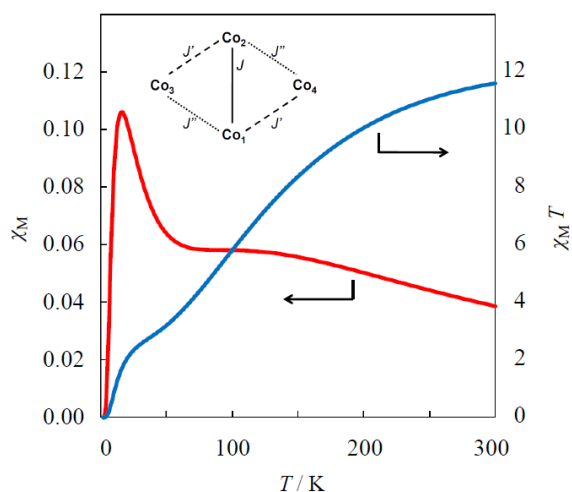


図2 磁化率及び $\chi_M T$ の温度依存理論曲線 ($J = -50$, $J' = -25$, $J'' = -10 \text{ cm}^{-1}$)。

参考文献

[1] W. E. Hatfield and G. W. Inman, Jr., *Inorg. Chem.* 8, 1376-1378 (1969).