

## 内包フラーレンの電子状態と構造

日野 照純 教授

愛媛大学大学院理工学研究科

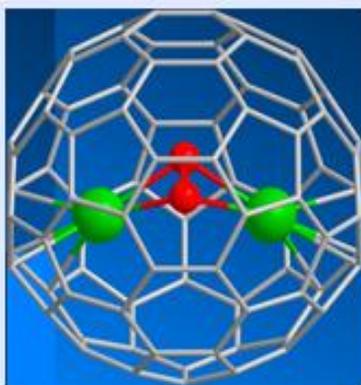
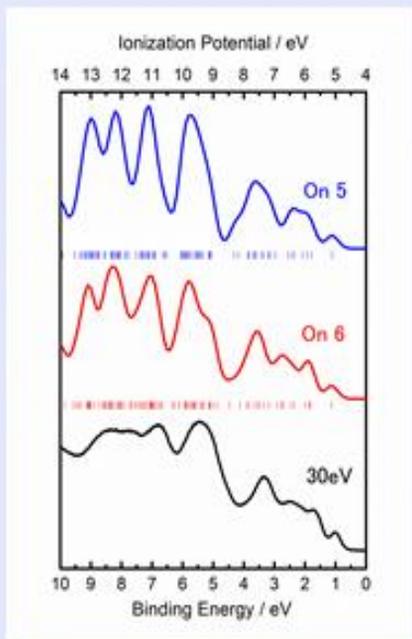
日時:10月7日(月) 16:00から17:15 頃まで

場所:先導研中央棟111セミナー室

聴講自由

フラーレンケージ内の空間には原子や原子団を取り込むことができる。これら原子団等に金属原子が含まれる場合、内包金属原子はその価電子をフラーレンケージに与えるので、フラーレンの電子状態は大きく変化する。光電子分光法は物質の電子状態を直接に測定できるので、この電子状態変化を明らかにすることができる。また、最近理論計算が実験的に得られる光電子スペクトルを良く再現できるほど精度が向上してきたことから、実測と理論を比較対照することにより、原子団を内包したフラーレンケージや内包原子団構造を推定することも可能となってきた。

理論計算(DFT)を用いると( $C_{2v}$ - $Y_2C_2@C_{82}$ の例)



理論との対比で、UPSをよく再現できる構造を見つけられる

本セミナーでは、光電子分光法によって測定された内包フラーレンの電子状態を示すとともに、内包原子団の構造をどのように推定しているかについての最近の結果を述べる。

連絡先:先導研 吾郷  
(ago@cm.kyushu-u.ac.jp)