

## Development of efficient quantum chemical methods for designing organic ferromagnets

朱, 勳

<https://hdl.handle.net/2324/1544011>

---

出版情報：九州大学, 2015, 博士（理学）, 課程博士  
バージョン：  
権利関係：やむを得ない事由により本文ファイル非公開（2）

氏名	朱 勳					
論文名	Development of efficient quantum chemical methods for designing organic ferromagnets (有機強磁性体設計のための効率的量子化学手法の開発)					
論文調査委員	主査	九州大学	教授	氏名	青木	百合子
	副査	九州大学基幹教育院	教授	氏名	古屋	謙治
	副査	九州大学高等研究院	准教授	氏名	吉田	紀生

### 論文審査の結果の要旨

本論文は、複数の不対電子を有する有機ラジカル高分子に対し、高スピン型安定性を予測可能にする、高精度かつ高効率な新しい開殻系のための分子軌道計算理論と方法を開発し、これらの計算理論を用いた有機磁性体設計の有効性を実証したもので、理論量子化学の発展に寄与するところが大きい。よって、博士（理学）の学位に値するものと認める。