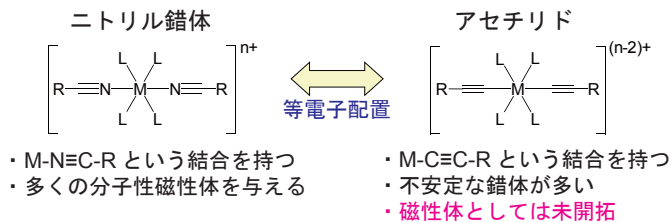
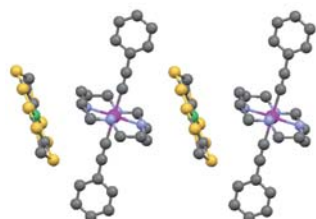


遷移金属アセチリド錯体とは



近年, 安定なアセチリド錯体が開発された

アセチリド錯体を用いた初の磁性体を報告
(分子科学討論会 2009)



弱強磁性体 $[CrCyclam(C \equiv C - Ph)_2][Ni(mdt)_2](H_2O)$

しかし, 主要な相互作用は Cyclam 環経由であり,

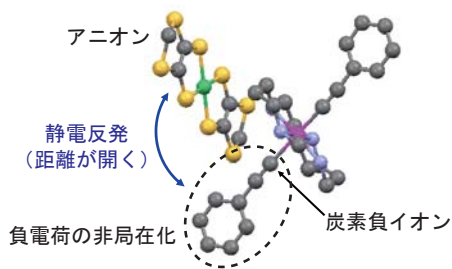
アセチリド部位での相互作用は強いのか否か
(アセチリドは磁性体に向いているのか?)

は依然謎のままである

設計指針と結晶構築

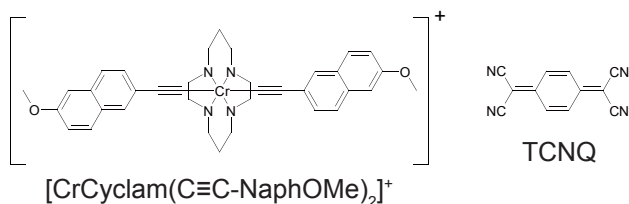
なぜアセチリド部位は隣接分子から遠いのか?

➡ 負電荷間の静電反発



設計指針: 反発を減らす

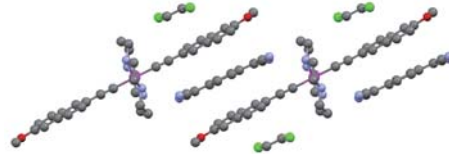
- アセチリド部位のπ系を広げる
- アニオンをより電子親和力の強いものに



結晶作成

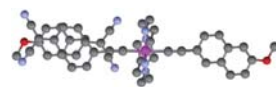
$Bu_4N^+TCNQ^-$ 単体もしくは TCNQ との混合物 / PhCl を
を
 $[CrCyclam(C \equiv C - NaphOMe)_2]OTf / 1,2-dichloroethane$
の上に注ぎ, ゆっくり拡散させる.

結晶構造

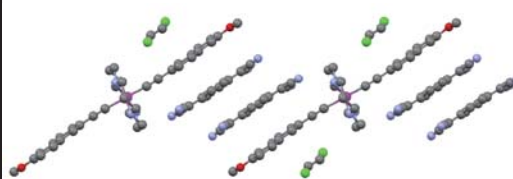


- 1:1 塩
- $S = [3/2, 1/2]$ のフェリ鎖

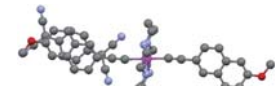
分子間の重なり



π系の重なりが良い積層



- 1:2 塩
- TCNQ 2 分子にスピンの 1 つ
- $S = [3/2, 1/2]$ のフェリ鎖



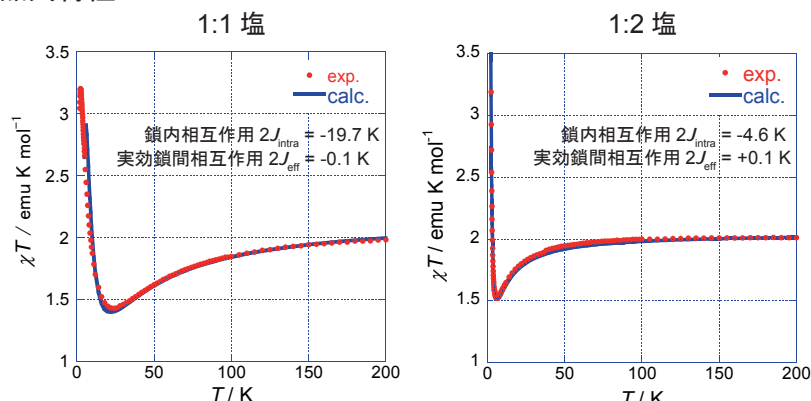
1:1 塩とほぼ等しい積層



$(TCNQ)_2^-$ の積層

アセチリド部位と磁性アニオンが直接積層

磁気特性



- face-to-face の積層を反映し, 1:1 塩では非常に強い分子間相互作用
- 1:2 塩では, スピン (電荷) が dimer に広がっていることを反映して相互作用が若干弱い, それでも数 K の強さがある.

アセチリド部位は, 十分強い相互作用を作り得る

分子性磁性体の構成要素として有望

まとめと今後の展開

- 広いπ系を持った分子を配位子, 電子親和力の強い分子をアニオンに用いることで, アセチリドとアニオン間に相互作用を実現
- アセチリド部位を介した相互作用が十分強いことを実証
- 今後の物質開発における有望性を示す

今後の展開

- TTF 系分子を組み込むことで, 分子内π-d 相互作用を持つ系を構築

