

Na(dibenzo[18]crown-6)[Ni(dmit)₂](CH₃CN)₂ 結晶を用いた分子の吸脱着と物性評価

(広島大院先進理工¹・広島大キラルノット超物質拠点²・広島大キラル国際研究拠点³・宇部高専⁴・広島大先進セ⁵・東北大多元研⁶・北大電子研⁷・JST さきがけ⁸)

○永田 翔¹・加藤 智佐都¹・Cosquer Goulven^{2,3}・藤林 将⁴・井上 克也^{1,2,3,5}・芥川 智行⁶・高橋 仁徳⁷・中村 貴義⁷・西原 禎文^{1,3,5,8}

Adsorption/desorption of molecules using Na(dibenzo[18]crown-6)[Ni(dmit)₂](CH₃CN)₂ salt and evaluation of physical properties (¹ Grd. Sch, Adv. Sci. Eng; ² SKCM²; ³ CResCent; Hiroshima Univ., ⁴NIT, Ube College⁵, IAMR, Hiroshima Univ., ⁶IMRAM, Tohoku Univ., ⁷RIES, Hokkaido Univ., ⁸PRESTO, JST) ○Sho Nagata¹, Chisato Kato¹, Goulven Cosquer^{2,3}, Masaru Fujibayashi⁴, Katsuya Inoue^{1,2,3,5}, Tomoyuki Akutagawa⁶, Kiyonori Takahashi⁷, Takayoshi Nakamura⁷, Sadafumi Nishihara^{1,3,5,8}

We previously reported the synthesis of a novel Na(dibenzo[18]crown-6)[Ni(dmit)₂] (**NaDB salt**) complex^[1]. **NaDB salt** formed one-dimensional ion channel structure incorporating CH₃CN as a crystalline solvent (Fig. 1). Notably, it was observed that the **NaDB salt** could reversibly desorb CH₃CN upon heating and re-adsorb CH₃CN when exposed to CH₃CN vapor^[1]. In this study, our objective was to manipulate the physical properties by introducing different molecules into the crystal lattice of **NaDB salt**.

Keywords : Supramolecules; ion channel; crown ether; molecular adsorption

当研究室では、dibenzo[18]crown-6 が Na⁺を包接した超分子カチオンと、*S* = 1/2 のスピンを有し、分子磁性体のビルディングブロックとして広く用いられている[Ni(dmit)₂]⁻錯体とを組み合わせることで、Na(dibenzo[18]crown-6)[Ni(dmit)₂](CH₃CN)₂ (**NaDB salt**) の結晶作製に成功した^[1]。**NaDB salt** 内では超分子カチオンと結晶溶媒である 2 つの CH₃CN が *b* 軸方向に交互に一次元配列している (Fig. 1)。**NaDB salt** は 433 K で 4 時間加熱を行うことで結晶内の CH₃CN が脱離し、その後 303 K で 1 時間 CH₃CN 蒸気さらすことで再度 CH₃CN を吸着することが可能であることが示された。また、この CH₃CN の吸脱着により、磁気挙動が変化する。本研究では **NaDB salt** の吸脱着機能を用いて、結晶内に CH₃CN 以外の分子を吸着させることによる物性の制御を目的とした。実際、pyridine の吸着後に粉末 X 線回折を行ったところ吸着前には見られなかった回折ピークが観測されるなど吸着前後で結晶構造が変化した可能性が示唆された (Fig. 2)。当日は他の分子を吸着させた際の構造変化や、磁気物性について報告する。

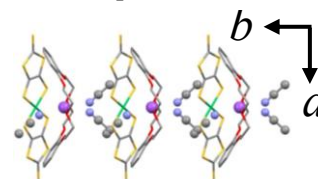


Fig. 1. The crystal structure of **NaDB salt** viewed along the *c*-axis.

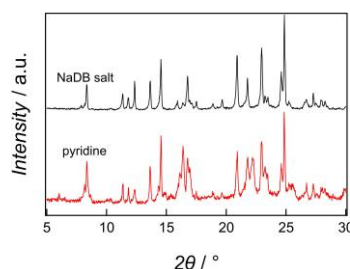


Fig. 2. powder x-ray diffraction of pyridine adsorption and **NaDB salt**

[1] K. Ichihashi, *et al.*, *Chem. Lett.* **2019**, 48, 4, 329-332.