アゾールカルボン酸誘導体を基盤とした
金属錯体結晶の構造と物性

（東北大院工[1]・東北大多元研[2]）○堤 咲良[1]・出倉 駿[1,2]・芥川 智行[1,2]
Structure and physical properties of metal complex crystals based on azole carboxylic acid derivatives ([1]*Grad. Sch. Eng., Tohoku Univ.*; [2]*IMRAM, Tohoku Univ.*)
○Sakura Tsutsumi,[1] Shun Dekura,[1,2] Tomoyuki Akutagawa,[1,2]

Materials having a proton-transferable azole moiety coexisting with an electron-active metal complex moiety are expected to exhibit interesting physical properties based on dynamic proton and electronic functions. In this study, we synthesized a metal complex (**Cu-3mPz4COO**) using 3-methyl-2*H*-pyrazole-4-carboxylic acid (**3mPz4COOH**) and Cu(II) ion. The coordination structure of **Cu-3mPz4COO** was clarified to be 2D layered structure (Fig. 1). Temperature dependence of the d.c. magnetic susceptibility (Fig. 2) showed a peak at ca. 6.5 K, suggesting the existence of antiferromagnetic interactions between the S = 1/2 spin on Cu(II) ions. The data was well fitted by the equation considering the 2D square lattice Heisenberg model[1)] with the exchange interaction $|J|$ = 7.3 K. Therefore, it is considered that a ligand-mediated super-exchange interaction occurs.
Keywords : Metal complexes, copper (II) ions, magnetic properties, dielectric properties

プロトン授受可能なアゾール部位と電子活性な金属錯体部位が共存した物質では、動的プロトンと電子機能に由来する興味深い物性が期待される。本研究では、3-メチル-2*H*-ピラゾール-4-カルボン酸 (**3mPz4COOH**) と銅 (II) イオンから金属錯体 (**Cu-3mPz4COO**) を合成した。得られた錯体結晶に対して単結晶 X 線構造解析を行った結果、**3mPz4COOH** のピラゾール部位の N およびカルボキシル基の O が、それぞれ Cu(II)イオンに 2 つずつ配位した平面四配位構造が形成し、これが *bc* 面に広がった 2 次元配位高分子であることが明らかになった (Fig. 1)。この錯体の多結晶試料を用いて 2–300 K の温度範囲で直流磁化率の温度依存性を測定した。結果、通常の Curie 常磁性とは異なり 6.5 K にピークが観測され、S = 1/2 Cu(II)上のスピン間に反強磁性的相互作用の存在が示唆された (Fig. 2)。この磁化率の温度依存性は、2 次元正方格子 Heisenberg 模型[1)]でよく再現され、磁気交換相互作用の大きさは$|J|$ = 7.3 K と見積もられた。以上の結果から、**Cu-3mPz4COO** では配位子を介した Cu(II)間の超交換相互作用が働いていると考えられる。当日は誘電特性についても議論する。

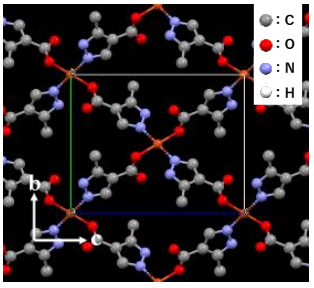

Fig. 1 Crystal structure of **Cu-3mPz4COO**

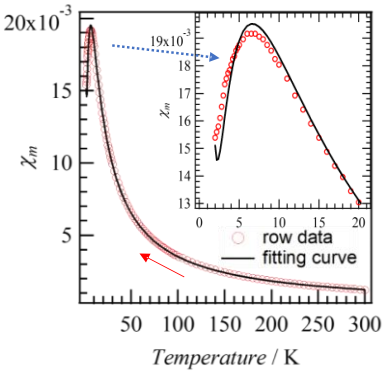

Fig. 2 Fitting data for magnetic susceptibility

1) M. E. Lines, *J. Phys. Chem. Solids*, **1970**, *31*, 101.

© The Chemical Society of Japan