

## 塩素置換インドールニトロニルニトロキシド誘導体の分子配列と磁気特性

(慶大理工) ○増田 浩人・大高 遼・瀧井 優臣・三浦 洋平・吉岡 直樹  
Molecular Arrangement and Magnetic Properties of Chlorine-Substituted Indole-Nitronyl Nitroxide Derivatives (<sup>1</sup>Faculty of Science and Technology, Keio University) ○Hiroto Masuda, Ryo Ohtaka, Masaomi Takii, Youhei Miura, Naoki Yoshioka,

Nitronyl nitroxide (NN) derivatives with indole(In-NN, **3**) ring formed piled columnar assemblies and its magnetic property followed one-dimensional ferromagnetic chain model. The author of the present paper intended to discuss the effect of chlorine substitution on the crystal structure and magnetic properties of **4 - 7**.

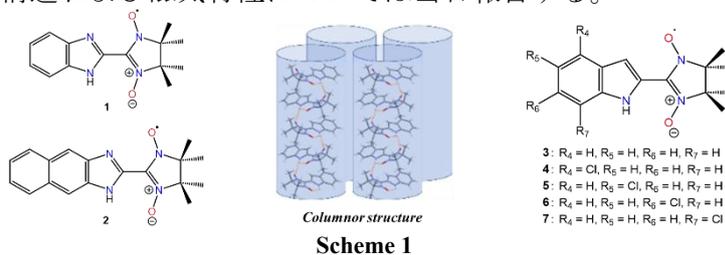
Single crystal X-ray structure analyses revealed that **6** formed the ferromagnetic one-dimensional columnar assemblies similar to that of **1** by branched hydrogen bond, while **4** assembled a unique dimer and showed a characteristic contact between chlorine atoms. SQUID magnetic susceptibility measurements indicate that there is no significant magnetic interaction in **4**. The crystal structures and magnetic properties of **5** and **7** will be discussed.

*Keywords* : Nitroxyl Radical; Hydrogen Bond; Substituent Effect; Magnetic Interaction; Molecular Array

ニトロニルニトロキシド(NN)は、分子磁性体のスピン中心として広く用いられている安定有機ラジカル骨格である。当研究室では、NNの2位にベンズイミダゾール、ナフトイミダゾールなどNH部位を有する複素環を導入した**1, 2**において、水素結合による集積化と磁気特性の関係を検討してきた<sup>1)</sup>。特にインドールニトロニルニトロキシド(**3**)は結晶中で**1**と同様の一次元積層カラム構造を形成し、カラム内で強磁性的相互作用を示す。本研究では置換基の立体効果と電子的効果に着目し、Cl基を**3**の4~7位に置換したNN誘導体**4 - 7**を合成し、分子配列および磁気特性に及ぼす塩素置換の影響を議論する。(Scheme 1)

メタノール中での温度勾配法を用いた再結晶により単結晶**4**および**6**を得た。**4**は二量体構造が観測され、**4**の単結晶では分子間で特徴的なCl間接近が観測された。SQUID磁化率測定の結果、分子間に有意な磁性的相互作用は観測されなかった。**6**は**3**と同様の一次元積層カラム構造の形成が確認され、強磁性的相互作用が観測された。

**5, 7**の結晶構造および磁気特性については当日報告する。



1) 増田、大高、國本、久富、目見田、瀧井、三浦、吉岡、第47回ケモインフオマティックス討論会 (2024年12月、金沢)