

基底三重項状態を示す *o*-フェニレン型ジラジカルを配位子として有する銅錯体の合成と錯形成がスピン間相互作用に与える影響の調査

(¹京大院工,²京大福井セ) ○大久保 博将¹・清水 大貴¹・松田 建児^{1,2}

Synthesis and properties of copper complexes of *o*-phenylene bridged diradical with a triplet ground state (¹Graduate School of Engineering, Kyoto University, ²FIFC, Kyoto University)
Hiromasa Okubo,¹ Daiki Shimizu,¹ Kenji Matsuda^{1,2}

Recently, we found that a hexaazaphenanthrene derivative with a Kekulé-type *ortho*-quinodiiimine structure (*o*-BenD) adopts an anti-Ovchinnikov triplet ground state. Since the diradical has a phenanthroline-like structure, it is expected to act as a chelating ligand for various metal ions. In this study, we synthesized an *o*-BenD-coordinated copper(I) complex, [Cu(*o*-BenD)₂]⁺. SQUID magnetometry indicated that the ground state of [Cu(*o*-BenD)₂]⁺ is singlet, which has been interpreted as the intramolecular exchange interaction of the diradical ligand changed from ferromagnetic to antiferromagnetic. In this presentation, we will report the structure and physical properties of the copper complex in detail.

Keywords: Ferromagnetic interaction, diradical, stable radical, ESR, Metal complex

Kekulé 型ジラジカロイドは一般に一重項基底状態を取ることが知られているが、最近我々はベンゼン環に2つのトリアジラジカルをオルト位で縮環させた *o*-BenD が Anti-Ovchinnikov 型の基底三重項状態をとることを見出した。この分子はフェナントロリン様の構造を有するため、キレート配位子としてはたらくことが期待される。そこで本研究では *o*-BenD の Cu(I)錯体[Cu(*o*-BenD)₂]⁺を合成した(Figure 1)。磁化率測定の結果、[Cu(*o*-BenD)₂]⁺の基底状態は一重項であることが分かった。これは Cu(I)への配位によって *o*-BenD の分子内交換相互作用が反強磁性的へと変化したことによると考えている。本発表ではこの銅錯体の構造や物性についての詳細を報告する。

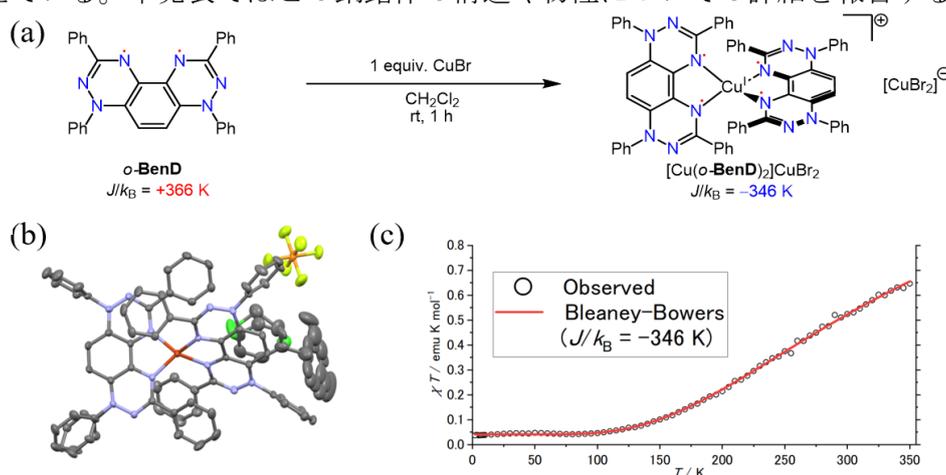


Figure 1. (a) Synthesis of [Cu(*o*-BenD)₂]CuBr₂, (b) X-ray structure of [Cu(*o*-BenD)₂]PF₆, and (c) observed (circles) and fitted (line) χT - T curves of [Cu(*o*-BenD)₂]CuBr₂.