

磁性イオン液体の液体構造と反磁性相互作用

(信州大学¹) ○二村 竜祐¹・高崎 優真¹・飯山 拓¹

The Liquid Structure and Antiferromagnetic Interaction of Magnetic Ionic Liquids (¹*Faculty of Science, Department of Chemistry, Shinshu University*) ○ Ryusuke Futamura¹, Yuma Takasaki¹, Taku Iiyama¹

Magnetic ionic liquid (MIL) is regarded as one of the kinds of organic-inorganic hybrid materials, which are composed of a charge delocalized bulky organic cation and an inorganic anion of transitional metal ligand with magnetic moments. The uniqueness of MILs is the high magnetic response with pure liquid states at room temperature, offering their use in new application fields.

Here, we show the antiferromagnetic interaction between magnetic FeCl_4^- ions of MILs even in the disordered structure by X-ray scattering-aided Hybrid reverse Monte Carlo simulation. **Keywords :** *Magnetic Ionic Liquid, X-ray scattering measurement, Hybrid reverse Monte Carlo simulation, Antiferromagnetic Interaction*

イオン液体は有機カチオンと無機アニオンからなる有機無機ハイブリッド材料であり、機能性を有する液体材料の開発の観点から注目を集めている。特に、室温で純粋な液体であり磁場応答性を示す磁性イオン液体は、磁気分離や磁気浮遊密度測定などの応用で期待される新規『機能性液体』である。近年、機能性液体を指向したイオン液体の応用研究が盛んに行われる一方で、その特長や機能性を微視的に評価する液体構造解析の研究はまだ十分ではない。

本研究では X 散乱測定と分子シミュレーションを組み合わせた手法であるハイブリッドリバースモンテカルロ (HRMC) 法により磁性イオン液体構造について詳細に検討し、磁性イオン液体中で働く反磁性相互作用を微視的に明らかにした¹⁾。

本研究で用いた磁性イオン液体は、1-Ethyl-3-methylimidazolium tetrachloro ferrate (>98.0%, 東京化成工業(株)製 EMI- FeCl_4) 及び 1-Buthyl-3-methylimidazolium tetrachloro ferrate (>98.0%, 東京化成工業(株)製 BMI- FeCl_4) である。Fig. 1 は、HRMC シミュレーションから得たカチオン周りの FeCl_4^- アニオンの空間分布関数である (左 EMI- FeCl_4 、右 BMI- FeCl_4)。BMI カチオンの配位構造は EMI カチオンと比べ、サイト A と B が広域に広がっており、また A と C がつながっている。BMI が形成する“ぼんやり”とした配位構造が、BMI- FeCl_4 が低温 (90 K) でも結晶化しないことに関係している。

発表では、低温での FeCl_4^- 間の構造的な反磁性相互作用の関係について詳細に議論する。

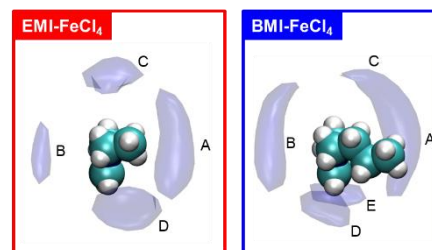


Fig.1 磁性イオン液体におけるカチオン周りの配位構造の空間分布関数

1) R. Futamura, Y. Takasaki, H. Otsuka, S. Ozeki, K. Kaneko, T. Iiyama, J. Mol. Liq. **2020**, 311, 113321.