

プロトン、スピン、分子配向の連動に基づくプロトン化状態の多段階変換

(九大先導研¹) ○中西 匠¹・佐藤 治¹

Multi-step conversion of protonation state based on the coupling of proton, spin and molecular orientation (¹*Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu University*)

○Takumi Nakanishi¹ and Osamu Sato¹.

Proton transfer phenomenon controlled by external stimuli is an attractive research target for the development of functional materials. Our group have developed the iron(II) complexes exhibiting the intramolecular proton transfer coupled spin transition (PCST) to explore the unprecedented proton transfer phenomenon in crystalline system and to realize the new functions in molecular-based materials science. In this presentation, we report the iron(II) complex ($[\text{Fe}(\text{HL-F})_2](\text{OTf})_2$) exhibiting unprecedented proton transfer behaviors and transition processes based on the coupling of three kind of components (proton, spin and molecular orientation).

Keywords : Proton Transfer; Spin Transition; Hydrogen Bond; Multi Stability; Hydrazone Complex

プロトン移動現象は水素結合を形成する分子の電子状態および結合の変化を引き起こすことから、外場によるプロトン移動の制御が可能な物質の開拓は強誘電体や蛍光材料、磁性や伝導性、光学特性等の制御が可能な機能性材料の開発に応用出来ると期待される。当研究グループでは固体中における新たなプロトン移動現象や外場誘起プロトン移動に基づく新規機能の開拓を目的に、プロトン移動現象とスピン転移現象が連動して発現する鉄二価錯体(プロトン結合スピン転移錯体)の開発を行っている。当グループでは以前にプロトン移動とスピン転移に加え、極性アニオンの回転が連動する錯体 $[\text{Fe}(\text{HL-F})_2](\text{OTf})_2$ を開発し、この錯体が結晶中において多様なプロトン化状態、プロトン移動現象を示すことを報告した¹。最近、本錯体の磁性測定結果を基に単結晶 X 線回折測定を行った結果、これまでに観測されていた3種の相に加え、新たな中間相(INT2相)が存在することが確認された(図1)。本発表では、新たな中間相の構造を基に明らかとなった、新規プロトン移動現象およびプロトン移動過程の発現について報告する(図2)。

1) 中西匠、堀優太、塩田淑仁、吉澤一成、佐藤 治 第15回分子科学討論会、3D14 (2021).

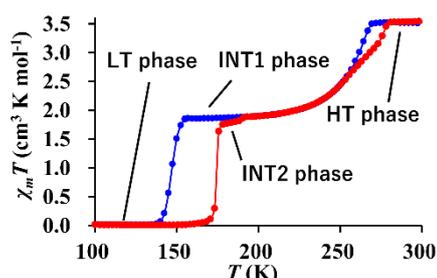


図1 $[\text{Fe}(\text{HL-F})_2](\text{OTf})_2$ の磁性および結晶構造解析により確認された4種の相。

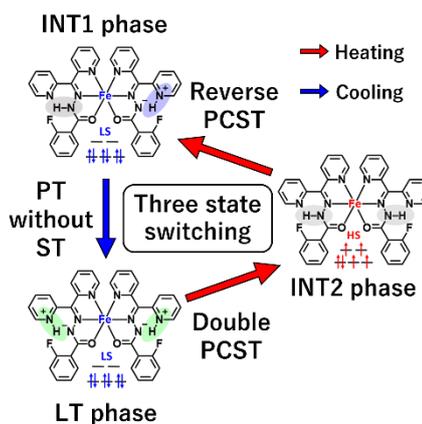


図2 観測されたプロトン移動挙動およびプロトン移動過程。