

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		分子構造制御に立脚した希土類系分子磁石の磁気異方性設計と制御			
研究テーマ (欧文) AZ		Rational control of the magnetic anisotropy of the Lanthanide SMMs (single-molecule magnets) based on the structural design.			
研究氏 代表名 者	カタカナ CC	姓)カジワラ	名)タカシ	研究期間 B	2009 ~ 2010 年
	漢字 CB	梶原	孝志	報告年度 YR	2011 年
	ローマ字 CZ	KAJIWARA	Takashi	研究機関名	奈良女子大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		奈良女子大学理学部化学科・教授			
<p>概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)</p> <p>個々の分子レベルで磁石として振る舞う金属錯体を「単分子磁石 (SMM)」と呼ぶ。従来の「古典磁石」が磁石として振る舞う仕組みは、スピンキャリア間の相互作用により磁化ベクトルの反転が凍結されていることに起因するが、孤立した「単分子磁石」における特異な磁気特性の発現は、強い磁気異方性のため分子内に形成されたエネルギー障壁により、分子レベルで磁化ベクトルが固定されることに因る。有機-無機ハイブリッド化合物である金属錯体でそのような物性を発現させるためには、的確な配位子場を与えるような有機配位子を設計・選択し、大きな角運動量と磁気異方性を有する金属イオンをその配位子場中に配置させ、金属イオンのもつ磁化ベクトルの向きを特定の方向に固定する分子設計が重要である。本研究においては重希土類金属イオンであるテルビウム、ジスプロシウム、ホルミウム、あるいはエルビウムを対象に、個々の金属イオンの基底電子配置と電子雲形状を考慮しつつ、容易軸型の強い磁気異方性が発現するために最適な配位子場の設計指針を提案した。これにより、1) これまでに報告されてきた単分子磁石の中でも最も高いエネルギー障壁を有する Dy (III) 単分子磁石、2) 世界で二例目、分子設計によるものとしては世界で初とな Er (III) 単分子磁石の合成、に成功するとともに、3) 重希土類系の金属錯体を系統的に解析し、磁気異方性を定量的に算出するための方法論の開発に成功した。3) の成功により、これまでは偶然性に頼っていた単分子磁石の合成に対し、合理的な分子設計の可能性も提示できた。</p>					
キーワード FA	分子設計	希土類金属	磁性	配位子場	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 <sub>GB</sub>	Multi-Path Magnetic Relaxation of Mono-Dysprosium <sup>III</sup> Single-Molecule Magnet with Extremely High Barrier							
	著者名 <sub>GA</sub>	A. Watanabe, T. Kajiwara, et al.	雑誌名 <sub>GC</sub>	<i>Chem. Eur. J.</i>					
	ページ <sub>GF</sub>	7428~7432	発行年 <sub>GE</sub>	2	0	1	1	巻号 <sub>GD</sub>	17
雑誌	論文標題 <sub>GB</sub>	Wheel-shaped Er <sup>III</sup> Zn <sup>II</sup> <sub>3</sub> Single-Molecule Magnet: A Macrocyclic Approach to Designing Magnetic Anisotropy							
	著者名 <sub>GA</sub>	A. Yamashita, T. Kajiwara, et al.	雑誌名 <sub>GC</sub>	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>					
	ページ <sub>GF</sub>	4016~4019	発行年 <sub>GE</sub>	2	0	1	1	巻号 <sub>GD</sub>	50
雑誌	論文標題 <sub>GB</sub>	Structural Design of Easy-axis Magnetic Anisotropy and Determination of Anisotropic Parameters of Ln(III)-Cu(II) Single-Molecule Magnets.							
	著者名 <sub>GA</sub>	T. Kajiwara, K. Takahashi, et al.	雑誌名 <sub>GC</sub>	<i>Chem. Eur. J.</i>					
	ページ <sub>GF</sub>	196~205	発行年 <sub>GE</sub>	2	0	1	1	巻号 <sub>GD</sub>	17
図書	著者名 <sub>HA</sub>								
	書名 <sub>HC</sub>								
	出版者 <sub>HB</sub>		発行年 <sub>HD</sub>					総ページ <sub>HE</sub>	
図書	著者名 <sub>HA</sub>								
	書名 <sub>HC</sub>								
	出版者 <sub>HB</sub>		発行年 <sub>HD</sub>					総ページ <sub>HE</sub>	

欧文概要 EZ

Single-molecule magnets (SMMs) are a class of metal-organic compounds, which were discovered in the early 1990s. SMMs exhibit hysteresis of magnetization upon external magnetic field even though they have no long-range cooperative interactions. This behavior originates in a large magnetic moment and uni-axial magnetic anisotropy, which gives rise to a double-well potential of the spin-up and the spin-down states and relaxation phenomenon between them. To achieve better SMM features, introduction of the heavy lanthanide ions (Ln) such as Tb and Dy are becoming popular because of their large angular momentum in the ground state as well as a large uni-axial magnetic anisotropy. We have developed the method to achieve the large magnetic anisotropy by the appropriate designing of the ligand field (LF) anisotropy, which led to a large barrier for spin flipping,  $\Delta/k_B$ , up to 400 K even though the complex involves only one Dy(III) ion as a spin carrier. The novel SMMs are suitable for fundamental studies of the magnetic relaxation processes such as a quantum tunneling, and the detailed investigation are on progress in the field of synthetic studies as well as theoretical and physical studies.