

## 極性1次元鎖Cu配位錯体の結晶設計

(東北大多元研) 高橋仁徳、星野哲久、武田貴志、芥川智行、 (北大電子研) 野呂真一郎、中村貴義、  
(山口大学理学研究科) 里見浩一郎、鈴木孝康、川俣純

## Crystal Design of Polar One-Dimensional Hydrogen-Bonded Copper Coordination Complexes

Kiyonori Takahashi, Norihisa Hoshino, Takashi Takeda, Koichiro Satomi, Yasutaka Suzuki, Shin-ichiro Noro, Takayoshi Nakamura, Jun Kawamata, and Tomoyuki Akutagawa,

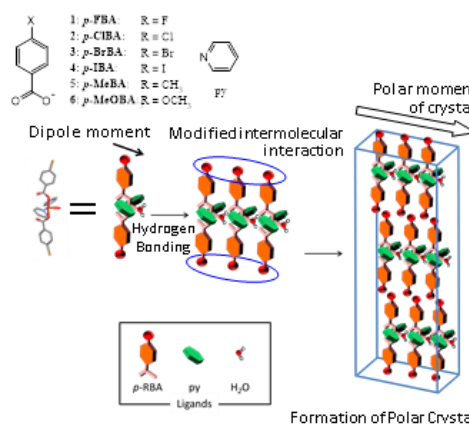


Figure 1. Design of polar arrangement in crystals

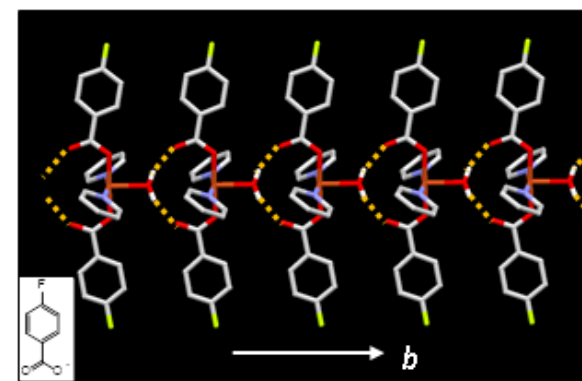


Figure 2. One-dimensional polar chain of Cu complex

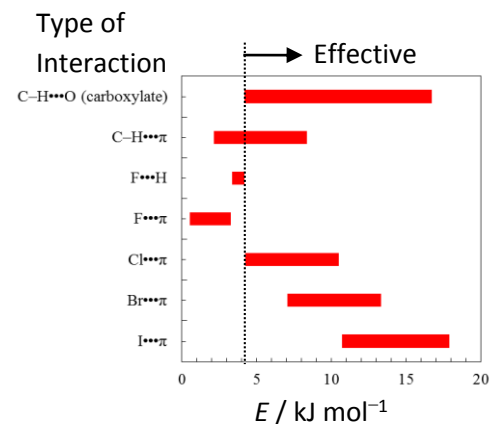


Figure 3. Estimated intermolecular interaction

第2次高調波を発生する極性結晶を、単核銅錯体の分子間相互作用の制御から実現した。水分子、ピリジン、パラ置換ベンゾアート配位子からなる銅錯体は、極性1次元鎖構造を形成し、それが分子間で配列する事で結晶構造が決定される。ベンゾアート配位子の置換基を塩素、臭素、ヨウ素およびメトキシ基に化学修飾する事で、鎖間の相互作用が設計可能となり、極性空間群を有する結晶構造が実現できる。

Polar crystals exhibiting second-order harmonic generation (SHG) were designed by adjusting the intermolecular interactions of mononuclear Cu(II) complexes in which one H<sub>2</sub>O, two pyridines (py), and two *p*-substituted benzoate (*p*-RBA) ligands (R = F, Cl, Br, I, CH<sub>3</sub>, and OCH<sub>3</sub>) were coordinated to a Cu(II) ion, forming a penta-coordinated asymmetric [Cu(II)(*p*-RBA)<sub>2</sub>(py)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] mononuclear structure with a permanent dipole moment along the direction of the Cu–OH<sub>2</sub> coordination axis.