

BEDT-BDT に基づくラジカルカチオン塩の構造と物性

(兵庫県大院物質理¹・東北大金研²・産総研³・理研⁴・東北大院理⁵) ○角屋 智史¹・杉浦 栞理²・田原 圭志朗¹・東野 寿樹³・久保 和也¹・佐々木 孝彦²・瀧宮 和男^{4,5}・山田 順一¹

Structures and physical properties of radical cation salts based on BEDT-BDT

(¹Graduate School of Material Science, University of Hyogo, ²Institute for Materials Research, Tohoku University, ³National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, ⁴RIKEN, ⁵Graduate School of Science and Faculty of Science, Tohoku University) ○Tomofumi Kadoya,¹ Shiori Sugiura,² Keishiro Tahara,¹ Toshiki Higashino,³ Kazuya Kubo,¹ Takahiko Sasaki,² Kazuo Takimiya,^{4,5} Jun-ichi Yamada¹

We have been developing molecular conductors composed of non-TTF type donor molecules used for organic transistors. Using a p-type semiconductor, BEDT-BDT, we have developed a two-dimensional radical-cationic Mott insulator θ -(BEDT-BDT)PF₆, and reported its structural and physical properties¹⁾. Since this material remains paramagnetic down to 2 K, there is a possibility that the ground state is a quantum spin liquid. In this presentation, we report the structural and physical properties of (BEDT-BDT)AsF₆ and (BEDT-BDT)ClO₄. The AsF₆ salt has the same structure as the PF₆ salt. Although the anions are disordered, the donor molecules form a θ -type arrangement. The temperature dependence of resistivity showed semiconducting behavior. No structural phase transition was observed down to 93 K. The Fermi surface calculated by the tight binding approximation is a cylinder at 270 K, but is significantly distorted at 93 K. This is because that the dihedral angles between BEDT-BDT molecules become wider due to the lattice shrinkage at low temperatures, resulting in a smaller transfer integral (t_1) along the stack direction. The details of the ClO₄ salt will be reported on the day.

Keywords : Mott insulator; radical-cation salt; molecular conductor; organic semiconductor

我々は有機トランジスタに使用される非 TTF 系ドナーを用いてラジカルカチオン塩の物質開発を進めている。これまでに BEDT-BDT というドナー分子を用いて、二次元モット絶縁体 θ -(BEDT-BDT)PF₆ を開発し、その構造と基礎物性を報告した¹⁾。この物質は 2 K まで常磁性であるので、基底状態は量子スピン液体の可能性がある。

本発表では新たに (BEDT-BDT)AsF₆ と (BEDT-BDT)ClO₄ の構造と物性を報告する。AsF₆ 塩は PF₆ 塩と同型構造である。アニオンはディスオーダーをしているが、ドナー分子は θ 配列を形成している (下図)。抵抗率の温度依存性は半導体的挙動を示した。

93 K まで構造相転移は観測されなかった。強束縛近似によって計算したフェルミ面は 270 K では閉じていたが、93 K では大きく歪む。これは、熱収縮によって分子間の二面角が広くなり、スタック方向のトランスファー積分 t_1 が小さくなることに由来する。ClO₄ 塩については当日報告する。

1) T. Kadoya *et al.*, *CrystEngComm*. **2020**, *22*, 5949.

