## BEDT-BDT の新しいセレン類縁体の合成と有機伝導体への応用

(兵庫県立大学理学部¹・兵庫県大院物質理²・東北大金研³・産総研⁴・理研⁵・東北大院理⁶) ○宍戸 雅治¹・角屋 智史²・杉浦 栞理³・田原 圭志朗²・東野 寿樹⁴・久保 和也²・佐々木 孝彦³・瀧宮 和男⁵ৣ6・山田 順一²

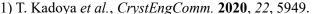
Synthesis of a new seleno-analog of BEDT-BDT and application to organic conductors (<sup>1</sup>School of Science, University of Hyogo, <sup>2</sup>Graduate School of Material Science, University of Hyogo, <sup>3</sup>Institute for Materials Research, Tohoku University, <sup>4</sup>National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, <sup>5</sup>RIKEN, <sup>6</sup>Graduate School of Science and Faculty of Science, Tohoku University) OMasaharu Shishido, <sup>1</sup> Tomofumi Kadoya, <sup>2</sup>Shiori Sugiura, <sup>3</sup>Keishiro Tahara, <sup>2</sup>Toshiki Higashino, <sup>4</sup>Kazuya Kubo, <sup>2</sup>Takahiko Sasaki, <sup>3</sup>Kazuo Takimiya, <sup>5,6</sup>Jun-ichi Yamada<sup>2</sup>

We have developed a two-dimensional Mott insulator  $\theta$ -(BEDT-BDT)PF<sub>6</sub> using a non-TTF donor molecule called BEDT-BDT, and reported its structural and physical properties. This salt has a possibility of a quantum spin liquid, but the antiferromagnetic interaction is very small (J = 7.5 K). Thus, we designed and synthesized a seleno-analog of BEDT-BDT with the aim of enhancing intermolecular interaction. Two consecutive reactions of compound 1 with n-BuLi and elemental sulfur followed by alkylating with 1-bromo-2-chloroethane gave compound 2. Conversion of chlorine atoms in 2 into iodine atoms by Finkelstein reaction using sodium iodide spontaneously underwent intramolecular cyclization to afford BEDT-BDS. A new molecular conductor (BEDT-BDS)PF<sub>6</sub> could be obtained from BEDT-BDS. The crystal structure is the same as that of (BEDT-BDT)PF<sub>6</sub>. The transfer integrals  $t_1$  and  $t_2$ , estimated by the ADF program, were -47 and 16 meV, respectively, and the intermolecular interaction ( $t_1$ ) along the stack direction was mainly enhanced. The tight-binding band calculation based on these values led to a quasi one-dimensional Fermi surface.

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

我々は BEDT-BDT という非 TTF ドナー分子を用いて、二次元モット絶縁体 $\theta$  (BEDT-BDT)PF6を開発し、その構造と基礎物性を報告した  $^{1}$ )。この物質はスピン液体の可能性があるが、反強磁性相互作用が J=7.5 K ととても小さい。そこで、分子間相互作用の向上を目指して、BEDT-BDT のセレン類縁体を設計・合成し、分子性導体の開発を行った。化合物 1 のリチオ化、および硫黄と  $Br(CH_2)_2Cl$  との反応により化合物 2 へ導いた。次いで、化合物 2 と NaI を用いてフィンケルシュタイン反応を行

うと、同時に分子内環化反応が起こり BEDT-BDS が得られた  $^{2}$ 。これを用いて、分子性導体(BEDT-BDS)PF6の作製に成功した。結晶構造は、先行研究の(BEDT-BDT)PF6 と同型構造であった。ADF プログラムによって見積もられた分子間トランスファー積分は、 $t_1=-47~\text{meV}$ 、 $t_2=16~\text{meV}$  であり、主にスタック方向の分子間相互作用が増加した。これらの値を用いて強束縛近似によるバンド計算を行った結果、擬 1 次元的なフェルミ面が導かれた。



2) C. Wang et al., J. Mater. Chem. C 2018, 6, 3604.

