

エチル基が置換した π 縮小型 TTP ドナーを用いた分子性導体の構造と物性

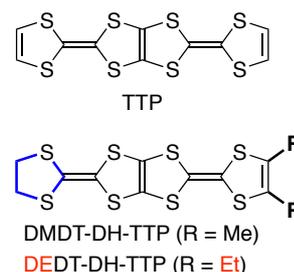
(愛媛大院理工¹・愛媛大 RU:PGeS, RU:OSC²・兵庫県立大院物質理³) ○鈴木 拳土¹・木下 直哉¹・白旗 崇^{1,2}・山田 順一³・御崎 洋二^{1,2}

Structural and physical properties of molecular conductors based on a π -reduced TTP derivative substituted with ethyl groups (¹Graduate School of Science and Engineering, Ehime University, ²Research Unit for Power Generation and Storage Materials, and Research Unit for Development of Organic Superconductors, Ehime University, ³Graduate School of Material Science, University of Hyogo) ○Kento Suzuki,¹ Naoya Kinoshita,¹ Takashi Shirahata,^{1,2} Jun-ichi Yamada,³ Yohji Misaki^{1,2}

In order to explore novel organic superconductors, we have successfully synthesized a π -electron donor with two ethyl groups DEDT-DH-TTP. The π -system of DEDT-DH-TTP is reduced by saturation of the C=C bond in one terminal 1,3-dithiole ring, compared to TTP. Here we report the structural and physical properties of (DEDT-DH-TTP)₂PF₆. The donor molecules are arranged in a β -type mode in the *ab* plane. This salt showed semiconducting behavior from room temperature.

Keywords : Molecular Conductor; Electron Donor; Crystal Structure; Band Calculation

2分子のTTFが融合したTTPは、低温まで安定した金属的ラジカルカチオン塩を多く与える¹⁾。我々は新規有機超伝導体を開発する為、 π 縮小型TTP系ドナーであるDMDT-DH-TTPを合成し、このドナーが低温まで安定した金属的ラジカルカチオン塩を与えることを明らかにしている²⁾。本研究ではバンド幅の減少による金属状態の不安定化を目指し、ジエチル基置換体DEDT-DH-TTPを合成し、ラジカルカチオン塩を作製したのでその構造と物性を報告する。



新規ドナーであるDEDT-DH-TTPはジメチル置換体DMDT-DH-TTPと同じ方法で合成した²⁾。電解酸化法により作製した(DEDT-DH-TTP)₂PF₆の電気伝導度を測定した。300 Kにおける伝導度は0.41 S cm⁻¹であり、室温から半導体的な伝導挙動を示し (Fig. 1a)、活性化エネルギーは31 meVである。X線結晶構造解析の結果、ドナー分子はhead-to-tail型で、*ab*面に伝導層を形成している。ドナー分子の配列はジメチル誘導体の塩と同様に β 型であり (Fig. 1b)、バンド計算では擬一次元的なフェルミ面が導かれた。当日は結晶構造、バンド計算について詳しく説明する。

1) Y. Misaki, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2009**, 2, 024301.

2) 鈴木拳土他、日本化学会第100春季年会、2D302 (2020).

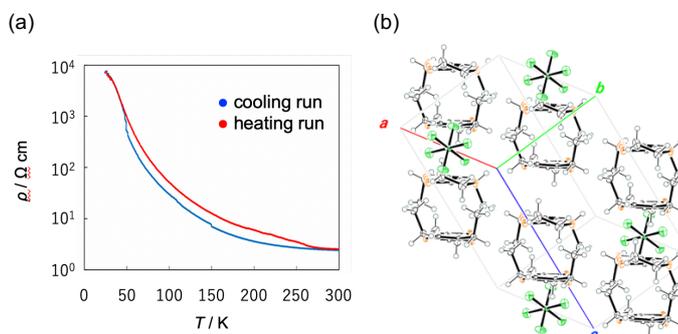


Fig. 1. (a) Temperature dependence of the resistivity of (DEDT-DH-TTP)₂PF₆, and (b) crystal structure of (DEDT-DH-TTP)₂PF₆ viewed along the donor long axis.