

フルオレン部位を含む DT-TTF 誘導体の合成および電荷移動塩の構造と物性

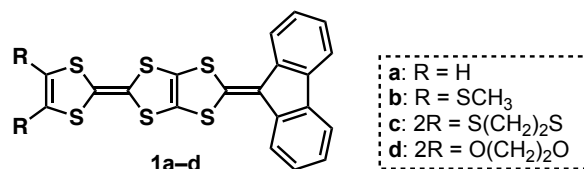
(愛媛大院理工¹・愛媛大工²・愛媛大 RU:OSC³・愛媛大 RU:PGeS⁴) ○藤崎 真広¹・王 彦²・白旗 崇^{1,3,4}・御崎 洋二^{1,3,4}

DT-TTF derivatives containing a fluorene moiety: synthesis and structural and physical properties of their charge-transfer salts (¹Graduate School of Science and Engineering, Ehime University, ²Faculty of Engineering, Ehime University, ³RU:OSC, Ehime University, ⁴RU:PGeS, Ehime University) ○Masahiro Fujisaki,¹ Yan Wang,² Takashi Shirahata,^{1,3,4} Yohji Misaki^{1,3,4}

We successfully synthesized novel DT-TTF derivatives **1a–d** containing fluorene moiety, where DT-TTF is tetrathiafulvalene condensed with a 2-methylidene-1,3-dithiole ring. The charge-transfer complexes were prepared by a mixed method in chlorobenzene using the new electron donor **1c** and 7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane (TCNQ), and black needle-like single crystals were obtained. The room temperature parallel conductivity ($\sigma_{\parallel} = 110 \text{ S cm}^{-1}$) is by 3 orders of magnitude larger than the perpendicular conductivity ($\sigma_{\perp} = 0.54 \text{ S cm}^{-1}$), indicating an anisotropic nature. We will discuss the details of the synthesis of **1a–d** and the structural and electrical properties of CT salts of **1c**.

Keywords : Molecular Conductor; Charge-Transfer Complex; Crystal Structure; Band Structure

テトラチアフルバレンに2-アルキリデン-1,3-ジチオール環を縮環した DT-TTF 誘導体を用いた分子性導体の多くは、低温まで金属的な挙動を示す事が知られている¹⁾。本研究ではバンド幅の制御による超伝導相の探索を目指し、DT-TTF 骨格のアルキリデン部位にかさ高いフルオレン部位を導入した新規電子供与体 **1a–d** を合成した。新規電子供与体 **1c** と 7,7,8,8-テトラシアノキノジメタン(TCNQ)を用いて、混合法により電荷移動錯体を作製したところ針状の単結晶を得た。X線結晶構造解析の結果、ドナー分子は *a* 軸方向に head-to-head で均一に積層してカラムを形成している (Fig. 1)。このカラムがフルオレン部位を逆向きにして *b* 軸に配列しており、*ab* 面に伝導層を形成している。この単結晶の室温伝導度は面内 110 S cm^{-1} 、面間 0.54 S cm^{-1} であった。当日は **1a–d** の合成および **1c** の電荷移動錯体の結晶構造、バンド構造、電気伝導性について詳しく説明する。



1) Y. Misaki, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2009**, 10, 024301.

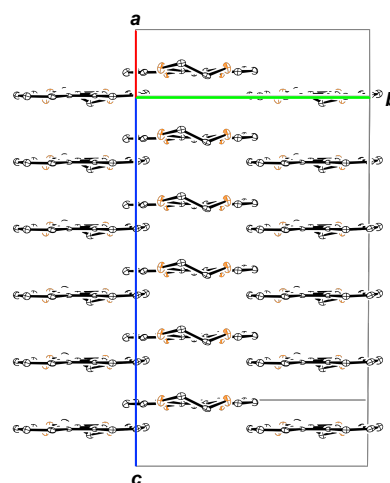


Fig. 1 Molecular arrangement of **1c** in the TCNQ complex viewed along the molecular long axis.