

β'' -(BEDT-TTF)₂(*rac*- and *S*-PROXYL-CONHCH₂SO₃)の低温 ESR 測定

(阪大院理¹) ○ 戸 広樹¹・河野晶子¹・戸あかね・中澤康浩¹

ESR measurements of β'' -(BEDT-TTF)₂(*rac*- and *S*-PROXYL-CONHCH₂SO₃) (¹*Graduate School of Science, Osaka University*) ○ Hiroki Akutsu,¹ Akiko Kohno,¹ Akane Akutsu-Sato, Yasuhiro Nakazawa¹

The structures and properties of the title salts were introduced on Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2019, at which we made a mistake in which *rac*-salt became a band insulator at 28 K. Actually, both racemic (28 K) and chiral (29 K) band structures have no significant difference and have Fermi surfaces, which will be reported. We have measured ESR spectra of both salts at Institute for Molecular Science, the results of which are also reported. A doublet-like complicated signal was observed at the lowest temperature (3.75 K), which is probably originated from a spin dimer ($O\cdots O = 4.276(3)$ Å for *S*-salt) of the PROXYL radicals for each salt.

Keywords : Organic Conductors; Organic Magnetic Materials; BEDT-TTF; Chiral Conductors; Polar Conductors

一昨年の分子科学討論会で表題化合物の構造と物性について報告した。*S*-体とラセミ体での低温（それぞれ 29 K と 28 K）でのバンド計算の結果に差があり、ラセミ体はバンド絶縁体になると報告したが間違いであって、どちらも Fermi 面を有し、ほぼ同じバンド構造であることがわかったので報告する¹⁾。また分子科学研究所にて ESR 測定を行ったので、その結果を報告する。両塩とも室温では一本のピークしか見えないが、*S* 体で 35 K、ラセミ体で 25 K 以下に冷やすと肩に別のピークがはっきり現れ、最低温 3.75 K ではダブルットがメインと思われる複雑なピークが観測された（図 1）。*S* 体の方がより複雑で、ダブルットと思われるピークがよりはっきり見られた。結晶構造におけるラジカル間の相互作用は、*S* 体では $O\cdots O = 4.276(3)$ Å (29 K)、ラセミ体では $O\cdots O = 4.429(5)$ Å (28 K) と *S* 体の方がラセミ体より約 0.15 Å 短いスピン中心同士の接触がある。ラジカル間の相互作用が *S* 体の方が大きいため *S* 体の方がダブルットがはっきり見えたのではないかと考えている。

1) H. Akutsu, A. Kohno, S. S. Turner, S. Yamashita, and Y. Nakazawa, *Mat. Adv.* **2020**, *1*, 3171.

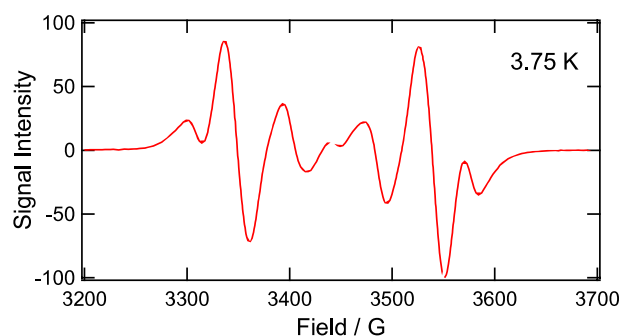
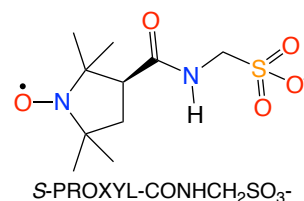


図 1. 3.75 K での *S*-体の ESR シグナル。a 軸回転で、磁場 // *b* 軸から 100°で測定。