

新規有機伝導体 β'' -(BEDT-TTF) $_2$ XC $_2$ H $_4$ SO $_3$ (X = Cl, Br)における Dope - Non-dope 転移

(阪大院理) ○ 坪 広樹・中澤 康浩

Dope – Non-dope transitions of new organic conductors, β'' -(BEDT-TTF) $_2$ XC $_2$ H $_4$ SO $_3$ (X = Cl, Br) (Graduate School of Science, Osaka University) ○ Hiroki Akutsu, Yasuhiro Nakazawa

The title new organic conductors show novel Doped – Non-doped transitions, which we report here. The Cl salt is a non-doped salt at room temperature. At 210 K a structural phase transition was observed, below which the salt was in the interlayer charge disproportionation state, namely the donor layers were doped by tilts of dipole moments of the anions. The Br salt, which is isostructural to the low temperature phase of the Cl salt and therefore which appears to be doped, becomes non-doped after applying 1 kbar of static pressure.

Keywords : Organic Conductors; BEDT-TTF; Dope; Interlayer Charge Disproportionation; Metal-Insulator Transition

我々是对イオン層の分極による特異な電子構造を持つ有機伝導体を報告して来た。今回は β'' -(ET) $_2$ ClC $_2$ H $_4$ SO $_3$ (**1**) を報告する。抵抗率(図 1)に降温 210 K、昇温 260 K で跳びがある。室温の結晶構造($P2_1/m$)では、ET 1 分子と鏡面に位置した ClC $_2$ H $_4$ SO $_3^-$ の半分が結晶学的に独立で、-SO $_3^-$ 基は回転 disorder している。低温相($P\bar{1}$)では鏡面が無くなってアニオン 1 分子が独立になり、-SO $_3^-$ 基は order していた。アニオンの双極子モーメント μ は 6.9 D であり、元の鏡面からの傾き(θ)は 9°であり伝導面垂直方向に分極成分が現れ、ドナー A 層はマイナス側に B 層はプラス側に囲まれていた。分極を電位(E_c)に直すと 0.45 eV となり、-0.45 V が A 層に、+0.45 V が B 層にかかっていることになり、A 層から B 層に電子が移るはずである。実際、100 K での ET の価数を結合距離から計算すると、A : +0.36、B : +0.64 価であり、予想通り電子移動、層間電荷分離、部分ドーピングが示唆され、温度による非ドーピング – ドーピング転移が起きたと言える。

β'' - β'' -(ET) $_2$ BrC $_2$ H $_4$ SO $_3$ (**2**) は以前報告していて、70 K で金属-絶縁体転移を示す。室温の構造が **1** の低温相と同形で、この塩でも層間電荷分離が期待される。 $\mu = 9.9$ D、 $\theta = 5.5^\circ$ 、 $E_c = 0.35$ eV であった。しかし、150 K での ET の価数は A : +0.492、B : +0.508 価であり、0.008 価のドーピングがあると計算されるが、この経験式の誤差が ± 0.1 よりドーピングは無いと言える。ところが、抵抗率(図 1)を見ると、絶縁化後 4.2 K までに 12 倍しか抵抗が増加せず、ドーピングの存在が示唆された。この塩に 1 kbar の静水圧を印加すると、転移温度が 10 K ほど上昇し、抵抗上昇は 1.1 万倍になり、ドーピングがなくなったと言え、圧力誘起のドーピング – 非ドーピング転移が起こったことが示唆された。圧力によりアニオンの傾きが無くなったためと考えている。当日は磁化率の結果も報告する。

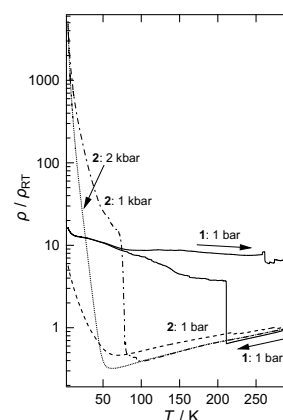


図 1. **1** および **2** の抵抗率