

低温構造

理化学研究所，科学技術振興機構

中尾朗子，加藤礼三

70K Phase Transition in Et₂Me₂Sb[Pd(dmit)₂]₂ (3) : Low-temperature crystal structure

RIKEN, JST-CREST

Akiko NAKAO, Reizo KATO

Pd(dmit)₂ アニオンラジカル塩は，種々の対カチオンで多様な物性を示すことは知られているが，Me₂Et₂Sbを対カチオンとするEt₂Me₂Sb[Pd(dmit)₂]₂において，常圧下で70K付近に非常に興味深い一次相転移が起こることが，伝導度および磁気測定等より明らかとなった。本講演では，X線回折法による低温相の結晶構造解析の結果について報告する。

Et₂Me₂Sb[Pd(dmit)₂]₂は，Pd(dmit)₂アニオンの2量体から成る2次元伝導層をもち，2量体は準三角格子を形成している。室温では，空間群C2/cに属し，単位格子は結晶学的に等価な2量体が形成する2つの伝導層を含む。今回明らかとなった低温構造では，b軸が約2倍となり単純格子を取る。結晶学的データ：空間群 P2₁/c, a=14.5400(9), b=12.6660(8), c=37.230(2) Å, β=98.119(4)°, V=6787.7(7) Å³, Z=8. 単位格子は結晶学的に独立な2つの2量体を含み，これら2量体における分子面間距離に顕著な違いが見られた (Fig. 1)。これは，低温相で電荷分離 (2[Dimer]⁻ → [Dimer]⁰ + [Dimer]²⁻) が起こっていることを示唆する。

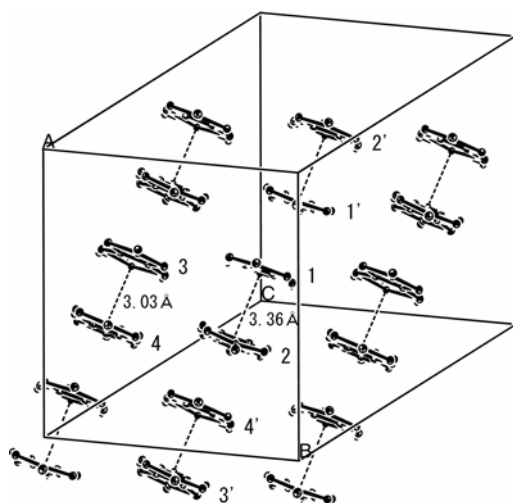


Fig. 1 End-on projection of the conduction layers showing the intra-dimers. The distances are 3.36 and 3.30Å, respectively. (The value at room temperature is 3.20Å.)