

超分子アニオンラジカル塩(Me-3,5-DIP)[Ni(dmit)₂]₂

(Me-3,5-DIP = *N*-Methyl-3,5-diiodopyridinium) の電気お

よび磁気物性

(埼玉大理・理研・科学技術振興機構・高エネルギー加速器研究機構) 高坂洋介・山本浩史・中尾朗子・田村雅史・加藤礼三

Electric and magnetic properties of a supramolecular anion radical salt (Me-3,5-DIP)[Ni(dmit)₂]₂ (Me-3,5-DIP = *N*-methyl-3,5-diiodopyridinium) (Saitama University; Faculty of Science; Department of Chemistry, RIKEN, JST-CREST, KEK) KOSAKA, Yosuke; YAMAMOTO, Hiroshi M.; NAKAO, Akiko; TAMURA, Masafumi; KATO, Reizo

α -(Me-3,5-DIP)[Ni(dmit)₂]₂ は、カチオン(Me-3,5-DIP)⁺上のヨウ素と Ni(dmit)₂ アニオン分子末端のチオケトンとの間に超分子 I...S 相互作用を有するアニオンラジカル塩である。¹ 単位格子は4つの伝導層を含み、このうちの2層(I, II)が結晶学的に独立である (Fig. 1)。Layer I では、Ni(dmit)₂ アニオンは強く二量化しており、二量体間の各重なり積分は二量体内(23.4×10⁻³)に比べ、いずれも2桁ほど小さい。一方、Layer II でのアニオン配列は spanning overlap 様式である。強束縛近似に基づくバンド計算は、Layer I が Mott 絶縁状態、Layer II が二次元金属的な状態にあることを示唆している。

電気抵抗率は、*a* 軸方向では室温からヘリウム温度まで金属的に振舞った。また、*b* 軸方向の電気抵抗率は140 Kと75 Kに各々ゆるやかな極小と極大を持つ挙動であった。一方、磁化率は、室温付近で約 1.3×10⁻³ emu mol⁻¹、温度依存性は20 K 付近まで Curie-Weiss 的であった。これらの結果は、この塩が構造から予想された通り、1つの結晶中に伝導電子と局在スピンを持ち、しかもそれらがいずれも Ni(dmit)₂ アニオンに由来していることを示している。Layer I が Mott 状態となっていることは、アニオン層間方向(*c* 軸方向)の電気抵抗率が *a*、*b* 軸方向の電気抵抗率に対して全温度領域で2桁以上大きいことから示唆される。

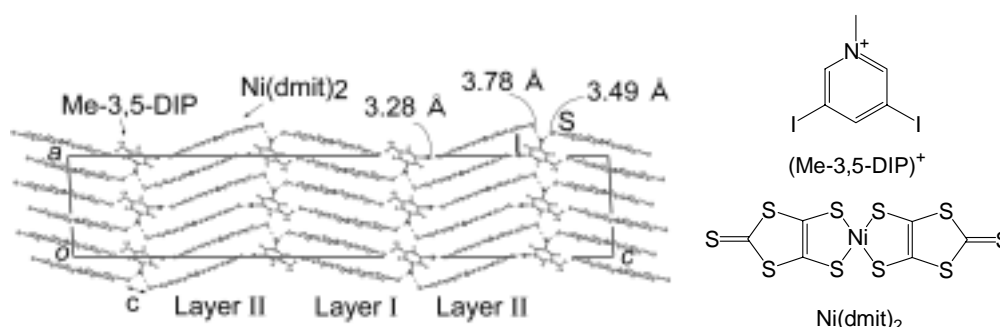


Fig. 1 Crystal structure of α -(Me-3,5-DIP)[Ni(dmit)₂]₂: Monoclinic, *C*2/*c*, *a* = 14.3480(6), *b* = 6.4710(3), *c* = 76.556(3) Å, β = 92.989(3)°, *V* = 7098.24 Å³, *Z* = 8, *R* = 0.0635.

1) 分子構造総合討論会 2005 (東京) 2E-04.