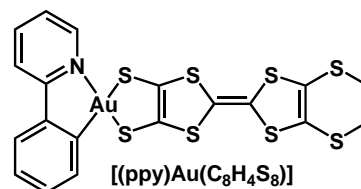


非対称型金-ジチオレン錯体を構成分子とする分子性導体の伝導挙動と電子状態

(理研・科学技術振興機構・高エネルギー加速器研究機構・分子研・阪大院工) ○久保和也・中尾朗子・石井康之・山本貴・田村雅史・加藤礼三・薬師久彌・松林玄悦

Electrical property and electronic state of molecular conductor based on unsymmetrical Au-dithiolene complex (RIKEN, JST-CREST, KEK, IMS, Graduate School of Engineering, Osaka Univ.) KUBO, Kazuya; Nakao, Akiko; ISHII, Yasuyuki; YAMAMOTO, Takashi; TAMURA, Masafumi; KATO, Reizo; YAKUSHI, Kyuya; MATSUBAYASHI, Gen-etsu

【序】以前我々は、炭素-金属間 σ 結合を有する非対称型金-ジチオレン錯体を構成分子とする分子性導体、 $[(ppy)Au(C_8H_4S_8)]_2[PF_6]$ (**1**) が、圧力下で金属伝導を示すことを報告した。¹ 今回新たに、常圧下における電子状態を明らかにしたので報告する。



【結果と考察】拡張ヒュッケル法によるバンド計算を行った結果、**1** は擬一次元的なフェルミ面をもつ。よって**1** は、常圧で金属伝導を示すと予想されたが、実際は室温抵抗率 $\rho_{r.t.} = 2.6 \Omega \text{ cm}$ 、活性化エネルギー $E_a = 0.03 \text{ eV}$ の半導体であった。電荷密度波の生成を示す超格子は観測されていない。ラマンスペクトル測定では、ジチオレン配位子側の二重結合に起因するピーク(1520, 1490, 1460 cm^{-1})が見られ、これらのピーク位置は300 K から 10 K まで変化しない。また結晶の積層方向に測定した赤外スペクトルでは、1100 cm^{-1} に e-mv 相互作用が見られた。これらスペクトル測定の結果から、形式電荷が+0.5 であるドナー分子の二量体がカラム構造を形成し、擬一次元的な伝導経路を構築していることがわかった。また、室温磁化率は $5.1 \times 10^{-4} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ であり、50 K 付近から 12 K にかけて、磁化率が $4.0 \times 10^{-4} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ から $2.8 \times 10^{-4} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ に変化する反強磁性転移が見られた。以上の結果から**1** の基底状態は、金属-絶縁体近傍に位置する反強磁性モット絶縁体であることが分かった。

1, K.Kubo *et al.* *Synth. Met.* **2005**, *153*, 425-428.