

## 分子・物質合成プラットフォームにおける利用成果

## 単一分子性伝導体の開発

a 日本大学文理学部化学科

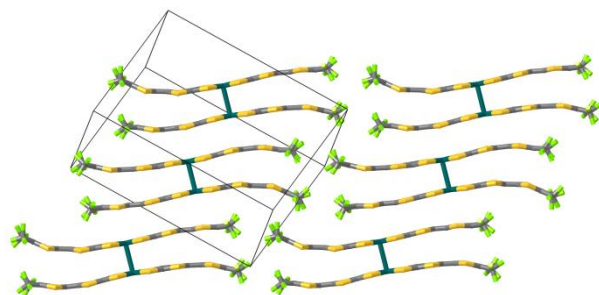
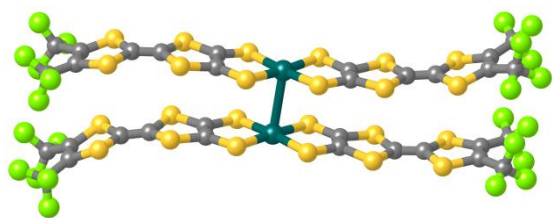
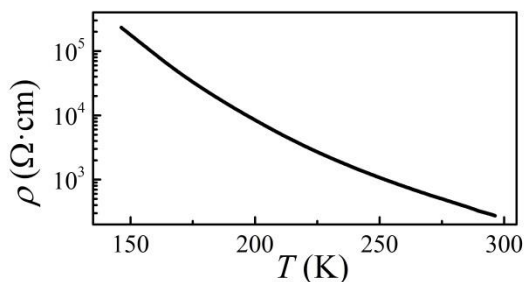
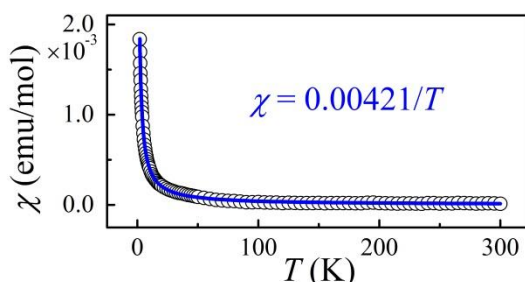
周 彪<sup>a</sup>

## 【目 的】

本研究では、新規な単一分子性伝導体・超伝導体の開発を目指している。単一分子性伝導体の中心金属の違いにより電子物性が大きく異なる特徴がある。初めての単一分子性超伝導体[Ni(hfdt)<sub>2</sub>]を手本として、中心金属としてNiの同族元素であるPd、Ptの単一分子性伝導体[M(hfdt)<sub>2</sub>]の単結晶を作成し、伝導度、磁化率、ESRなどの物性測定や電子状態を検討することを目的とする。

## 【成 果】

本年度は、[Pd(hfdt)<sub>2</sub>]の単結晶を新たに作成し、構造解析、バンド計算、電気伝導度と磁化率などの物性測定を行なった。電解酸化することにより、約50μmの[Pd(hfdt)<sub>2</sub>]単結晶を得ることができた。単結晶X線構造解析より、[Pd(hfdt)<sub>2</sub>]は[Ni(hfdt)<sub>2</sub>]とは異なる形であることが判明した。Fig. 1に示すように、Pd(hfdt)<sub>2</sub>分子同士がPd-Pd結合によって二量体構造をとることがわかった。Pd-Pd結合距離は3.06Åであり、中心金属のPd(II)が部分酸化されになったことより、金属結合が形成されたと考えられる。また、[Ni(hfdt)<sub>2</sub>]と同様に、[Pd(hfdt)<sub>2</sub>]は配位子末端のCF<sub>3</sub>基によって強く分離され、二次元的な層状構造を形成していることを見出した。[Pd(hfdt)<sub>2</sub>]粉末試料の室温電気伝導度は $3.7 \times 10^{-3} \text{ S/cm}$ であり、半導体的な温度変化を示し、その活性化エネルギーは0.16eVであることが明らかとなった(Fig. 2)。バンド計算の結果からも[Pd(hfdt)<sub>2</sub>]は半導体であることが示唆された。分子科学研究所で磁化率測定を行った。[Pd(hfdt)<sub>2</sub>]の磁化率は約1%近い磁性不純物( $S=1/2$ )をのぞくと室温磁化率はほぼゼロになり、強い二量体構造により、バンドギャップを持つ非磁性状態になったと予想される(Fig. 3)。

Fig. 1 [Pd(hfdt)<sub>2</sub>]の分子と結晶構造Fig. 2 [Pd(hfdt)<sub>2</sub>]の電気伝導度Fig. 3 [Pd(hfdt)<sub>2</sub>]の磁化率