

Figure 1. (a) Donor sheet structure of $(\text{BTM-TS-TTP})_4\text{PF}_6$ viewed along molecular long axis, and (b) stacking structure in the stack. The calculated overlap integrals are $p_1 = 24.3$, $p_2 = 35.5$, $p_3 = 27.5$, $q_1 = -5.5$, $q_2 = 0.8$, $q_3 = 0.4$, $q_4 = -9.6$, $q_5 = 2.9 \times 10^{-3}$.

結果によると積層内ではある程度四量化しており ($S = 24.3\text{-}35.5 \times 10^{-3}$), もっとも大きな side-by-side 相互作用 ($S = -9.6 \times 10^{-3}$) は積層内の相互作用の 25-40%であった。この結果を基にバンド計算を行ったところ, 二次元的な閉じたフェルミ面を有することが示唆された。

この塩の単結晶における伝導度測定を四端子法により検討したところ, 室温において 60 S cm^{-1} の高伝導性を示した。電気抵抗の温度依存性を調べたところ, 5 K まで金属的な伝導挙動を示した (Figure 4)。また, 室温と 5 K での抵抗の比は 880 と非常に大きな温度依存性を示すことが明らかとなった。

【謝辞】 Rigaku AFC-8 MERCURY CCD を用いた X 線結晶構造解析でお世話いただいた分子科学研究所の高橋一志博士 (現東大物性研), 小林速男教授に深く感謝致します。

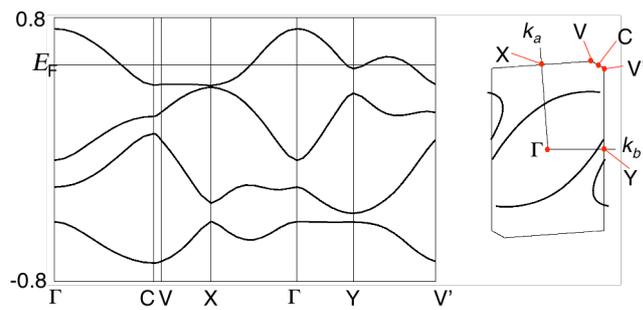


Figure 3. Calculated energy dispersion and Fermi surface of $(\text{BTM-TS-TTP})_4\text{PF}_6$.

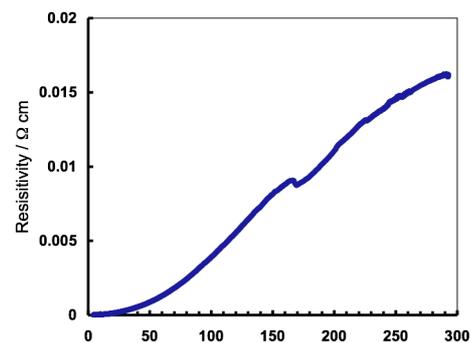


Figure 4. Conducting behavior of $(\text{BTM-TS-TTP})_4\text{PF}_6$.

[1] 野田, 御崎, 田中, 分子構造総合討論会 2004, P026; 辻, 保田, 藤原, 杉本, 藤原, 青沼, 御崎, 分子構造総合討論会 2006, 2P014.