



電解法により得られたラジカルカチオン塩のうち、**2b** の  $\text{SbF}_6$  塩( $(\mathbf{2b})\text{SbF}_6(\text{PhCl})_{0.5}$ )の X 線結晶構造解析に成功した。ドナーとアニオンの比は 1:1 であり、結晶学的にドナー 2 分子、アニオン 2 分子が独立した構造をとっていた。ドナー分子は b 軸方向に積層し、ドナーカラム間にはアニオンとクロロベンゼンが存在するためにドナー分子間の side-by-side 相互作用は阻害されている。さらに、ドナー分子長軸方向にはドナー分子が横にずれているために相互作用を持たないため、この塩は一次元的な電子構造を有していると考えられる。カラム内には 3 種の重なり b1、b2、b3 が存在し、面間距離はそれぞれ 3.38、3.48、3.42 であった。カラム内における重なり積分の計算値は、 $b1 = -6.24 \times 10^{-3}$ 、 $b2 = 4.17 \times 10^{-3}$ 、 $b3 = -5.58 \times 10^{-3}$  であり、ドナー分子は積層内で弱く四量化していることが示唆された。

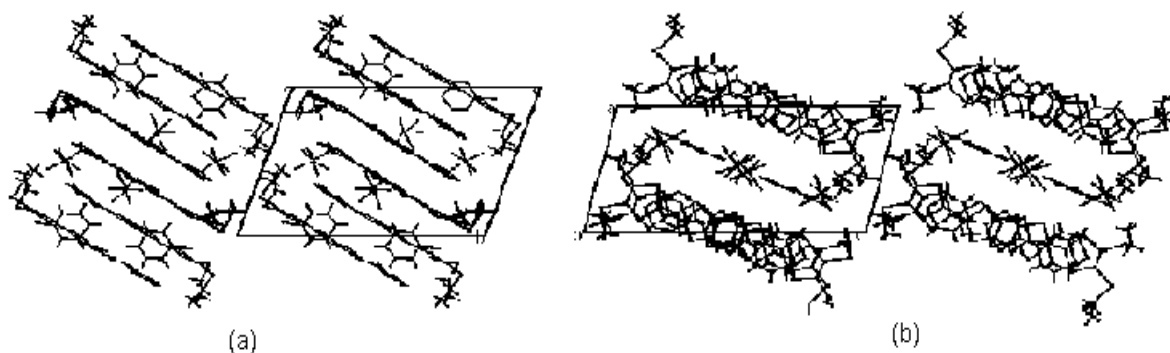


Figure 1 Crystal structures of  $(\mathbf{2b})\text{SbF}_6(\text{PhCl})_{0.5}$

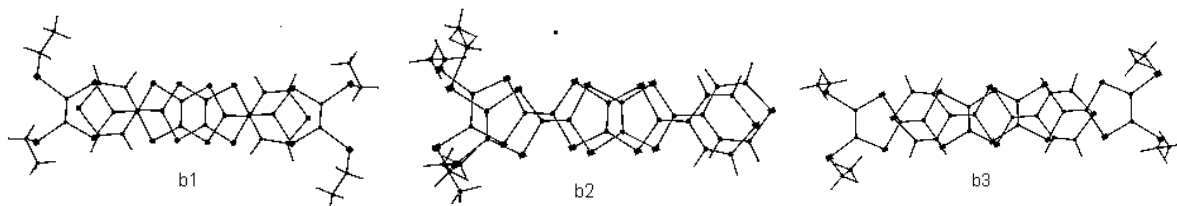


Figure 2 The overlap modes of  $(\mathbf{2b})\text{SbF}_6(\text{PhCl})_{0.5}$

**2b** の  $\text{ClO}_4$  塩、 $\text{AsF}_6$  塩、 $\text{SbF}_6$  塩の伝導度を四端子法により測定した。その結果を Table 2 に示す。これらの塩はそれぞれ  $2.2 - 9.3 \times 10^{-3} \text{ Scm}^{-1}$  の伝導性を有し、いずれも半導体的な挙動を示した。活性化エネルギーは **2b** の  $\text{AsF}_6$  塩で 0.13 eV、 $\text{ClO}_4$  塩、 $\text{SbF}_6$  塩で約 0.5 eV となった。

Table 2 Electrical properties of  $(\mathbf{2b})(\text{Anion})$

Anion	D : A <sup>a</sup>	$\sigma_{IT}/\text{Scm}^{-1}$	Ea/eV
$\text{ClO}_4$	-	$2.2 \times 10^{-3}$	0.46
$\text{AsF}_6$	1 : 1	$4.1 \times 10^{-3}$	0.13
$\text{SbF}_6$	1 : 1( $\text{PhCl}$ ) <sub>0.5</sub>	$9.3 \times 10^{-3}$	0.52

<sup>a</sup>Determined based on the X-ray crystal structure analysis

## 【謝辞】

X 線構造解析でお世話いただいた分子科学研究所の崔亨波博士、高橋一志博士、小林速男教授に深く感謝致します。