

## 「フレキシブル熱電素子を志向した分子性導体の開発」

兵庫県立大学大学院物質理学研究科機能性物質学Ⅱ講座

助教 角屋智史

(2022年4月1日より甲南大学理工学部機能分子化学科に異動しました)

**【序論】**有機伝導体は、超伝導や強磁性、強誘電といったデバイス素子への応用が期待される多彩な電子状態を示す。最も多くの物質が報告されているのは有機ドナーと無機アニオンを組み合わせから構成されるラジカルカチオン塩である。その物理的性質は有機ドナーの電子状態に依存する。これまでにTTFやTTP及びその誘導体が頻繁に利用されてきたが、それ以外の有望な電子供与体は報告されていない。従来の分子骨格とは異なる電子供与体を利用すれば、今までにない機能性を持つ有機伝導体の開発が期待される。特に申請者は、ベンゾチオフェン骨格から構成される有機伝導体が優れた熱電特性を示すことを報告してきた。本研究では輸送特性を強化するための分子間相互作用の向上を目指して、BEDT-BDTのセレン類縁体であるBEDT-BDSを設計・合成し、分子性導体の開発を行った。

**【結果】**化合物1のリチオ化、および硫黄と $\text{Br}(\text{CH}_2)_2\text{Cl}$ との反応により化合物2へ導いた。次いで、化合物2とNaIを用いてフィンケルシュタイン反応を行うと、同時に分子内環化反応が起こりBEDT-BDSが得られた<sup>2)</sup>。これを用いて、分子性導体(BEDT-BDS) $\text{PF}_6$ の作製に成功した。BEDT-BDS及び(BEDT-BDS) $\text{PF}_6$ の結晶構造は先行研究のBEDT-BDT、(BEDT-BDT) $\text{PF}_6$ と同型構造であった。またサイクリックボルタモグラム及び吸光度測定により見積もられたBEDT-BDSのエネルギーレベルはBEDT-BDTと同程度であった。ADFプログラムによって見積もられた(BEDT-BDS) $\text{PF}_6$ の分子間トランスファー積分は、 $t_1 = -47 \text{ meV}$ 、 $t_2 = 16 \text{ meV}$ であり、主にスタック方向の分子間相互作用が増加した。バンド幅は316 meVとなり、わずかに増加した。強束縛近似によるバンド計算を行った結果、擬1次元的なフェルミ面が導かれた。これは分子の屈曲度合いにより、分子間相互作用が変化したためと解釈できる。

