



カーボンナノリング分子の構造相転移の観察

尾崎 仁亮、坂本 裕俊、伊丹 健一郎

名古屋大学 大学院理学研究科 ERATO 伊丹分子ナノカーボンプロジェクト

1. 背景と研究目的

シクロパラフェニレン(CPP)は複数のベンゼン環がパラ位でつながった環状分子であり、カーボンナノリングとも呼ばれる。径の異なる CPP、および、様々な官能基が導入された CPP を選択的に合成することができ、新たなナノカーボン物質として注目されている。CPP は本質的に中空をもつ構造であり、その空間に他の化学種を取り込めることに我々は着目し、これらを活性炭やカーボンナノチューブに続く全く新しいクラスの多孔性炭素材料としての応用展開を試みている。

本研究では、さまざまな径の CPP にヨウ素を導入した構造体を合成した。単結晶試料を用いた構造解析により、これらの試料中で CPP の中空空間中にヨウ素が I_2 分子の形で存在しており、その配列が径によって異なるということがわかっている。さらに、このヨウ素内包 CPP に電場を印加すると、CPP 中でヨウ素鎖が形成され、導電性が向上する現象が観測されている。このメカニズムを解明するために、温度を掃引しながら XRD パターンを測定した。

2. 実験内容

用いたサンプルは[10]CPP にヨウ素を導入したもの（以後、[10]CPP-I と表す。）であり、これは [10]CPP およびヨウ素のジクロロメタン溶液を空气中で乾燥することにより得られた。これらを内径 0.5 mm の石英ガラスキャピラリーに 2~3 mm 充填し、特注治具を用いて真空引きしてから XRD パターンの測定を行った。また、温度掃引は、窒素吹付けにより行った。

3. 結果および考察

試料の冷却により、格子の収縮によるピークのシフトが観測されたが、 $hkl=200$ ではほとんどピークがシフトしておらず、 a 軸方向には零熱膨張の挙動を示すことがわかった。また、 $2\theta \sim 17.5^\circ$ では、室温では観測されていなかったピークが 190 K 以下では出現しており、微小ではあるものの、構造の変化が示唆された。このような挙動は、[10]CPP-I の構造がゆらぎやすく、刺激への応答性を有することと一貫性がある。

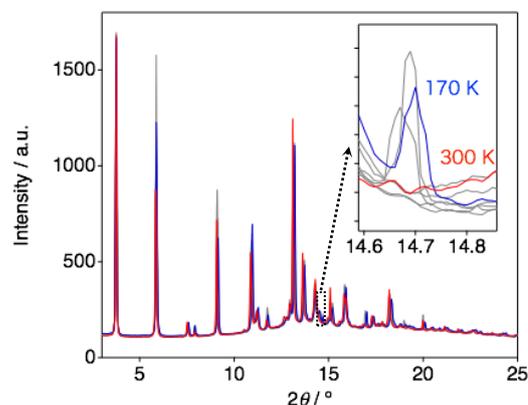


図 1. [10]CPP-I の XRD パターンの温度依存性. (inset: $14.6^\circ \sim 14.8^\circ$ の拡大図)

4. 参考文献

1. "Cycloparaphenylene as a molecular porous carbon solid with uniform pores exhibiting adsorption-induced softness"^[1] H. Sakamoto, T. Fujimori, X. Li, K. Kaneko, K. Kan, N. Ozaki, Y. Hijikata, S. Irle, K. Itami *Chem. Sci.*, **7**, 4204(2016).