



カーボンナノリング分子の構造相転移の観察

尾崎 仁亮¹、坂本 裕俊¹、伊丹 健一郎¹

¹ 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。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、これらの新しい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。ヨウ素内包 CPP に電場を印加すると、導電性が向上する現象が見えており、このメカニズムを解明するために、導電性の変化と構造相転移と対応するか解明する必要がある。そのため、本実験では、キャピラリ内のサンプルに電圧をかけながら、粉末 XRD パターンの測定手法の開発を目的とした。

2. 実験内容

用いたサンプルは[10]CPP および[12]CPP にヨウ素を導入したもの（以後、[10]CPP \supset I₂ および [12]CPP \supset I₂ と表す。）であり、これは溶媒中で[10]CPP および[12]CPP とヨウ素を混合することによって固体として析出する。これらを内径 0.5 mm の石英ガラスキャピラリの間位置に 2~3 mm 充填し、両サイドから真鍮棒を触れさせた状態で、特注のアタッチメントで固定し、回折計にマウントした。真鍮棒からはワニ口クリップにより直流電源に接続し、電圧を印加しながら、回折測定を行った（室温、X 線波長 1.0 Å、検出器:4 連装 PILATUS）。

3. 結果および考察

キャピラリ内に充填した[10]CPP \supset I₂ および [12]CPP \supset I₂ に電圧を印加すると、導電性が変化することを事前に確認していた。今回作製したアタッチメントを用いて測定を行うと、真鍮電極からの回折および蛍光 X 線が見られたが、目的のサンプルの回折をわずかに認めることができた。さらに、今実験においては電圧を印加したあとの [10]CPP \supset I₂ および [12]CPP \supset I₂ を電極セルから取り出して回折測定を行ったところ、印加前の [10]CPP \supset I₂ および [12]CPP \supset I₂ は異なる回折パターンを示した。電圧によって温度変化と同様の構造転移が誘起されることを明らかにした。電圧印加用のキャピラリアタッチメントの設計への重要な示唆が得られた。

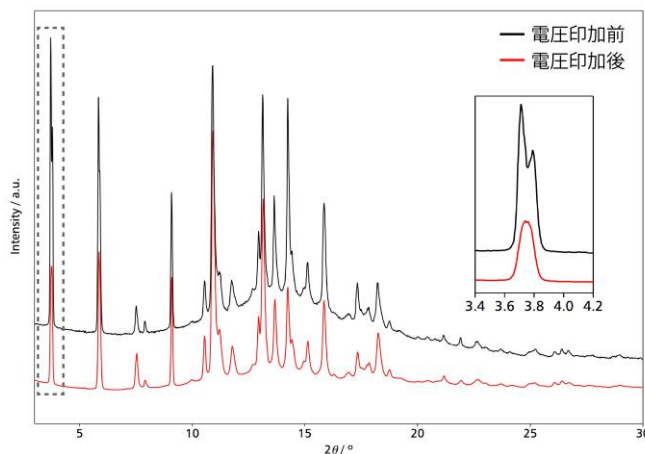


Fig.1 電圧印加前後の [10]CPP \supset I₂ の XRD パターン

4. 参考文献

1. "Cycloparaphenylene as a molecular porous carbon solid with uniform pores exhibiting adsorption-induced softness" H. Sakamoto, T. Fujimori, X.-l. Li, K. Kaneko, K. Kan, N. Ozaki, Y. Hijikata, S. Irle, K. Itami *Chem. Sci.*, **2016**, Advance Article (DOI: 10.1039/C6SC00092D).