



## カーボンナノベルト直径の温度依存性

坂本 裕俊・尾崎 仁亮・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

キーワード：カーボンナノベルト、シクロパラフェニレン、分子ナノカーボン、負熱膨張

### 1. 背景と研究目的

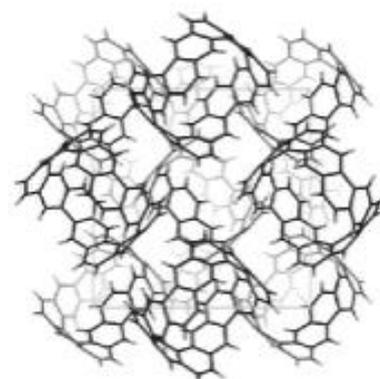
有機化合物を基にした材料・デバイス開発において、その耐久性は重要な要素である。それらの機械的な破損の原因の一つとして、温度変化による度重なる膨張と収縮や、急な温度変化(熱衝撃)がある。これを克服するため、温度変化に対して、ほとんど体積変化を示さないという性質(ゼロ熱膨張)が注目されている。ゼロ熱膨張材料の作製は、通常の熱膨張材料と、昇温により可逆的に収縮する負熱膨張材料を混合することにより得られるため、有機材料と親和性が高い、有機物を用いた負熱膨張材料の開発が必要である。負熱膨張挙動は多孔性の材料にしばしば見られる性質で、本研究では、カーボンナノベルトであるイソシクロフェナセン(ICP)に注目し。単結晶構造解析により、その直径が温度上昇によって減少することを見出している。本課題においては、このカーボンナノベルト直径の熱縮小現象の高精度データの取得を目的とした。

### 2. 実験内容

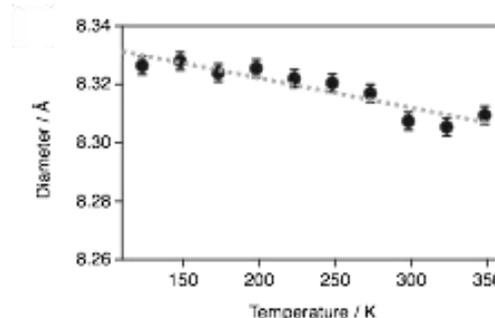
単結晶試料は[12]ICP<sup>1</sup>をTHF中で再結晶させることにより得た。これをミネラルオイル中で単結晶マウント用ループにすくい、固定した。X線波長は1.12 Å、検出器はQ315rを利用し、95 Kおよび298 Kで回折測定を行った。1 イメージにおける結晶振動角は1°、照射時間は10 secで行った。

### 3. 結果および考察

95 K、および298 Kで得られた[12]ICP単結晶の回折データのindexingを行ったところ、既報<sup>1</sup>の立方晶系の格子 (Fig 1上) であることがわかった。格子定数は、95 Kのものより298 Kのものの方が大きく、正の熱膨張挙動をとっていることが明らかとなった。しかしながら、[12]ICP一分子のレベルでの詳細な構造を得るには至らず、これまでに実験室装置で得られていた、この環状分子径の負熱膨張挙動 (Fig 1下) をとるかどうかを明らかにするには、より高解像度の回折測定が必要であると考えられる。



[12]ICPP-c>THF



### 4. 参考文献

1. Povie, G.; Segawa, Y.; Nishihara, T.; Miyauchi, Y.; Itami, K., Synthesis of a carbon nanobelt. *Science* **2017**, 356 (6334), 172-175.1.

Fig.1 [12]ICPの立方晶系の結晶構造、および、その直径の温度依存性