



一次元自己集積化した超分子ゲルの構造解析

加藤健太¹・坂本 裕俊²・Shim Jooyoung²・伊丹 健一郎^{1,2}

¹ 名古屋大学 大学院理学研究科 物質理学専攻

² 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：ワープトナノグラフェン、ゲル、分子ナノカーボン、超分子集合体

1. 背景と研究目的

近年、低分子化合物が非共有結合的に連結・集合した、「超分子ポリマー」や「超分子集合体」と呼ばれる物質群が新たな擬高分子材料として注目を集めている。このような超分子材料は、温和な条件で省エネルギーで合成できることから、環境負荷が少ない次世代材料として期待されている。また、非共有結合性相互作用は可逆・柔軟であるため、外部刺激に応答するように超分子集合体構造の特性を変化させることができる。そのため、超分子材料は刺激応答性の高機能材料への応用が期待されている。

我々は、ワープトナノグラフェン(WNG)¹の類縁体である無置換芳香族炭化水素(以後、化合物**1**)が、各種有機溶媒中でゲル状となり、ゲル中で一次元ナノファイバー構造をとることを明らかにしている。一般の無置換芳香族炭化水素がゲル化することは前例に無く、化合物**1**の湾曲構造がゲル化に適度な分子間 π - π 相互作用をもたらしているものと考えられる。

本実験では、調整した化合物**1**のゲル、およびファイバー結晶の回折パターンを測定し、化合物**1**の一次元集合体中での集積様式を明らかにすることを目的とした。ここで得られる知見により、無置換芳香族炭化水素に湾曲を導入することが、新たな小分子ゲル化剤の設計指針になりうるか見極める。



Fig.1 化合物**1**の分子構造

2. 実験内容

化合物**1**のジクロロメタン(DCM)およびトルエン溶液から、放置によって析出してきたものを結晶試料、溶媒留去によってゲル化したものをゲル試料として得た。これら試料をボロシリケートガラスキャピラリー(内径0.5 mmまたは1.0 mm)の先端3 mm程度になるように充填した。ゲル試料は、大気開放系中ではすみやかに溶媒を放出し、キャピラリーへの充填時に次第に乾燥粉末状と変化した。これらに波長1 Åの放射光照射を行い、粉末回折パターンを得た。

3. 結果および考察

化合物**1**の結晶および乾燥ゲル試料の回折パターンを示した。DCMおよびトルエンから得られた結晶は、シャープな回折パターンを示し、化合物**1**が結晶中で規則的に整列していることがわかった。それに対し、ゲル化ののち乾燥した試料は、明確な回折ピークを示さず、試料中には規則構造がほとんどないことが示唆された。しかしながら、 $d=4\sim 5$ Åでの散乱相対強度が大きくなっていることは、ゲル形成の要因となる化合物**1**の分子積層が増強されている可能性を示唆している。

4. 参考文献

1. Kawasumi, K.; Zhang, Q. Y.; Segawa, Y.; Scott, L. T.; Itami, K., "A grossly warped nanographene and the consequences of multiple odd-membered-ring defects" *Nat. Chem.* **2013**, 5 (9), 739-744.

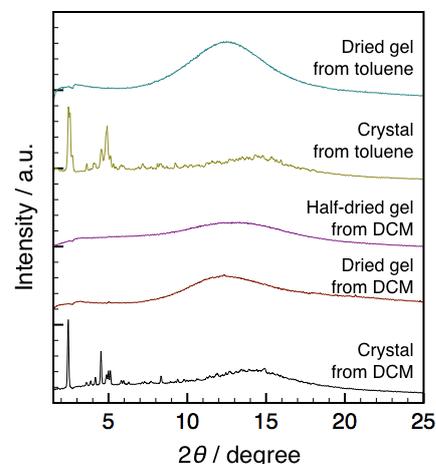


Fig.2 化合物**1**の結晶およびゲル試料の回折パターン($\lambda=1$ Å)