



## ゲル中で成長した結晶の構造解析

浜崎 亜富  
信州大学理学部

キーワード：テトラセン，体積相転移ゲル，発光色，デンドライト

### 1. 背景と研究目的

蛍光性の固体結晶は，有機 EL や太陽電池などの次世代デバイスにおいて重要な役割を担う。複数の分子では複数のパターンの結晶格子が知られており，このような場合，光の吸収特性および発光特性が変わる。体積相転移ゲルの内部での結晶成長は，急速な環境変化により特異な構造体を誘導でき[1]，これまでにテトラセンにおいて新奇の発光色の形態を確認できた。テトラセンは有機半導体にも応用されるような重要な分子であり，新しい結晶形態は注目に値する。そのため，結晶構造解析は重要であるが，ゲル内で成長した結晶を実験室レベルの X 線回折装置で測定することは，結晶量の観点から不可能であった。そこで，高輝度の光源を用いることで，ゲル内の少量の結晶の測定を計画した。[明朝 10.5]

### 2. 実験内容

直径 1 mm のリンデマンガラス製のキャピラリーチューブ内にポリ-*N*-イソプロピルアクリルアミドゲルを合成し，後から導入した任意の割合のテトラセンをゲル内で析出させた。析出したテトラセンの固体は，黄色，黄緑色，赤色の蛍光を示すデンドライト状であり，参照試料としてテトラセン結晶（再結晶精製）を含めて，シンクロトロン放射光による X 線回折（XRD）測定を行った。エネルギーは 8.050 keV， $2\theta = 0 \sim 90^\circ$  の範囲とした。

### 3. 結果および考察

再結晶精製したテトラセンでは複数の回折ピークが得られ，既知のパターンと概ね一致した[2]。一方，橙色のデンドライトの場合，精製結晶でも見られた 22.5, 24.5 の位置に高いピークを示し，10.2 の位置には精製結晶に見られないピークが発現した。わずかに規則性を有すものの，ほとんど特定の構造を持たないと考えられる。次に，緑色デンドライトでは，精製結晶で見られたピークはほとんど見られず，精製結晶でも見られた 14.5 以外に，新たに 11.7, 18.8 にピークが観測された。黄色と赤色のデンドライトが含まれる試料の場合，結晶のパターンに概ね赤色デンドライトのみのパターンを加えたものであり，黄色のデンドライトは，基本骨格として既知の結晶と同じ格子を持つと思われる。以上より，発光色を決めるのがモルフォロジー（結晶かデンドライトか）ではなく，分子レベルでの格子構造に由来することが確認された。

### 4. 参考文献

1. Y. Oaki, et al., Growth & Design. **2003**, 3, 711
2. U.Sondermann, et al., J.Phys.Chem.**1985**,89,1735

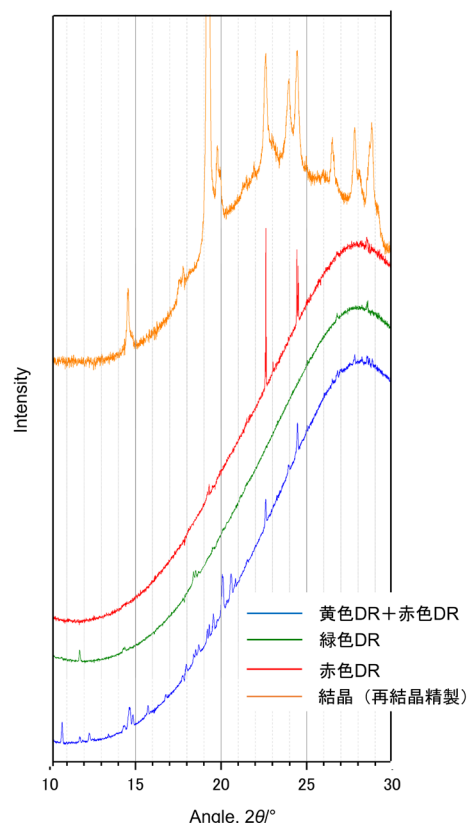


Fig. 各色デンドライト（DR）および精製結晶の XRD パターン