

固体内テラヘルツ回転を可能とする
 sp^2 - 及び sp^3 -ナノカーボンからなるハイブリッド型分子ピーポッド
 A hybrid molecular peapod of sp^2 - and sp^3 -nanocarbons
 enabling ultrafast terahertz rotations

松野太輔^{1*}, 寺崎成哉¹, 古樫加奈子², 勝野亮祐¹, 磯部寛之^{1*}

¹ 東京大学大学院理学系研究科化学専攻, 〒113-0033 東京都文京区本郷

² 東北大学大学院理学研究科化学専攻, 〒980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉

Taisuke MATSUNO^{1*}, Seiya TERASAKI¹, Kanako KOGASHI², Ryosuke KATSUNO¹,
 Hiroyuki ISOBE^{1*}

¹Department of Chemistry, The University of Tokyo, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

²Department of Chemistry, Tohoku University, Aoba-ku, Sendai, 980-8578, Japan

1 はじめに

ナノサイズの物質の機械的運動は様々な物性の発現にも繋がる興味深い研究対象である。特に炭素原子からなる物質群であるナノカーボンの分子運動はナノエレクトロメカニクスの観点からも注目されている。最近では、 sp^3 炭素からなるナノダイヤモンドと sp^2 ナノカーボンであるカーボンナノチューブとの組み合わせからなるハイブリッド型ピーポッドについて実験・理論の両面から研究が進められている。しかしながら、このハイブリッド型ピーポッドにおいては、相矛盾する提案がなされていた。すなわち、内部に取り込まれた sp^3 ナノカーボンが機械的運動を示すとするものと、運動性を示さず静止するものであった。本研究では、筒状芳香族分子とダイヤモンドイド分子からなるハイブリッド型分子ピーポッドを構築し、動的挙動を解明した。

2 実験

筒状ホスト分子として、我々が以前に合成した[3]シクロジベンゾクリセニレン ([3]C^{db}C) を用い、ゲスト分子として最も単純なダイヤモンドイドであるアダマンタンを用いた。溶液中において[3]C^{db}C の内部にアダマンタンを取り込んだ会合体が形成することを明らかにし、その会合の熱力学を解明した。さらに KEK PF BL-17A ビームラインを含む高輝度 X 線を用いて、[3]C^{db}C 及びアダマンタンとの会合体の結晶構造を明らかにした。重水素化したアダマンタンの固体 ²H NMR を用いて固体内での動的挙動を解析した。

3 結果および考察

[3]C^{db}C とアダマンタンからなる会合体の結晶構造を

図 1 に示した。確かに[3]C^{db}C の内部にアダマンタンが取り込まれたハイブリッド型ピーポッドの部分構造となっていることが示された。結晶中において会合体はヘキサゴナルバンドル状にパッキングされ、二次元シート状構造を形成していた。固体サンプルの ²H NMR 解析の結果、内部のアダマンタンは高速

で等方性回転しており、さらにその回転周波数は 560 K の加熱条件下慣性領域に達し、その際の回転周波数は 1 テラヘルツにも至ることが明らかとなった。

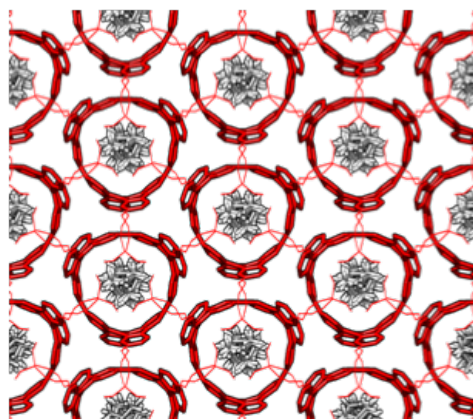


図 1. 筒状分子[3]C^{db}C とアダマンタンからなる会合体のパッキング構造。

4 まとめ

本研究では、明確な化学構造を有する sp^2 / sp^3 -ハイブリッド型ピーポッドを構築し、その異常な固体内動的挙動を解明した。

謝辞

本研究の一部は科研費 (19H05376, 20H05672, 20K15239) 及び旭硝子財団の支援を受けた。また、固体 NMR 測定は NIMS 微細構造解析プラットフォームにて行われた。

参考文献

[1] T. Matsuno, S. Terasaki, K. Kogashi, R. Katsuno, H. Isobe, *Nature Commun.* **2021**, *12*, 5062.

* tmatsuno@chem.s.u-tokyo.ac.jp

* isobe@chem.s.u-tokyo.ac.jp