

テラヘルツ回転を実現する sp^2/sp^3 炭素複合ピーポッド

A Hybrid Molecular Peapod of sp^2 - and sp^3 -Nanocarbons Enabling Ultrafast Terahertz Rotations

M23海自32

派遣先 第15回機能性 π 電子システム国際会議
(アメリカ合衆国・ローリー)

期 間 2023年6月16日～2023年6月21日 (6日間)

申請者 東京大学 大学院理学系研究科 博士3年 寺 崎 成 哉

海外における研究活動状況

研究目的

ナノスケールの固体内分子運動は、特異な物性の発現につながるとされ、注目を集めている。特にカーボンナノチューブの筒内にゲスト分子を導入した「ピーポッド」と呼ばれる構造内で、どのようにゲスト分子が運動するのかについては議論が盛んになっている。本研究では、有限長カーボンナノチューブと籠状分子アダマンタンを用いて、分子性ピーポッドを構築し、筒内のアダマンタン分子が世界最速の固体内テラヘルツ回転をしていることを明らかにした。本シンポジウムでは本成果を報告するとともに、最先端の有機エレクトロニクス研究の知見を深め、意見交換を行うことを目的とした。

海外における研究活動報告

村田学術振興財団からのご支援を賜り、2023年6月16日から6月21日の期間に開催された、15th International Symposium on Functional π -Electron Systemに参加し、“A Hybrid Molecular Peapod of sp^2 - and sp^3 -Nanocarbons Enabling Ultrafast Terahertz Rotations”という題目でポスター発表を行った。本シンポジウムは、有機エレクトロニクス分野

で世界最大級の規模の国際学会である。過去に、日本、アメリカ、ドイツ、オーストリア、フランス、中国の6カ国で開催され、15回目を数える権威ある学会である。今年度は米国ノースカロライナ州のローリーで開催され、6日間で有機薄膜太陽電池、有機電界効果トランジスタ、有機EL材料などの機能性有機材料について、141件の口頭発表、100件を超えるポスター発表が行われた。私は、自身の研究成果をポスター発表するとともに、最先端の有機エレクトロニクス研究の知見を深め、意見交換を行うことを目的として学会に参加した。

研究成果の発表では、ポスターセッションにて、固体内で世界最速のテラヘルツ回転を示す新奇有機材料についての発表を行った。固体中では通常分子間相互作用などで運動が阻害されるため、固体内分子運動は珍しく、その固体物性に興味が持たれている。中でも特にナノカーボン材料においてはこれまでに、 sp^2 炭素からなる、カーボンナノチューブと呼ばれる筒状分子内に sp^2 炭素からなるサッカーボール状分子、フラーレンが内包された構造である、「ピーポッド」中のフラーレンの回転運動など、 sp^2 炭素からなるナノカーボン同士が高い運動性を実現できる系として研究されてきた。本成果では、 sp^2 炭素からなる「有限長カー

ボンナノチューブ」内に、 sp^3 炭素からなる最小の「ダイヤモンドイド」である、アダマンタンを包接させることで、「分子性ピーポッド」を構築した。有限長カーボンナノチューブ分子にアダマンタンを包接し、固体NMRにて包接されたアダマンタンの回転速度を測定したところ、560 Kにて1.06 Tzの回転速度を示すことが分かった。これは、固体内運動として世界最速の回転運動であった。また、本研究では、理論計算により、有限長カーボンナノチューブ内のアダマンタンと筒の内側の炭素原子との相互作用についても解析し、CH- π 水素結合という相互作用が、アダマンタンの回転によって、切断・形成を繰り返し、筒内の特異な低摩擦環境を作り出していることを明らかにした。これは、「固体内で運動性を有する有機分子」の設計において、「有限長カーボンナノチューブ」の有用性を示すと共に、「 sp^2 炭素と sp^3 炭素の組み合わせ」という新しい設計指針を与える結果である。また、固体内での有機分子の運動の限界を拡張し、動的挙動を示す固体分子の可能性を広げる顕著な成果であると言える。発表時は、「分子性ピーポッド」のエレクトロニクス分野への応用について、有機エレクトロニクス関連の著名な研究者やその研究室の学生らから多くの質問、展望についての意見を得ることができ、今後の課題や問題点を発見するこ

とができた。

本シンポジウムでは、有機エレクトロニクスを中心とした新奇材料についての最先端の研究成果の講演が企画されていた。有機電界効果トランジスタ材料の最先端を紹介したKarl Leo (Dresden University of Technology) の講演などを聴講し、有機分子を材料に応用するにあたって解決すべき課題など知見を深めることができた。今回初の海外渡航であったため、言語や食べ物など海外の文化に初めて直に触れ大変刺激を受けた。また、現地で多数の研究者の方々と親睦を深められたことで、大変有意義な時間を過ごすことができた。そのため今回の本シンポジウムの参加は、発表の聴講、研究発表を通じて知見を深めるだけでなく、今後の研究者としてのキャリアに活かせるような貴重な経験ができたと考えている。最後に、本シンポジウムに参加するにあたり多大なご支援をいただきました村田学術振興財団に心より御礼申し上げたい。

**この派遣の研究成果等を発表した
著書、論文、報告書の書名・講演題目**

Matsuno, T.; Terasaki, S.; Kogashi, K.; Katsuno, R.; Isobe, H. "A hybrid molecular peapod of sp^2 - and sp^3 -nanocarbons enabling ultrafast terahertz rotations" *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 5062.