

修士論文の和文要旨

| | | | |
|--------|--|------|---------|
| 研究科・専攻 | 大学院 電気通信学研究科 量子・物質工学専攻 博士前期課程 | | |
| 氏名 | 中村 英章 | 学籍番号 | 0733044 |
| 論文題目 | 固体高分解能 NMR 法によるデカメチルフェロセン・アセナフテンキノン錯体の相転移の研究 | | |

要 旨

近年、イオン液体の開発と機能性に関する研究が盛んである。イオン液体は、多様な物性・機能性を示すことで注目されており、イオン伝導性を生かした電子材料などへの応用が期待されている。本研究で扱ったデカメチルフェロセン・アセナフテンキノン錯体 (DA 錯体) はフェロセンの特徴を生かした電子機能と特徴的な分子骨格を持つ新規物質である。この錯体の物性や構造を明らかに出来れば、フェロセン誘導体の融点を下げることにつながる。その結果、磁性体であるフェロセンを用いた電気化学特性に優れる「フェロセン系イオン液体」の実現が期待できる。本研究では固体 NMR 法を用いることで、DA 錯体の相転移前後における構造変化の解明を試みた。

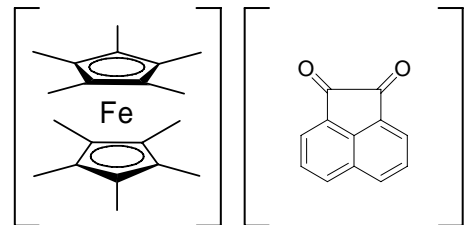


図 1 DA 錯体の構造

低温での DA 錯体の ^{13}C NMR スペクトルから、アセナフテンキノン分子が -28.7°C 以下で相転移を起こしていることが分かった。アセナフテンキノン分子単体の低温実験では、相転移は確認されなかった。これより、DA 錯体の相転移は、錯体中のフェロセン分子とアセナフテンキノン分子間に有効な相互作用が働いていることが原因である推測した。次に、 ^1H スピン拡散の実験から各温度におけるスピン拡散速度を求め、この結果と D.Suter のモデルと A.Kubo の理論を用いて、各温度におけるデカメチルフェロセン分子とアセナフテンキノン分子の最短距離の変化を計算した。

低温での DA 錯体の ^{13}C NMR スペクトルから、アセナフテンキノン分子が -28.7°C 以下で相転移を起こしていることが分かった。アセナフテンキノン分子単体の低温実験では、相転移は確認されなかった。これより、DA 錯体の相転移は、錯体中のフェロセン分子とアセナフテンキノン分子間に有効な相互作用が働いていることが原因である推測した。次に、 ^1H スピン拡散の実験から各温度におけるスピン拡散速度を求め、この結果と D.Suter のモデルと A.Kubo の理論を用いて、各温度におけるデカメチルフェロセン分子とアセナフテンキノン分子の最短距離の変化を計算した。

| temperature (°C) | 43.2 | 3.2 | -6.8 | -16.8 | -56.8 |
|------------------|------|------|------|-------|-------|
| distance (Å) | 3.70 | 3.69 | 3.30 | 3.38 | 3.23 |

これらの結果から DA 錯体の相転移前後における結晶構造をモデル化したものを、図 2 に示した。これより DA 錯体は相転移時にアセナフテンキノン分子が 11.8° 傾くことが原因で 2 つの分子間距離が縮んでいると考えられる。

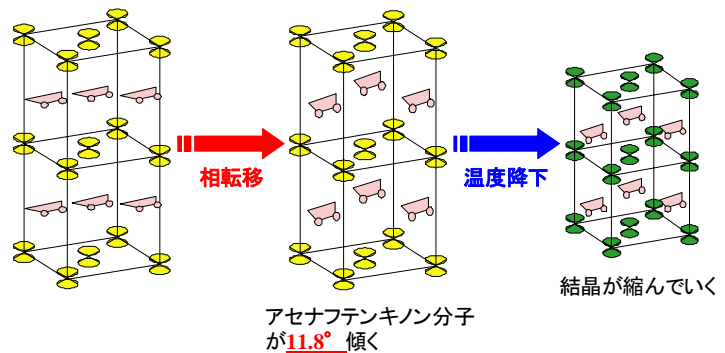


図 2 DA 錯体の結晶構造の変化