



## 極性ダイヤモンド分子の設計と合成による固体強誘電性の開拓

### Exploration of Ferroelectricity

#### in solid-state Polar Diamond Molecules

東工大応セラ研 <sup>○(DC)</sup>並木 宏允, 笹川 崇男

MSL, Tokyo Institute of Technology <sup>○(DC)</sup>Hiromasa Namiki and Takao Sasagawa

E-mail: [namiki.h.ab@m.titech.ac.jp](mailto:namiki.h.ab@m.titech.ac.jp)

ダイヤモンド分子とは、バルクダイヤモンドの結晶構造に特徴的な  $sp^3$  炭素のカゴ型骨格を構成単位として持ち、炭素の末端が水素で終端した分子式  $C_{(4n+6)}H_{(4n+12)}[n:整数]$  で表される一連の有機化合物群である。ダイヤモンド分子はバルクダイヤモンドの優れた物理的特性、熱的物性、機械的特性を受け継ぎつつ、ナノのサイズや特徴的な形状、高い対称性などに起因したバルクダイヤモンドとは異なる新奇な物性が発現する事が分かってきており、炭素系ナノテク新素材として注目を浴びている。

近年我々の研究室では、ダイヤモンド分子の終端水素を化学修飾する事で双極子モーメントを持たせた「極性ダイヤモンド分子」を対象とし、置換基によって結晶中の分子回転を制御する事で配向分極による室温以上での強誘電性の発現を目的とした研究を進めている。これまでに、ハロゲン化およびケトン化されたダイヤモンド骨格を1つ持つダイヤモンド分子について、それらの合成、精製・単結晶化と基礎物性の実験的評価を進めると共に、分子単体および結晶相の物性について理論計算も併せて検討を行ってきた。Fig.1 に示すように誘電率の温度依存性を測定したところ、ダイヤモンド骨格を一つ持つ極性ダイヤモンド分子において急峻な誘電率の異常が観測された。この誘電率の異常は結晶中の分子の回転に起因する転移を反映したものと考えられ、転移温度が置換基の大きさ（結晶中の分子間の回転障壁）に大きく依存し、回転障壁が大きくなると共に高温側にシフトする様子が確認された。

分子間の回転障壁の大きさを変化させる分子設計をしつつ、回転自由度にも異方性を導入する目的で、ダイヤモンド骨格を二つ持つダイヤモンド分子についても検討を進めている。現在までに、ケトン化および一部のハロゲン化とそれらの単離精製、単結晶化を終えている。更に多様な化学置換・極性ダイヤモンド分子の合成を試みると共に、ダイヤモンド骨格を一つ持つダイヤモンド分子とは異なる誘電特性を見出しているのので、当日の発表ではそれらの結果もあわせて報告する予定である。

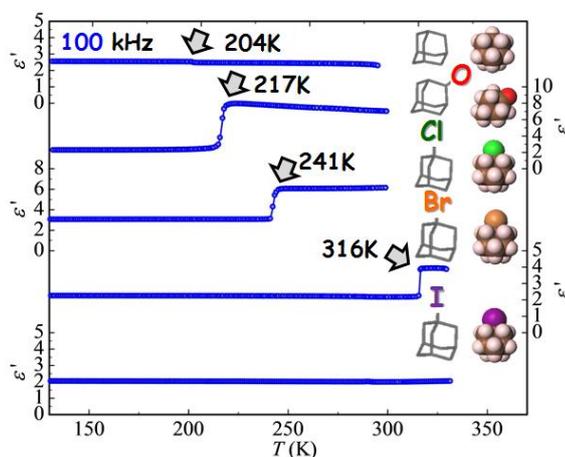


Fig.1 Temperature dependence of real part of dielectric constant of single-cage polar diamond molecules