

一個の水分子により水和されたフッ化水素の単離に成功 ～水素結合を利用した電子デバイス材料の開発に期待～

構造有機化学研究領域の張 銳 博士（平成29.3博士課程修了）、村田 理尚 助教（現 大阪工業大学准教授）、若宮 淳志 准教授、村田 靖次郎 教授、ならびに、分子環境解析化学研究領域の下赤 卓史 助教、長谷川 健 教授らは、一個の水分子により水和されたフッ化水素を炭素原子が球状に結合しているフラーレンの一種である C₇₀¹の内部に閉じ込めることに成功しました。

水溶液中における酸の解離は化学の最も重要なプロセスの一つですが、複数の水分子が関与するため、分子レベルで構造の明確な分子錯体の研究はほとんどありませんでした。

今回、化学研究所のグループでは、フラーレン C₇₀に開口部を構築し、そこからフッ化水素分子 (HF) を挿入したところ、一個の HF 分子の内包が確認されただけでなく、H₂O-HF 錯体、ならびに一個の水分子が C₇₀の内部に挿入できることを見出しました。その後、開口部を元通りに修復することによって、これらの化学種を内包した C₇₀の合成に成功しました（図1）。C₇₀内部の H₂O-HF 錯体は、強い水素結合²により固定化されていることが分かり、また、外側のフラーレン骨格が少し膨らんでいることが明らかとなりました。今後、開発した技術を利用して、水和された酸の研究が可能になり、さらに、電子材料として期待されているフラーレンの新しい性質に関する研究を進める事ができます。

研究成果は、2017年4月22日に科学誌 *Science Advances* に掲載されました。

なお、本研究は、科研費、ならびに共同利用・共同研究拠点の支援によって行われました。

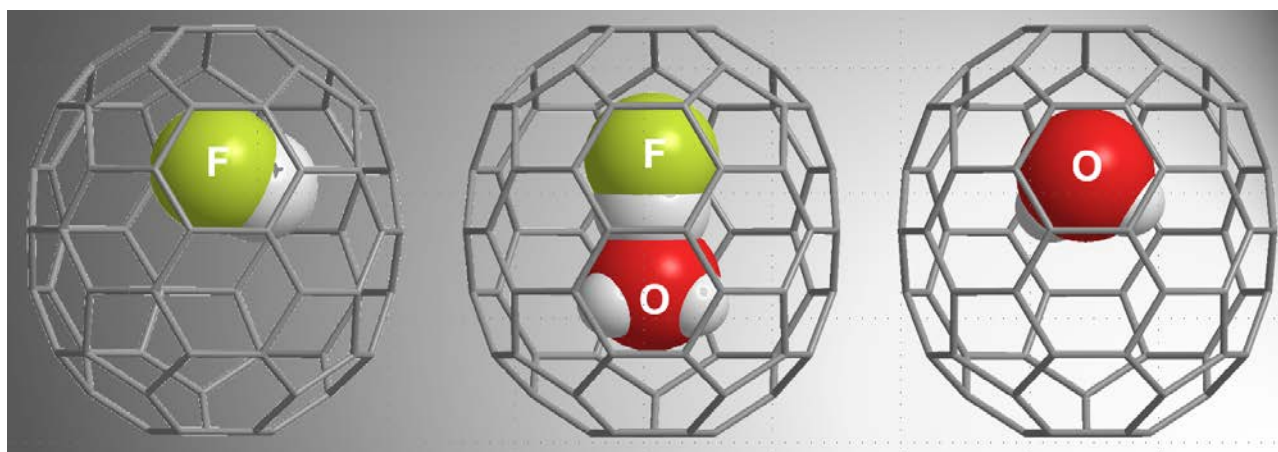


図1 HF 分子、H₂O-HF 錯体、ならびに H₂O 分子を内包したフラーレン C₇₀

<論文タイトルと著者>

タイトル：Isolation of the Simplest Hydrated Acid

著者：Rui Zhang, Michihisa Murata, Atsushi Wakamiya, Takafumi Shimoaka, Takeshi Hasegawa,
Yasujiro Murata

掲載誌：Science Advances

¹ 70個の炭素原子が球状に結合しているフラーレンの一種。完全な球状の C₆₀に対して、C₇₀はラグビーボール状。

² 電気陰性度の高い原子に共有結合で結びついた水素原子が、近傍の酸素等の孤立電子対とつくる非共有結合性の引力的相互作用。