

## フラーレン二量体の融合過程におけるスペクトル変化

○ 藤崎真史、成田進、野村泰志

信州大学繊維学部(〒386-8567 長野県上田市常田 3-15-1)

[緒言] 1985年のKroto、Smally、Curlらにより、バックミンスターフラーレンと呼ばれる $I_h$ - $C_{60}$ が生成されて以来、様々な研究が行われてきた。その中でもフラーレンの重合体はフラーレン単量体とは違った特性を示す事で注目された。図1にフラーレンの重合体の基本ユニットである二量体の融合過程[1]について示す。

本研究ではフラーレンで観測されているスペクトル[2]が融合過程ではどのように変化するかを調べる。この融合過程の中の第一構造から第四構造への融合過程の安定構造とチューブ型の赤外スペクトルと可視・紫外スペクトルの変化を調べ検討する。

[計算方法] MacSpartan04 で組み立てた初期構造を元に Gaussian03 を用いて密度汎関数法のB3LYP/3-21Gで構造最適化する。また、これを元に分子振動の振動数と電子励起状態を求める。電子励起状態は、Gaussian03に組み込まれているTD(Time-Dependent)法により求めた。

[結果・考察] 赤外スペクトルの変化を図2と図3から検討してみる。フラーレンから第二構造になると $C_{60}$ のケージが架橋構造の方に向かって尖った形になるため対称性が低下する。そのため、縮退がとけ禁制だったピークがフラーレンのピーク周辺に現れるようになった。第一構造の架橋構造の縦の結合が切れるために $C_{60}$ ケージの形がさらに崩れ $500\text{cm}^{-1}$ 付近のフラーレン由来の振動が小さくなった。また、架橋構造の振動 $650\sim 1100\text{cm}^{-1}$ 付近のピークが現れるようになった。

当日は、この融合過程のスペクトル変化を可視・紫外スペクトルも含めてより詳細に検討する。

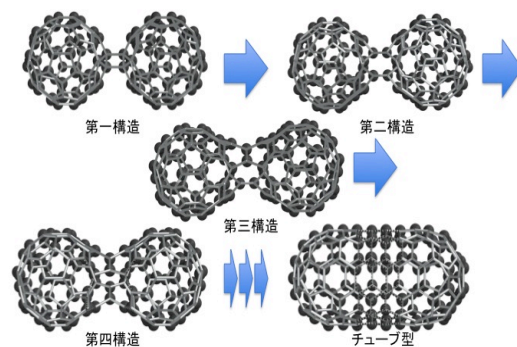


図1.フラーレン二量体の融合過程

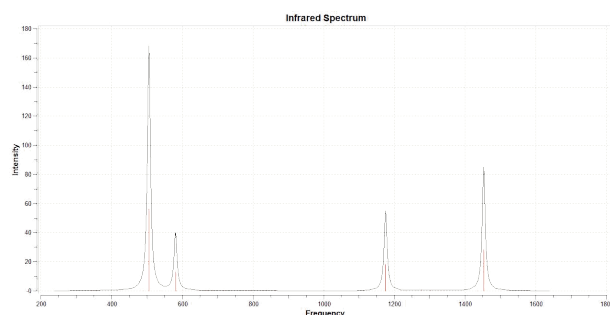


図2. $C_{60}$ の赤外スペクトル

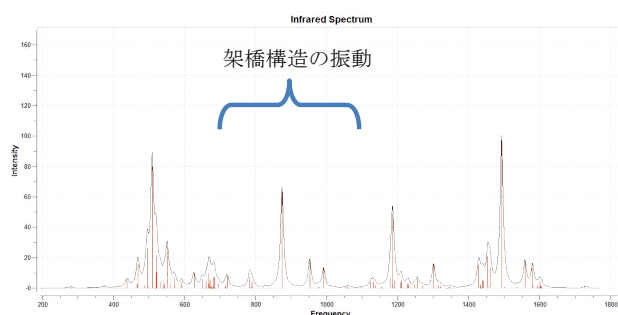


図3.第二構造の赤外スペクトル ※横軸は波数  $\text{cm}^{-1}$

[参考文献][1] H. Ueno, S. Osawa, E. Osawa, K. Takeuchi : *Fullerene Sci. Technol.*, **6**, p.319 (1998)

[2] W.Kratschmer,K.Fostiropoulos and Donald R.Huffman,*Chemical Physics Letters volume 170(1990),number2,3*