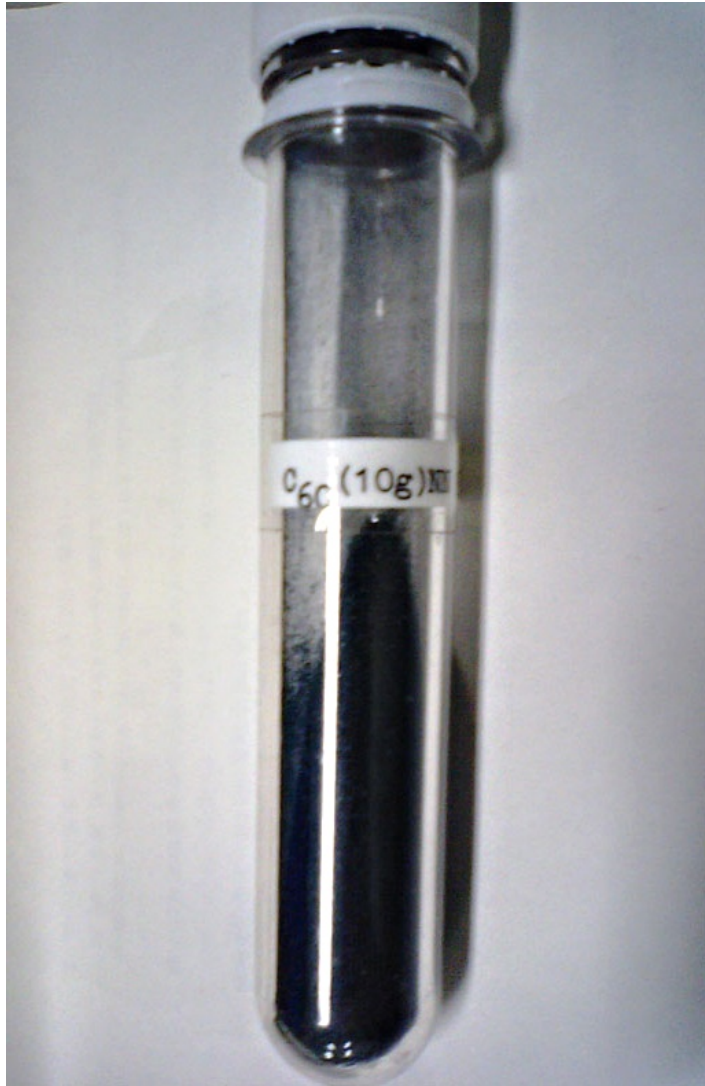


フラーレン C_{60}



固体は煤そのもの
溶液は鮮やかな紫

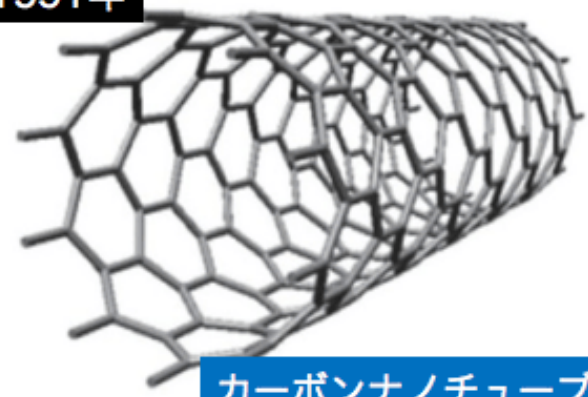


1985年



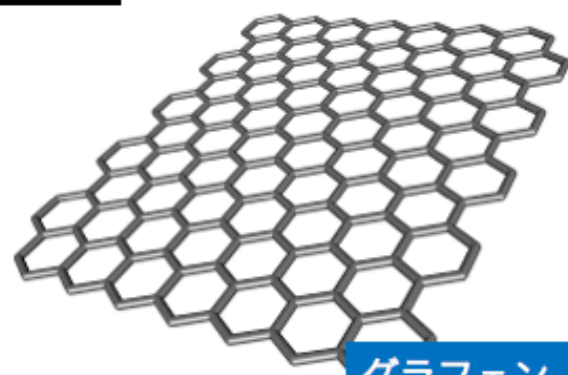
フラーレン

1991年



カーボンナノチューブ

2004年



グラフェン



カール

クロトー

スモーリー

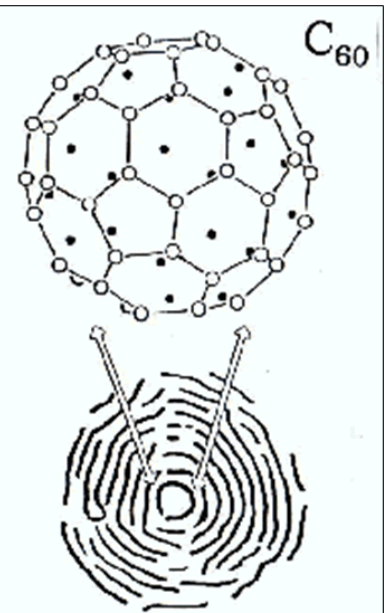


飯島



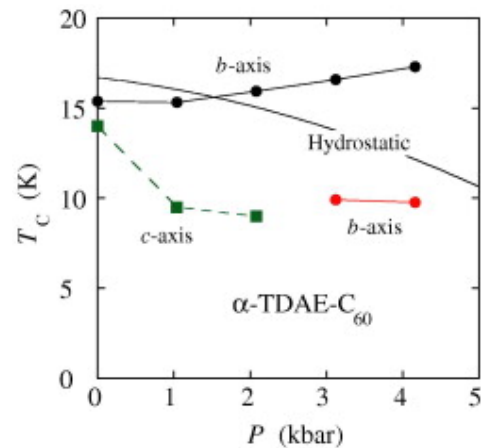
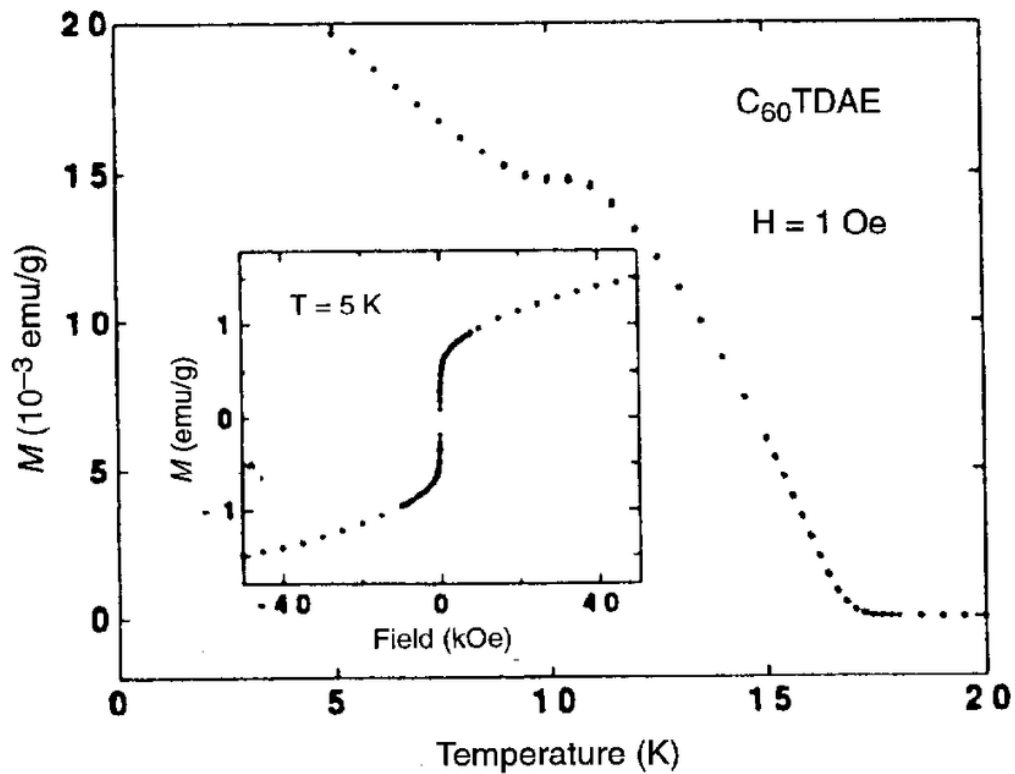
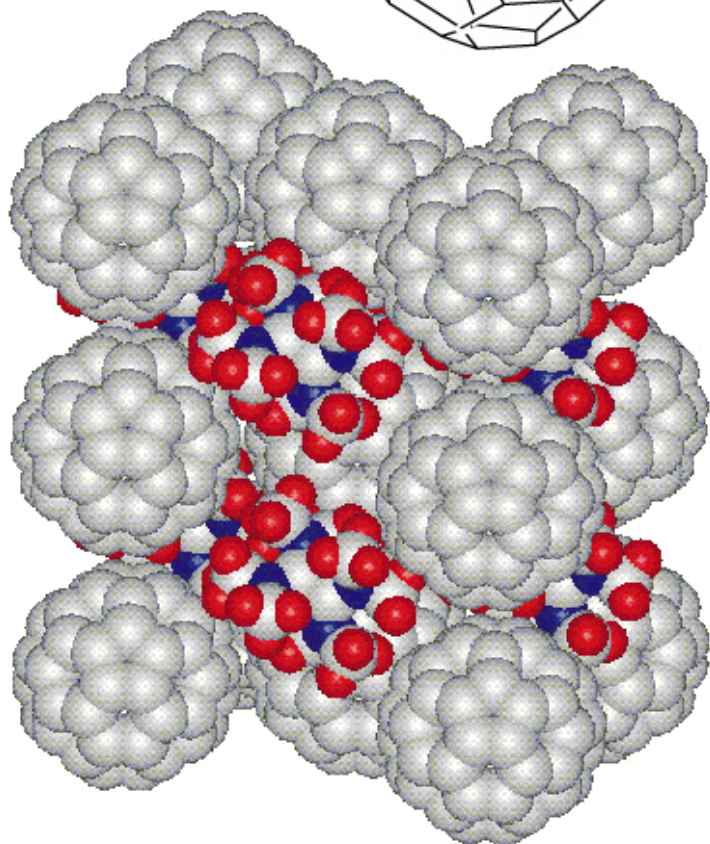
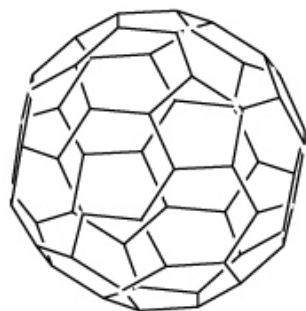
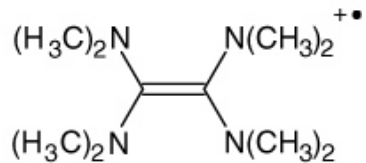
ガйм

ノボセロフ

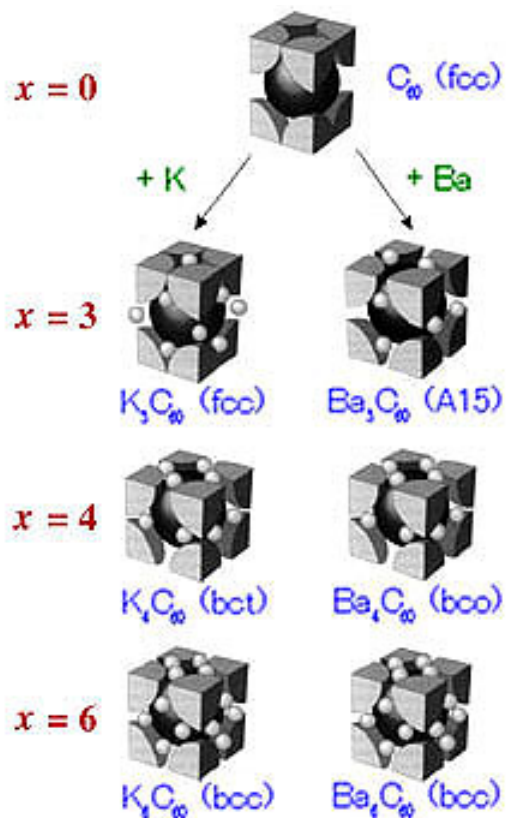
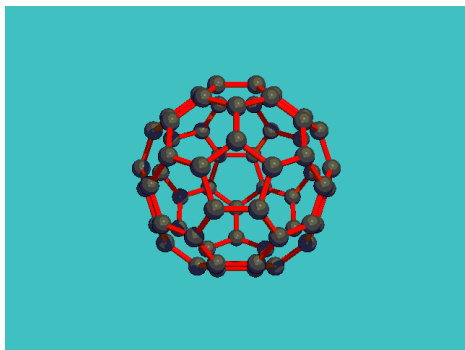
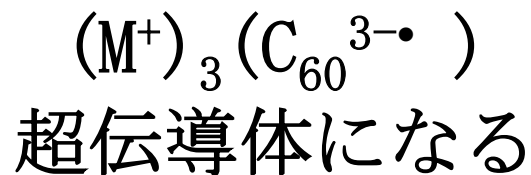


NECのホームページから

C_{60} -TDAE 強磁性体



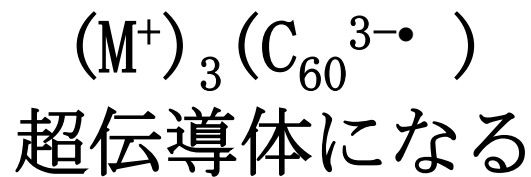
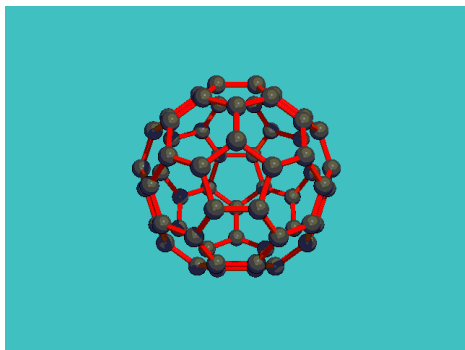
フラーレン C_{60} のアルカリ金属塩



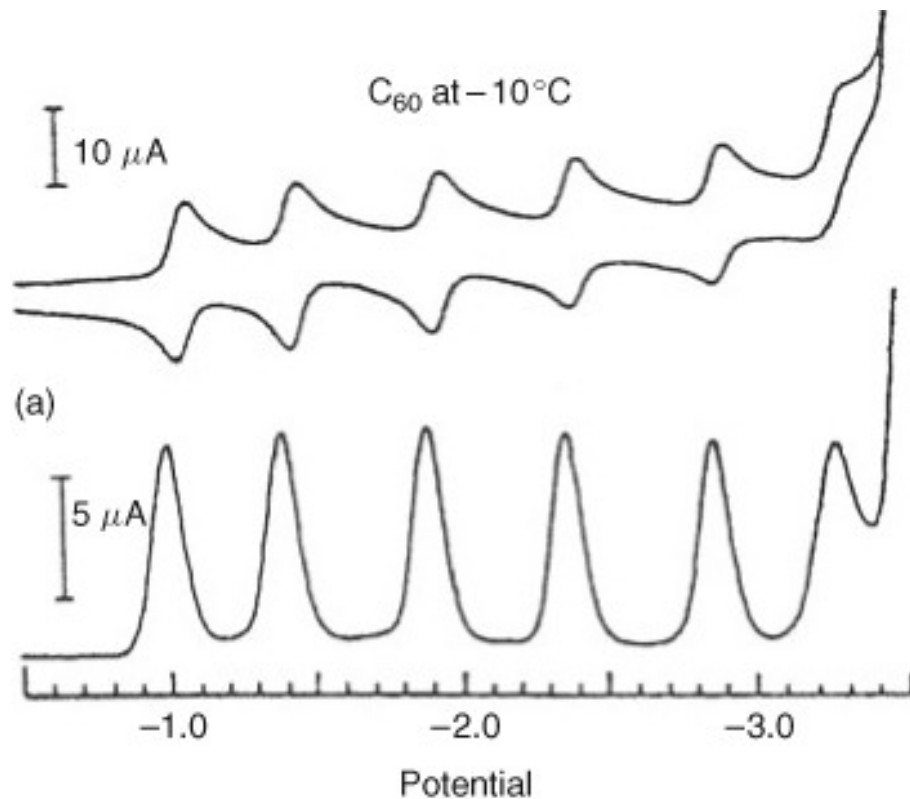
化合物	結晶構造	格子定数 (nm)	T_c (K)
Na_2RbC_{60}	sc (< 313K)	1.4028	3.5
Na_2CsC_{60}	sc (< 299K)	1.4046	12
KRb_2C_{60}	fcc	1.4337	27
K_2RbC_{60}	fcc	1.4267	23
K_2CsC_{60}	fcc	1.4292	24
K_3C_{60}	fcc	1.4240	19.3
$RbCs_2C_{60}$	fcc	1.4555	33 (最高 T_c)
Rb_2CsC_{60}	fcc	1.4431	31.3
Rb_3C_{60}	fcc	1.4384	29
Ca_5C_{60}	sc	1.4010	8.4
Sr_6C_{60}	bcc	1.0975	4
Ba_6C_{60}	bcc	1.1171	7

有機超伝導転移温度の記録保持者!

フラーレン C_{60} のアルカリ金属塩



フラーレンは電子受容能が高い



Cyclic voltammetry の結果

C60 を基調とした超伝導体

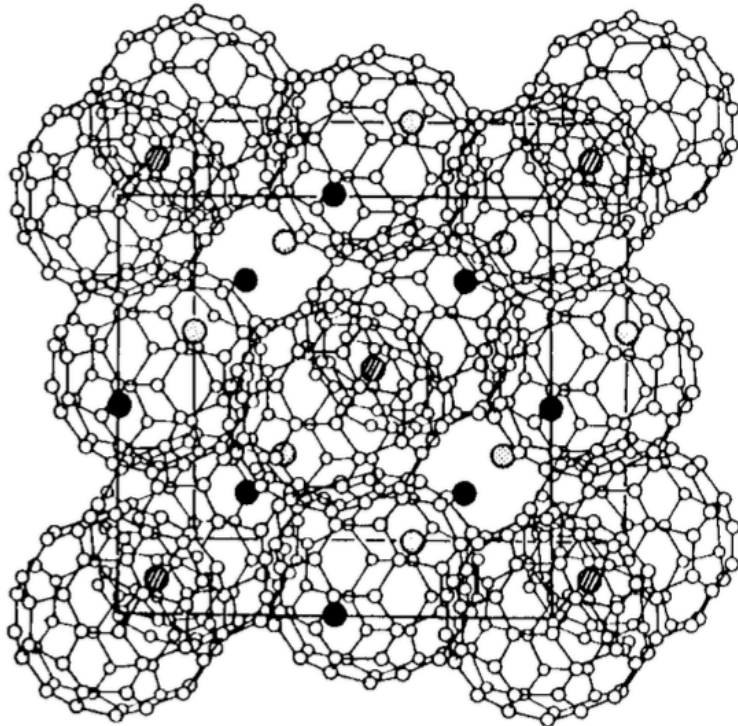


図 13 K_3C_{60} の格子モデル. K^+ イオンは格子間隙に充填される.

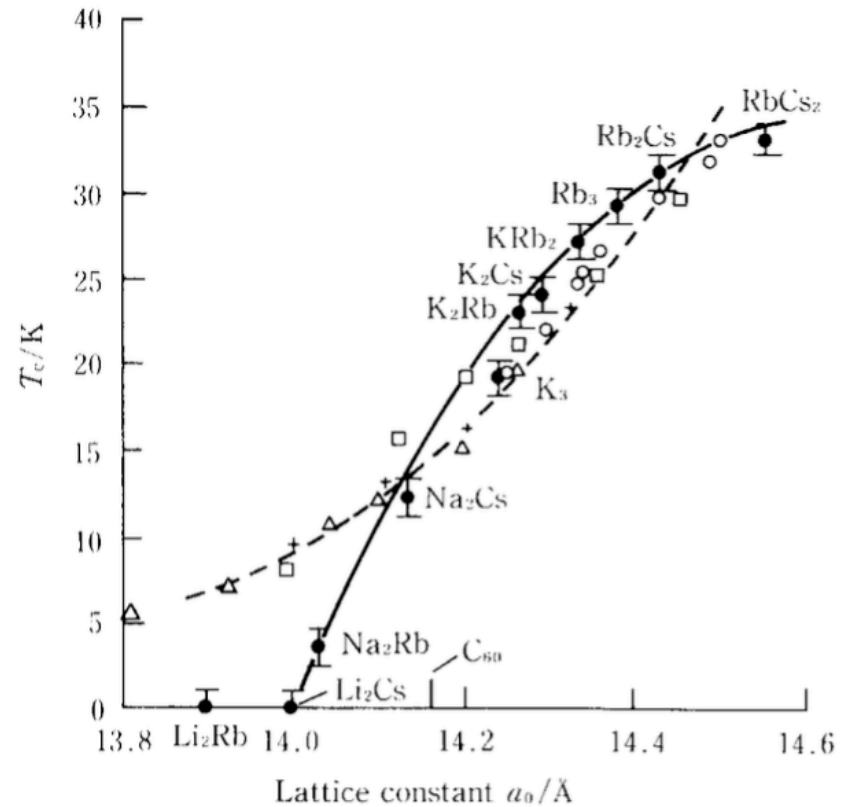


図 15 (アルカリ金属) $_3C_{60}$ の T_c と格子定数の相関関係²⁹⁾.

**C60薄膜へ K 単体の蒸気でドーピングすることによって合成される。
ポリアセチレンへのドーピングの技術と同様**

01
Topics

新型有機薄膜太陽電池の開発に成功

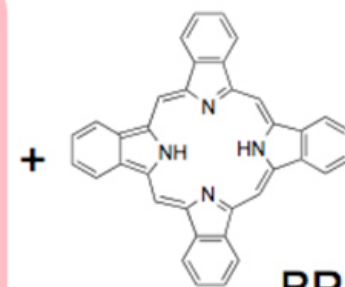
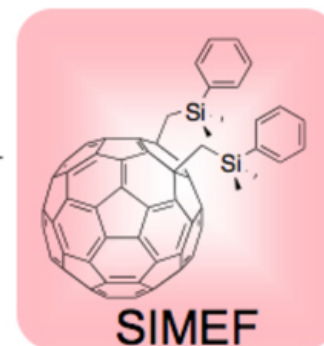
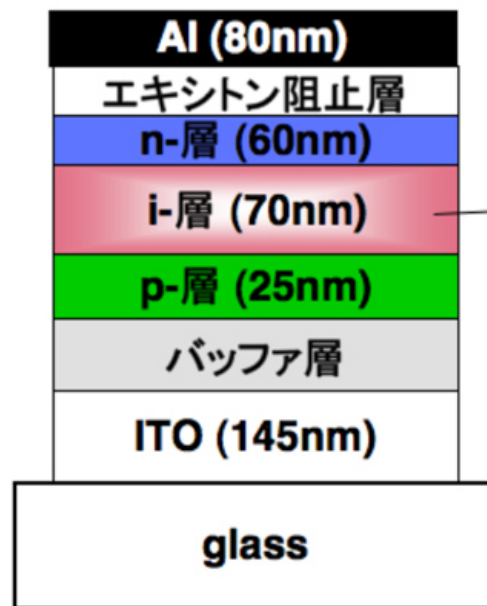
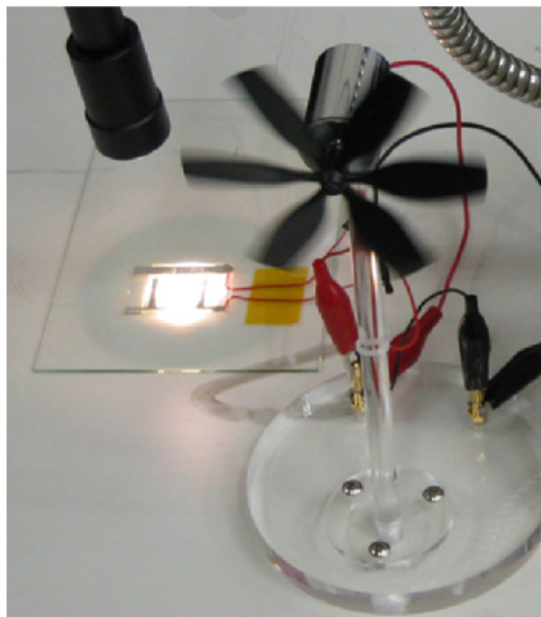
戦略的創造研究推進事業ERATO
「中村活性炭素クラスタープロジェクト」

JST NEWS

JST 独立行政法人
科学技術振興機構
Japan Science and Technology Agency

次世代太陽電池の高効率化に挑む!

- エネルギーの変換効率を世界最高レベルに
- 新開発の電子供与体と受容体の出会いが理想的な構造を生む



太陽電池でファンを回すデモ

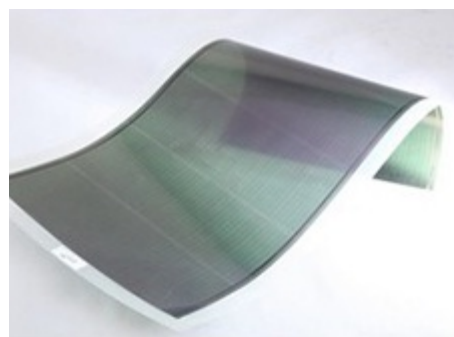
2014/03/25 11:06

三菱化学と大成建設、有機薄膜型太陽電池をビル用外壁材に一体化

三菱化学と大成建設は3月24日、有機薄膜太陽電池を用いた発電する建物外壁ユニットを共同開発し、性能評価のための実証試験を始めると発表した。



太陽光パネル

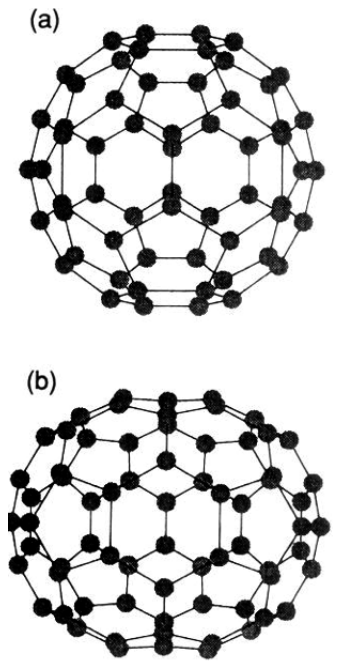


薄膜太陽電池

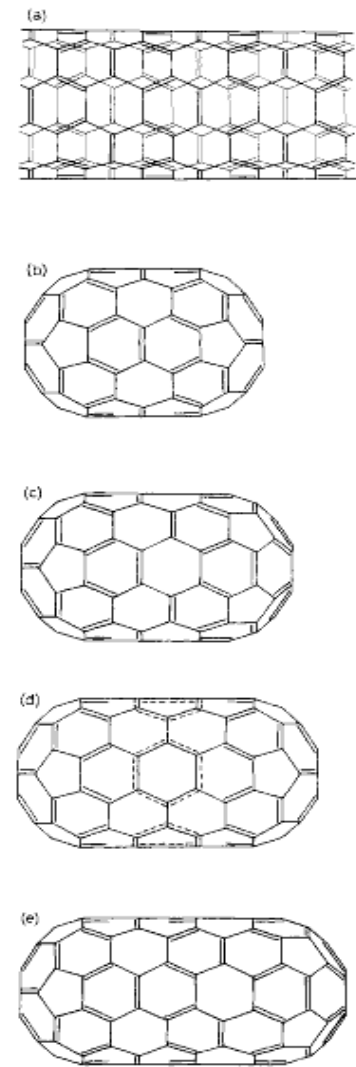


建設が進む「実証棟」
(完成イメージ)

サッカーボール分子、C60
ラグビーボール分子、C70



フラーレン
引き延ばしたら
ナノチューブ



「線は帳面に引け」 by Euler
線の数 = 頂点の数 + 面の数 - 2

どんなフラーレンにも
正五角形が12個ある

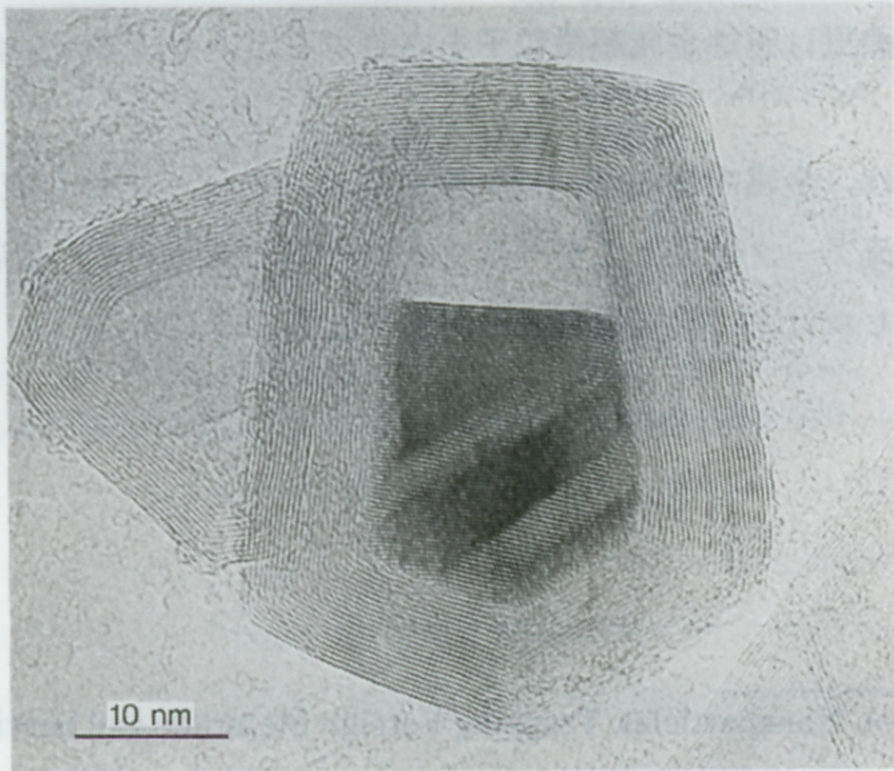


図 1 LaC₂ 単結晶を内包したナノカプセルの TEM 像.

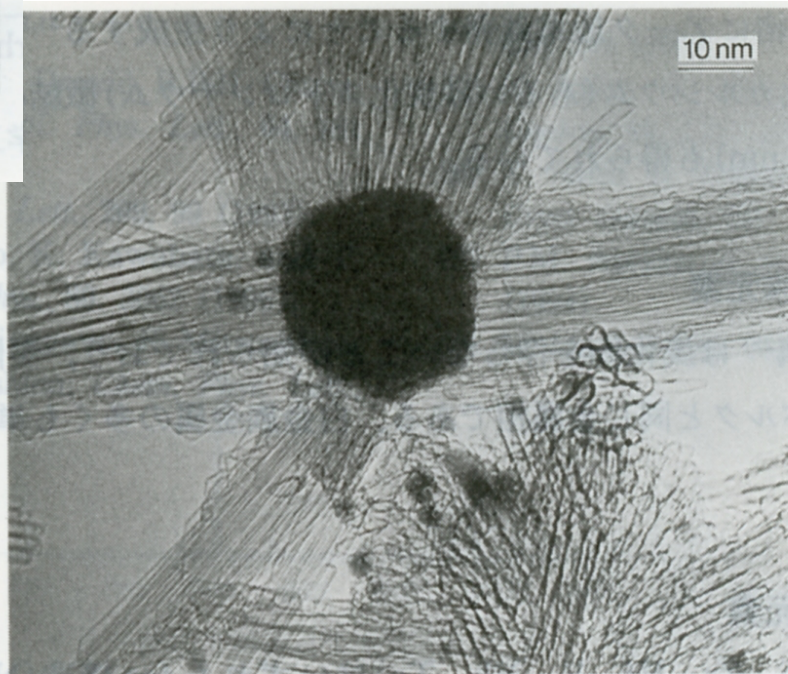
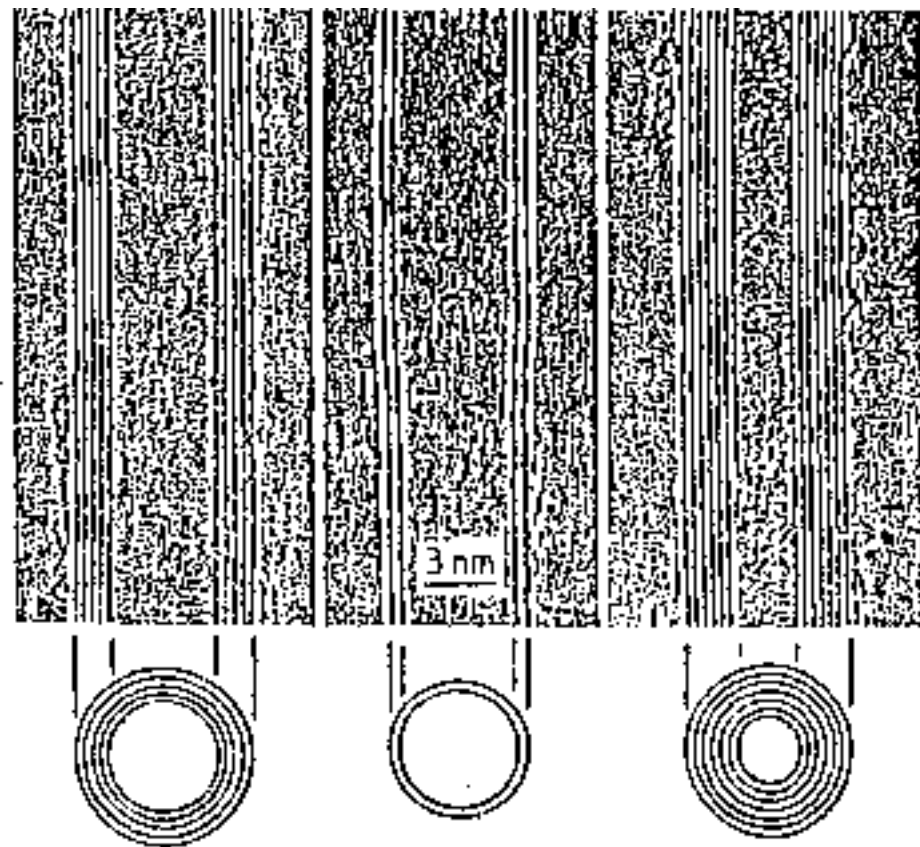
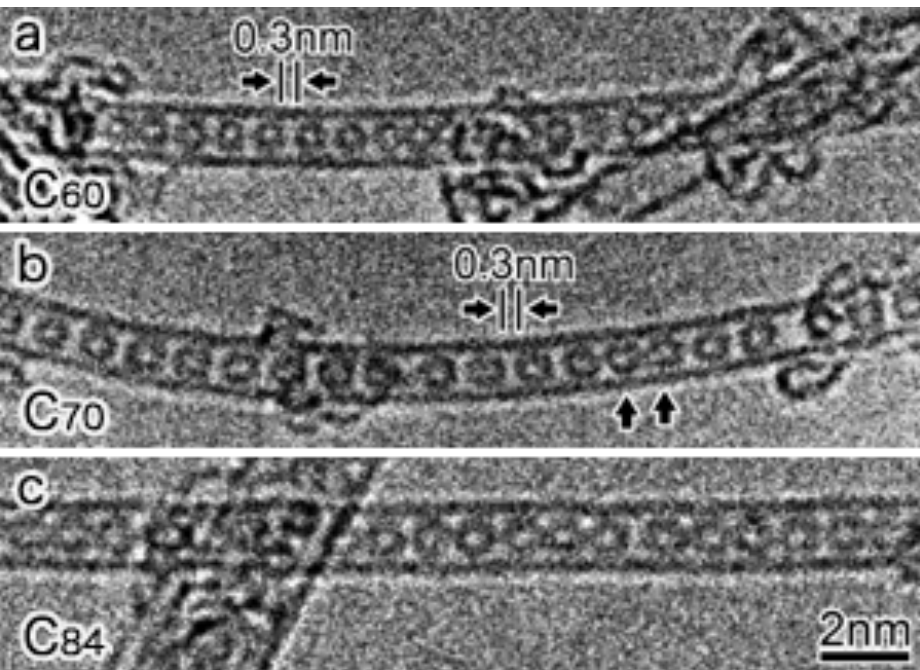


図 2 La 化合物の超微粒子から放射状に成長する単層ナノチューブの TEM 像.



フラーレン内包ナノチューブ

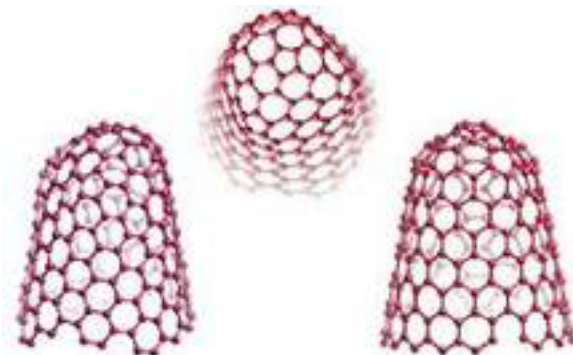


飯島 澄男 NEC特別主席研究員
1963 電気通信大学通信学科卒業

NECなど、カーボンナノチューブ電極採用の携帯機器向け燃料電池を開発

2001年8月30日

日本電気(株)らは、カーボンナノチューブの一種である“カーボンナノホーン”を電極に採用した携帯機器向けの**小型燃料電池**を開発した。エネルギー密度がリチウム2次電池の10倍など、、

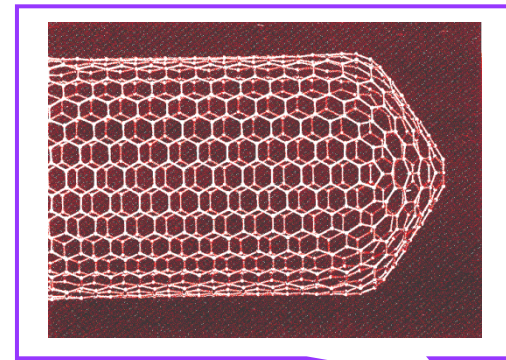


カーボンナノホーン

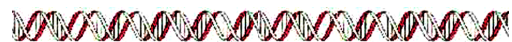
分子ワイヤー(導線)

カーボンナノチューブ、長さはいくらでも。

数ナノメートルの直径をもつ

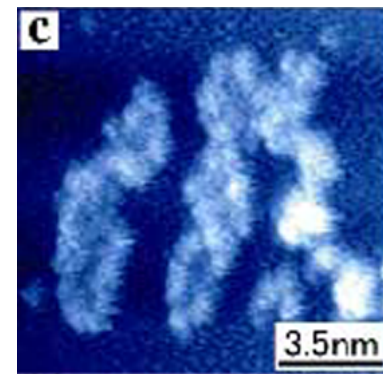


DNA が電導性があり、分子導線に使えるのではないかと
言っている人もいる



$$3.4 (\pm 0.2) \text{ nm} \times 10 = 34 \text{ nm}$$

DNA 二重らせん構造
のSTM観察



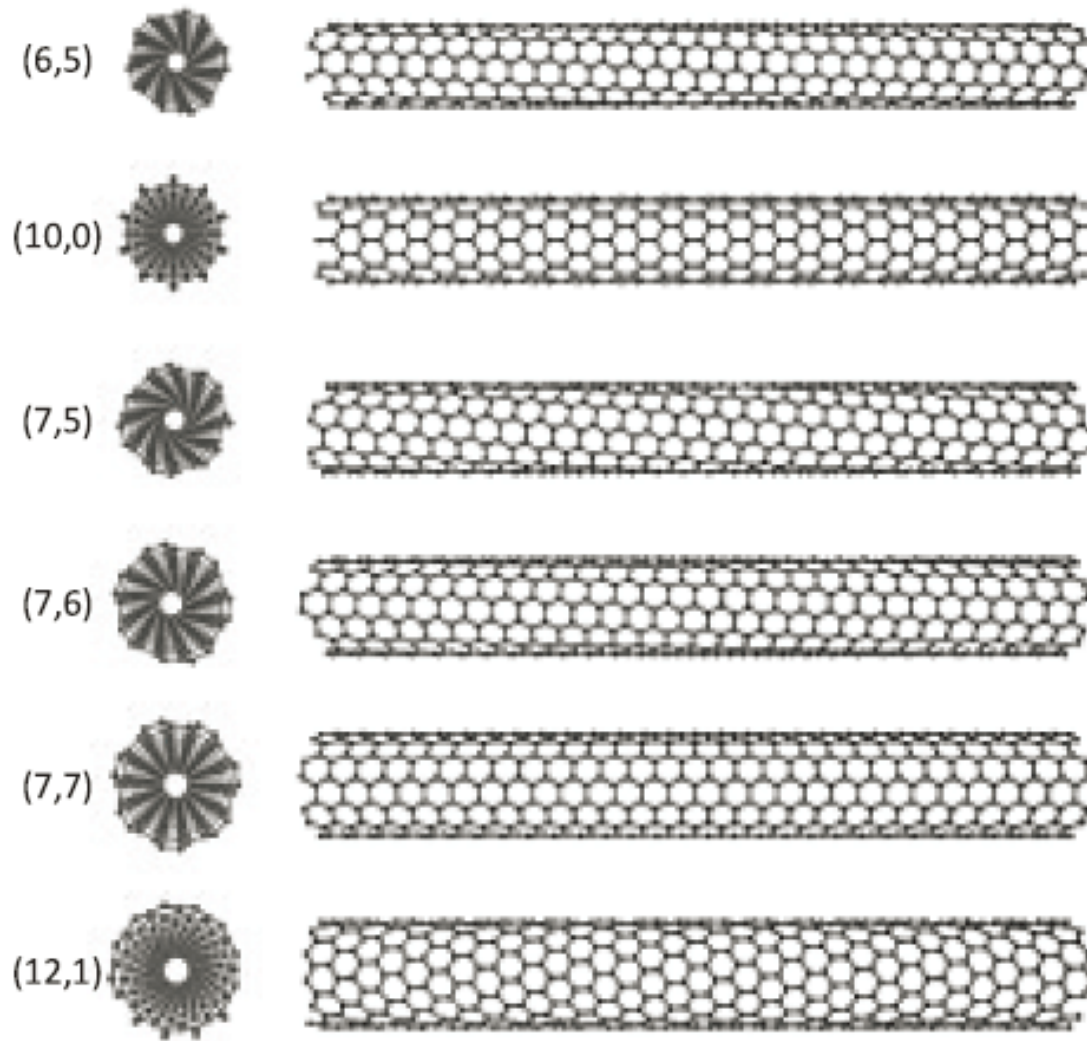


図3 カイラリティの異なる様々な SWNT の構造
 (左) 断面図 (右) 側面図

らせんピッチ等により電導性が異なる

Ishida Lab.

Fullerene Chemistry

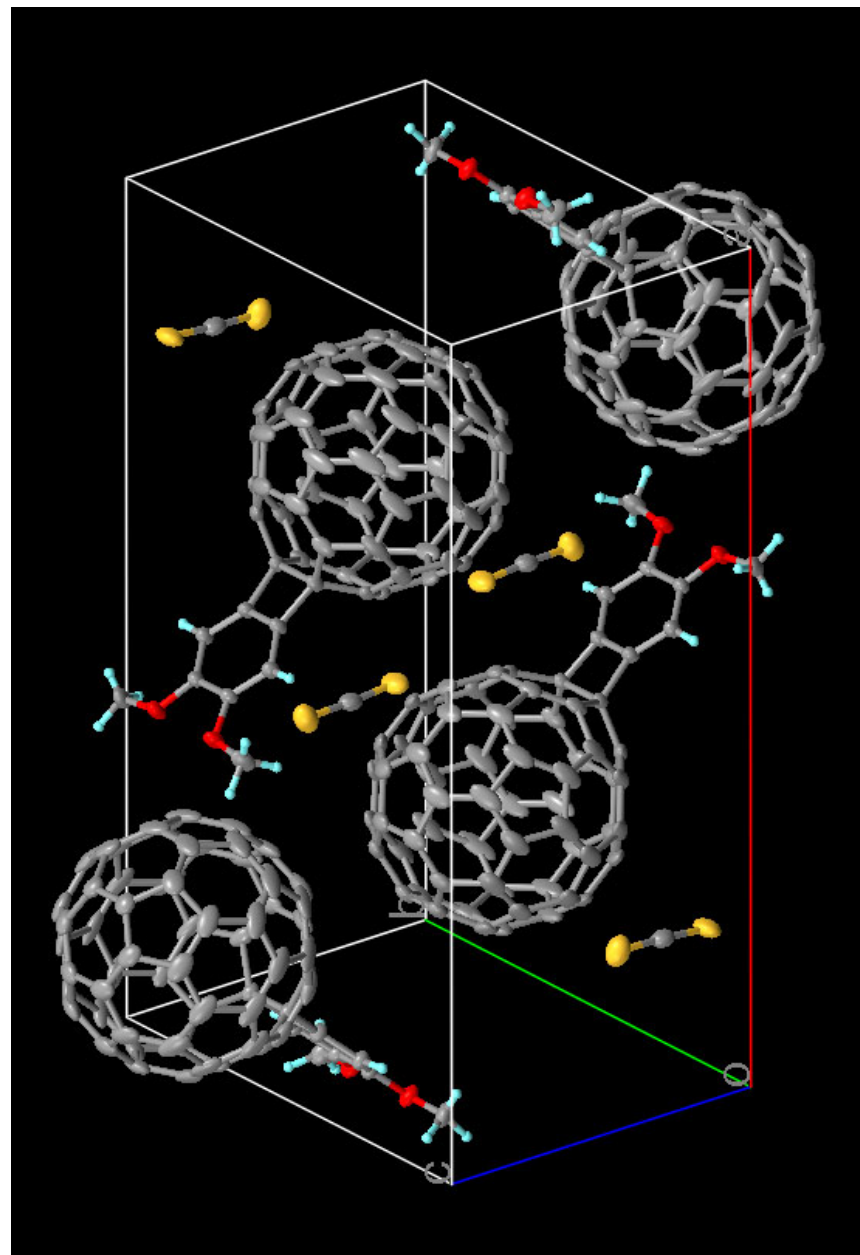
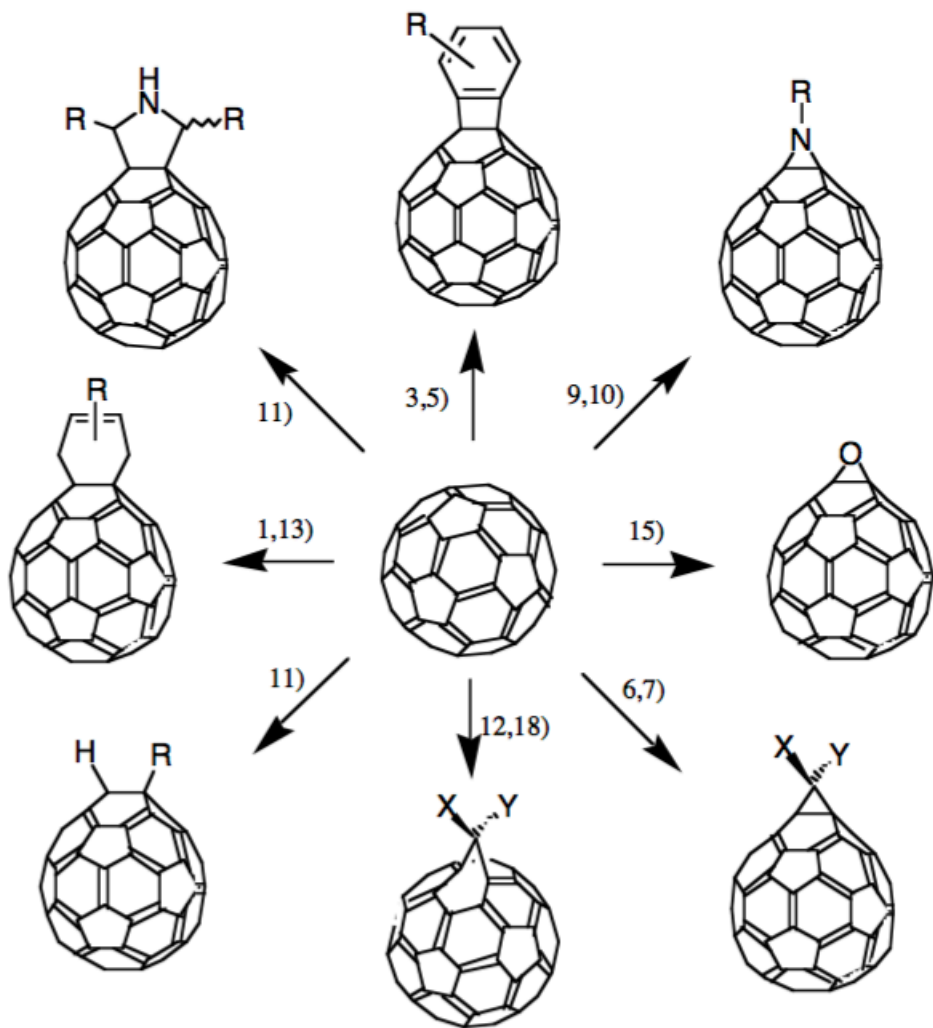
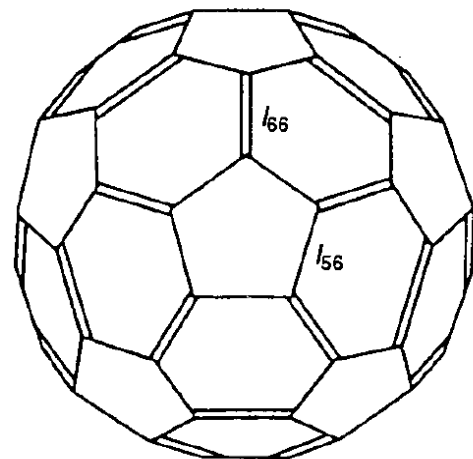


図1. C₆₀の付加反応 (括弧は文献番号に対応)

シュレーゲル図を使って、30本の二重結合が互いに共役するようにケクレ構造を描くことができる。そのケクレ構造の数は、実に12,500もあると計算される^{3,11)}。このような数えあげにはさまざまなグラフ理論的手法が使われる。12,500のケクレ構造のなかで、 l_{56} と l_{66} に二重結合が描けるものがそれぞれ3500個と5500個あるので、この二種類の結合に対するポーリングの結合次数は、それぞれ7/25, 11/25となる³⁾。またヒュッケルの分子軌道計算からも、クールソンの結合次数はそれぞれ0.476, 0.601と計算される⁴⁾。実験結果とも合わせて、 C_{60} 分子の基底状態はすべての l_{66} に二重結合を描いたラジアレン構造(図4)でよく表すことができる。コラム p.31 に紹介したバックミンスターフラレン C_{60} 分子の正式な IUPAC 名は、このラジアレン構造に対して決められたものである。

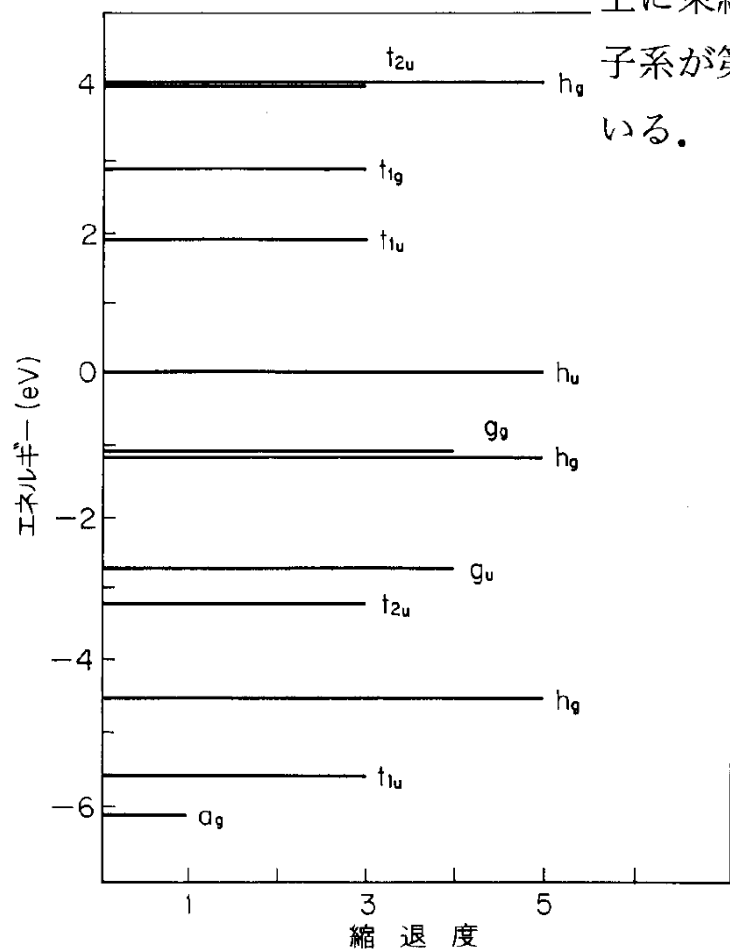


C_{60} の環状共役系の基底状態の共鳴構造式

また、 C_{60} 分子は対称性が非常に高いため、縮退度の高い分子軌道がたくさん現れる。たとえば、 π 電子軌道を求める60行60列のヒュッケル分子軌道法の永年行列式は、非常に縮退度の高いものが多くなっている。とくにHOMO(最高被占軌道)は五重に、その次に高い被占軌道は九重に縮退している。全体で五重縮退の軌道は4組、四重縮退は3組、三重縮退は6組もある。

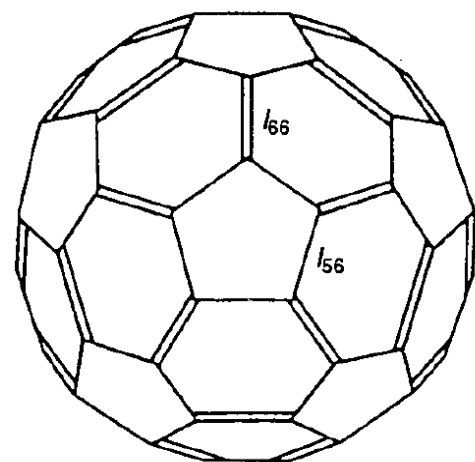
	結合次数		結合の長さ(Å)		
	ポーリング ³⁾	クールソン ⁴⁾	X線 ⁵⁾	NMR ⁶⁾	電子線 ⁷⁾
l_{56}	7/25	0.476	1.432	1.40	1.458
l_{66}	11/25	0.601	1.388	1.35	1.401

図1に筆者と押山⁵⁾による密度汎関数法に基づく局所密度近似を用いて得られた C_{60} の π 状態の分布を示す。これは、 C_{60} クラスターの光吸収や固体 C_{60} の輸送特性にかかわる電子状態が、おもに π 状態と考えられるためである。図からわかるように、最低エネルギー状態は全対称の a_g 状態、次の状態は原子の p 状態と同じ変換性をもつ t_{1u} 状態、三番目は d 状態と対応する h_u 状態という順で現れている。これは、 Y_{1m} で表現される球面上に束縛された電子系の一電子準位と同様な順に現れており、 C_{60} の π 電子系が第一近似としては球面上の電子系という見方ができることを示している。



◀ 図1 C_{60} の π 状態

最高被占状態 (h_u) をエネルギーの原点としている。



C_{60} ・フラーレンの化学
(別冊化学、化学同人、1993)