

# 海外支援プログラム実験終了報告書

2020年 1月 30日

実験者 1 (氏名・所属) : 山室修・東京大学物性研究所
実験者 2 (*1) (氏名・所属) :
研究代表者 (氏名・所属) : 山室修・東京大学物性研究所
中性子散乱課題番号・装置名 : 19904・C3-1-1(AGNES)
実験課題名 (*2) : 超高エントロピー液体・アルキル化パーフルオロベンゼンの遅いダイナミクス
利用施設・装置 : NIST・HFBS
利用期間 : 2019年12月 2日 ~ 2019年 12月 9日
実験の概要 (*3) : <p>分子量 (M) が大きい分子が固体になり易いのは常識であるが、近年、物材機構の中西らのグループは、<math>\pi</math>共役系のコアにアルキル鎖を結合させたアルキル化<math>\pi</math>共役分子が室温で液体として存在することを見出した。我々は液体化の原因をアルキル鎖の立体配座の乱れによる配置エントロピーが液体相を安定化させているためであると考えており、このような液体を超高エントロピー液体と呼んでいる。今回対象とするアルキル化パーフルオロベンゼン(APFB)はパーフルオロベンゼンの F 原子のうち一つが分岐アルキル鎖で置換された分子で、超高エントロピー液体としては最も単純な物質である。本研究では分岐アルキル鎖の長さが異なる C<sub>4</sub>C<sub>8</sub>-PFB と C<sub>6</sub>C<sub>10</sub>-PFB, C<sub>8</sub>C<sub>12</sub>-PFB を取り上げた。C<sub>4</sub>C<sub>8</sub>-PFB と C<sub>6</sub>C<sub>10</sub>-PFB はそれぞれ <math>T_g = 157</math> K, 165 K でガラス転移を示す。今回の実験の目的は、遅い時間領域 (100 ps~10 ns) の中性子準弾性散乱スペクトルを調べ、緩和ダイナミクスを明らかにすることである。</p> <p>最初に 20 K から 360 K の間を一定速度で昇温しながら弾性散乱強度測定を行った。C<sub>4</sub>C<sub>8</sub>-PFB と C<sub>6</sub>C<sub>10</sub>-PFB は <math>T_g</math> より少し低い 150 K から弾性散乱強度が減少し始め、C<sub>6</sub>C<sub>10</sub>-PFB は途中で結晶化する様子が見られた。その後、C<sub>6</sub>C<sub>10</sub>-PFB と C<sub>8</sub>C<sub>12</sub>-PFB では、融解による急激な強度の減少が見られた。興味深いことに、C<sub>4</sub>C<sub>8</sub>-PFB と結晶化するまでの C<sub>6</sub>C<sub>10</sub>-PFB の強度の温度変化はほぼ一致していた。液体状態ではアルキル鎖が短い APFB が速く緩和していたが、360 K ではどの試料もほぼ緩和しきっていた (弾性散乱強度がほぼゼロ)。次に、各試料の準弾性散乱測定を 120 K から 350 K の温度範囲で行った。C<sub>8</sub>C<sub>12</sub>-PFB は結晶化してしまうため 270 K 以上で測定した。その結果、120 K から準弾性散乱が観測された。得られた動的構造因子 <math>S(Q, \omega)</math> をローレンツ関数でフィッティングしたところ、どの試料も速い緩和と遅い緩和の 2 成分があることがわかった。今後、ドイツの MLZ の TOFTOF 分光器でより速い時間領域での緩和を測定し、緩和ダイナミクスの全体像を調べる予定である。</p>

(\*1) 1人のみ支援を受けた場合は空欄でお願いします。

(\*2) 物性研中性子共同利用で採択された課題名です。

(\*3) 簡単な記述で構いません。この報告書の提出をもって、旅費が支給されます。また、実験終了後 2 ヶ月以内に物性研 ISSP-NSL Database (<http://quasi.issp.u-tokyo.ac.jp/db/index.php>) から activity report の提出をお願い致します。