

ナノ炭素細線物質に関する理論計算

Theoretical studies on carbon nano-wire materials

京都大学エネルギー理工学研究所 エネルギー利用過程研究部門
分子ナノ工学研究分野 中江隆博

ナノ炭素細線物質であるグラフェンナノリボン(GNR)は、分子幅・炭素骨格に依存した物性を有し、優れた電子・磁気特性を示す次世代型の高機能材料として期待されている。極細分子幅・エッジ構造を制御して GNR を作り分ける合成法として、我々は 2 ゴーンラジカル重合型気相成長法(2Z-RPCVD 法)を開発し、アームチェア型 GNR のバンドギャップの分子幅依存性を実験的に明らかにした。アセン型 GNR は高機能半導体特性を示すことが理論予測されていたが、主鎖をベンゼン環の短軸方向に炭素-炭素結合をジグザグに成長させる必要があるため、従来合成が困難であった。

今回、新規に開発した Z 型前駆体分子を用いることでアセン型 GNR の表面合成に成功した。[1] 高選択的に進行した Z 型分子の表面重合反応のメカニズムについて、表面分子種の構造を計算機シミュレーションにより考察を行った。計算手法は Materials Studio 2016 QMERA モジュールを用いて Au(111)面上の Z 型分子ピラジカルの構造最適化を行った。その結果、面不斉が発現する表面キラリティーに加え、反応活性なラジカル中心の存在する Z 型の蝶つがいの 2 つのベンゼン環に高さ方向の非対称を有する構造が最安定構造として得られた。高さ非対称性の発現により、“鍵と鍵穴”構造を自発的に形成し同種のみ選択的する自己組織化表面重合の機構を明らかにした。

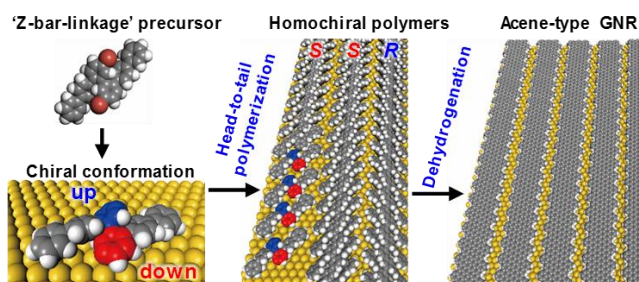


Figure 1. Synthesis of acene-type graphene nanoribbon from Z-bar linkage precursor.

発表論文(謝辞あり)

- [1] Homochiral polymerization-driven selective growth of graphene nanoribbons,
H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, *Nat. Chem.*, **2017**, 9(1), 57-63.