

ナノ炭素材料の理論的研究
Theoretical study of nanocarbon 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 小島崇寛

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ゾーン気相成長 (2Z-CVD) 法を開発した。2Z-CVD 法により GNR を高効率合成することでボトムアップ型 GNR 薄膜の単離が可能となり、実験的な物性計測に成功している。[1] また、我々は新規に開発した Z 型前駆体分子を用いることでアセン型 GNR の表面合成にも成功している。[2] 我々が開発した Z 型分子は剛直かつしなやかな構造を有することが特徴の分子であり、金属基板上に吸着した際に、変形しアキラル構造からキラル構造へと変形する。このキラル構造の分子は Head-to-Tail 型重合反応に適した形となり、高効率重合反応の一因となっている。そこで、金属基板への分子の吸着構造を推定できれば、新規 Z 型分子の設計への一助と考え、Materials Studio を用いて、金基板上での Z 型分子の吸着構造について計算を行った。これらの吸着構造の予測より最適なものを選び、分子を合成し、2Z-CVD で前駆体高分子の合成を行ったところ、前駆体高分子が金基板上に生成し、Materials Studio を用いた金基板上への分子吸着構造の予測は有用であることが明らかとなった。

Ref.

- [1] Width-Controlled Sub-Nanometer Graphene Nanoribbon Films Synthesized by Radical-Polymerized Chemical Vapor Deposition, *Adv. Mater.*, **2014**, 26, 4134.
- [2] Homochiral polymerization-driven selective growth of graphene nanoribbons, H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, *Nat. Chem.*, **2017**, 9(1), 57-63.