

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

グラフェンナノリボン (GNR) は、グラフェンを短冊状に切り出したナノ炭素材料であり、分子幅やエッジ構造に依存した物性を示す。特に、優れた電子・磁気特性を有することから、次世代型の高機能材料として期待されている。我々は、GNR の幅およびエッジ構造を制御して合成するボトムアップ手法として、2 ゾーン気相成長 (2Z-CVD) 法を開発した[1]。さらに、独自に設計した Z 型前駆体分子を用いることで、アセン型 GNR の合成にも成功している[2]。

我々が開発した Z 型分子の特徴は、剛直でありながら柔軟性も兼ね備えている点である。金属基板上に吸着した際、分子は変形し、アキラル構造からキラル構造へと変化する。このキラル構造は Head-to-Tail 型の重合反応に適しており、高効率な重合反応を実現する要因となっている。前駆体分子の金属基板上での吸着構造を正確に予測することで、新規 Z 型分子の設計指針を得ることが可能となる。Materials Studio を用いた吸着構造のシミュレーションを基に最適な分子を選定し、実際に合成を行った。その後、2Z-CVD 法を用いた前駆体高分子の合成を試みた結果、金基板上に前駆体高分子の生成を確認した。さらに、STM 測定によって、非対称構造を持つ前駆体高分子の合成に成功したことが明らかとなった。また、我々が独自開発した低温脱水素縮環法 (Molecular Vapor-assisted Low Temperature Growth, MVLTG 法) を適用することで、置換基の分解を伴わずに GNR への変換を実現した[3][4]。今回、新たに片側にジグザグエッジを持つ非対称型 GNR の合成に成功し、世界で初めて強磁性 GNR の作製を達成した[5]。

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.
- [3] T. Kojima, K. Patel, S. Nobusue, A. Mahmoud, C. Xie, T. Nakae, S. Kawai, K. Fukami, H. Sakaguchi, *Adv. Mater. Interfaces*, **2023**, 10 (23), 2300214.
- [4] T. Kojima, C. Xie, K. Patel, S. Nobusue, K. Fukami, H. Sakaguchi*, *J. Phys. Chem. C*, **2023**, 127 (22), 10541.
- [5] S. Song, Y. Teng, W. Tang, Z. Xu, Y. He, J. Ruan, T. Kojima, W. Hu, F. J. Giessibl, H. Sakaguchi, S. G. Louie, J. Lu, *Nature* 2025, DOI: 10.1038/s41586-024-08296-x.