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，シリコンを凌駕する低消費電力・高性能の次世代半導体材料として期待されている。極細分子幅・エッジ構造を制御する有機分子原料を用いる GNR 合成法として，我々は 2 ゾ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．[1]

2Z-RPCVD 法を用いて合成する新規 GNR の構造解析には，ラマン分光の実験結果と理論計算による解析が不可欠である。このため，既知の GNR のラマンスペクトルを理論計算により求め，構造評価の妥当性を評価した。アームチェア型 GNR である Poly(perianthracene)の周期構造分子モデルを Materials Studio Visualizer で構築し，計算パッケージとして CASTEP を用い，スーパーコンピュータラボラトリの計算機資源を活用し構造最適化，ラマンスペクトル計算を行った。理論的に得たラマンスペクトルは，実験結果をよく再現した(Figure 1)。

2Z-RPCVD 法により合成する新規 GNR 材料の実験的ラマンスペクトルの同定を，理論計算により求めるラマンスペクトルの比較により構造解析を行い，その電子状態と特性に関する解析を進めている。

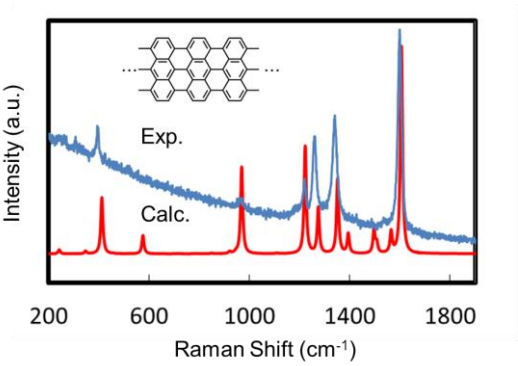

Figure 1. Experimental (blue line) and calculated Raman spectra (red line) of poly(perianthracene). Inset: molecular structure of poly(perianthracene).

参考文献　[1] H. Sakaguchi, Y. Kawagoe, Y. Hirano, T. Iruka, M. Yano, T. Nakae, *Adv. Mater.* 26(24), 4134-4138 (2014).
発表論文（謝辞あり） H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, submitted.