

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 の表面合成に成功している。[2] 今回我々は2Z-CVD 法で合成した高密度自己組織化アセン型 GNR の分子間反応により、規則的空孔を有する2D ネットワーク、グラフェンナノリボンネットワークの合成を行い、走査トンネル顕微鏡を用いてその構造の直接観察に成功した。この材料は従来のグラフェンに対して、電気伝導度を保ちつつ、規則的空孔による効果的なフォノンの散乱により、熱伝導性を低く抑えられることが理論的に予想された。膜に垂直方向の電気伝導度が 188 Sm^{-1} と高いにもかかわらず、熱電導度は $0.11 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ と低く、この材料が熱電材料として有用であることを明らかにした。[3] これらの研究で、Z 型分子の反応メカニズムを明らかにするため、Z 型分子の金属基板上での吸着構造に着目して Materials Studio の吸着シミュレーション、QM/MM 計算を行った。計算より、金(111)上に吸着した Z 型分子はアキラルからキラル構造に変形して、重合反応に最適な構造となることが明らかとなった。この吸着構造が GNR の前駆体高分子形成に大きく影響していることが示唆される。この結果を基に新たな GNR 合成のための分子デザインに反映させていく予定である。

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] Bottom-Up On-Surface Synthesis of Two-Dimensional Graphene Nanoribbon Networks and Their Thermoelectric Properties, *Chem. Asian J.*, **2019**, 14, 4400-4407.