

# 生物を模倣した新触媒反応を用い機能性炭素細線の開発に成功

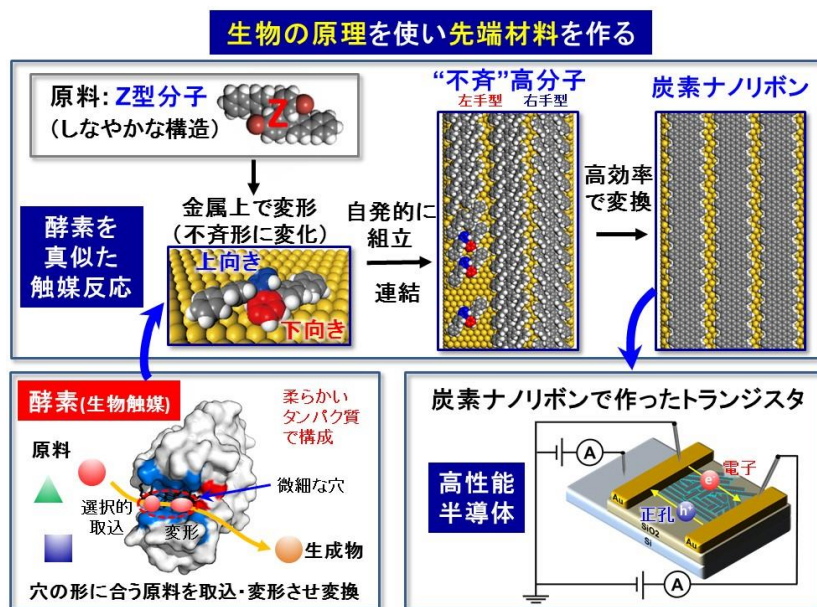
## —生物の原理を利用した物作り—

### 概要

京都大学エネルギー理工学研究所の坂口浩司 教授らの研究グループは、生物を模倣した従来に無い触媒反応<sup>(注1)</sup>を開発し、エネルギー・半導体応用が期待される機能性炭素細線（炭素ナノリボン）<sup>(注2)</sup>の合成に成功しました。合成された新種の炭素ナノリボンは優れた電気特性を持ち、次世代半導体材料や太陽電池としての応用が期待されます。

従来の炭素ナノリボン合成法では、原料分子を超高真空中で高温に熱した金属基板に吹きかけて化学反応させる超高真空ボトムアップ合成法<sup>(注3)</sup>が用いられてきました。しかし「単純な構造を持つ原料分子」では成功するものの、優れた電子機能が理論予測された新種の炭素ナノリボンを作るために必要な「複雑な構造を持つ原料分子」では、化学反応を妨げる“乱れた高分子”を形成するため未成功でした。

今回開発した「生物模倣型触媒反応」では、“Z 文字”の形をした複雑な形を持つ原料分子を設計し、我々が開発した2ゾーン化学気相成長法<sup>(注4)</sup>を用いることで、懸案の問題を解決しました。本方法のポイントは、原料分子が金属上で“特殊な形（不斉）”<sup>(注5)</sup>に変形し、自発的に形を識別して“直線に整列した高分子（不斉高分子）”に自発的に組み上がり、高い効率で新種の炭素ナノリボンに変換する酵素<sup>(注6)</sup>類似の触媒反応を開発した点です。この新種の炭素ナノリボンは、高いキャリア移動度<sup>(注7)</sup>を示し、優れた半導体特性を示すことが明らかになりました。本成果は英科学誌 *Nature Chemistry* のオンライン版に日本時間9月27日（火）午前0時に掲載されました。



### 1. 背景

炭素材料は、電気を流し易く高い強度を持つ優れた構造材料（例えば炭素繊維）として知られています。現在主流のシリコンに代わる半導体材料、太陽電池、電子素子などのエネルギー、電子分野への次世代応用が期待されていますが、その実現には細線状のナノ物質（炭素ナノリボン）が重要と考えられています。炭素ナノリボンを合成する最も有望な方法は、原料分子を基板上で組み立てて作るボトムアップ法です。従来に報告された例では、「単純な構造の原料分子」が用いられ、限られた構造の炭素ナノリボン

しか合成できませんでした。更に理論的に優れた半導体性能が予測されている“アセン型”炭素ナノリボンを生成可能と考えられてきた「複雑な構造の原料分子」では、金属上で乱れた高分子構造を取るため炭素ナノリボンへの変換反応が困難という問題がありました。



## 2. 研究手法・成果

上記課題を解決するため、新しいボトムアップ合成法として「生物模倣型触媒反応」を開発しました。本手法の原理は“Z文字”の形に設計した複雑な構造を持つ原料分子（Z型分子）を高温に熱した金属基板に我々が開発した2ゾーン化学気相成長法を用いて吹きかけることがポイントです。Z型分子は、ベンゼン環（炭素六角形）が“Z文字型”に連結した複雑な構造を持っているにもかかわらず、中心に二つの“蝶つがい”部を有するため柔軟性と剛直性を両立させたしなやかな構造を持つことが特徴です。

金属基板に吹きかけられた高密度の原料分子は、“二つの蝶つがい”が上下に歪んだ特殊な非対称形（不斉）に変形し、自発的に形を識別して“直線的に整列した不斉高分子”に組み上がり、従来合成困難であった“アセン型”炭素ナノリボンに高効率に変換することに成功しました。この新種の炭素ナノリボンは、アモルファスシリコン並みの高いキャリア移動度を示し、優れた半導体特性を示すことが明らかになりました。

また、本研究で開発した表面触媒反応は、分子の形を識別し無数の化学反応の中から最適の経路を見つける生物触媒（酵素）に酷似しています。従来、“硬い”金属表面は、アンモニア合成などの触媒として工業利用されており、金属表面は吸着した原料分子から電子の授受を行って結合の切断や組換え等の化学反応を起こす、言わば“荒業”がそのメカニズムだと考えられてきましたが、本研究で見出された金属表面で起きる触媒反応は、柔らかい生物と同等の機構で金属表面上の分子を変形、形を認識して“マイルドに”化学反応を起こすと言う、従来の定説を覆す現象であり、学術的にも大きな興味を持たれます。

### 3. 波及効果、今後の予定

今回の成果は、「生物の原理を利用して先端機能材料を作る」という生物、材料科学の全く異なる二つの分野を結びつける新しいコンセプトに基づく研究であり、今後様々な種類の機能性炭素ナノリボンの合成が達成され、次世代半導体やエネルギー分野での応用研究が飛躍的に加速するものと期待されます。また、本研究で見出された新しい表面触媒反応は、従来の定説を覆す概念であり、新たな学術分野の展開が期待されます。今後は、「生物模倣型触媒反応」を進展させ、未踏の炭素ナノリボンの合成と機能評価、特に磁性機能を目指した新しい炭素材料の開発に取り組む予定です。

### 4. 研究プロジェクトについて

本研究は、文科省科研費新学術領域研究「分子アーキテクニクス」、「π造形」のサポートを受けました。

#### ■＜用語解説＞

##### 注1) 触媒

触媒とは、原料物質から生成物を産み出す化学反応の反応速度を速める物質や固体表面を指し、自身は反応の前後で変化しないものと定義される。溶液中に溶かして用いる分子状物質（均一系触媒）、固体表面（不均一系触媒）などの人工系触媒と生物系触媒（酵素）に分類される。

##### 注2) 炭素ナノリボン

炭素六員環2次元シート構造であるグラフェン切り出してリボン(短冊)状に1次元化した物質。炭素ナノリボンの切り出し方向、エッジ(端)構造に依存して、金属、半導体、磁石にもなるという特異な性質を持つ。エッジ(端)の構造によりアームチェア型、アセン型、ジグザグ型に分類される。

##### 注3) 超高真空ボトムアップ合成法

ボトムアップ合成法とは、原料分子を組み立てて、望みの物質や構造を作成する方法の総称(下から上へ)。超高真空ボトムアップ合成法は、原料分子を超高真空中で高温に熱した金属基板に吹きかけて化学反応を起こさせ、ラジカル、高分子、炭素ナノリボンへと変換させる従来法。発生するラジカル密度が小さく、高額な機器を必要とするため汎用性に乏しい。

##### 注4) 2ゾーン化学気相成長法

化学気相成長法とは、気相中で原料物質を気化して、加熱した基板上へ送り化学反応を起こさせ望みの材料を合成する方法。2ゾーン化学気相成長法は我々が開発した方法であり、原料分子からラジカルを発生させるゾーン1とラジカルを基板に供給して高分子を作り炭素ナノリボンへと変換するゾーン2を独立に温度制御することで、従来法では低密度にしか生成できなかったラジカルを高密度に発生させ、高い収率で合成する方法。低真空下で合成可能であり、非常に安価な装置を使うため汎用性が高い。

##### 注5) 不斉(キラル)

鏡に映した形が元の形と重ならない非対称な物質の立体構造。右手型と左手型を持つ。生物ではアミノ酸や糖など不斉を持つ右手系分子と左手系分子の内、片方の不斉分子だけが使われる(単一不斉)。

注6) 酵素

たんぱく質でできた生物触媒。生体内で起こる化学反応を進行させる。酵素の立体構造中には“微細な穴”が存在し、穴の形に合った形を持つ物質だけを取り込み、反応に適した形状に変化させて触媒反応を体温程度で効率良く行うと考えられている。

注7) キャリア移動度

半導体材料中をキャリア（電子や正孔）が単位時間・電界内に走るスピード。大きな値ほど性能が高い。

<論文タイトルと著者>

タイトル： Homochiral-polymerization-driven selective growth of graphene nanoribbons

（単一不斉重合反応により駆動される炭素ナノリボンの選択的成長）

著者： Hiroshi Sakaguchi, Shaotang Song, Takahiro Kojima, Takahiro Nakae

掲載誌： Nature Chemistry（ネイチャー・ケミストリー）