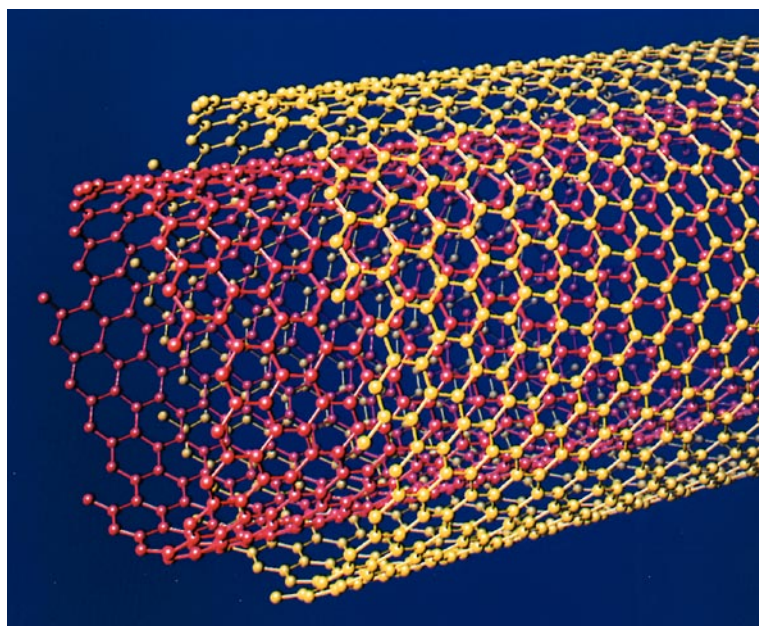


Cooperative Research of Creation and
Elucidation of Novel Characteristics of
Nano-size Molecular Systems

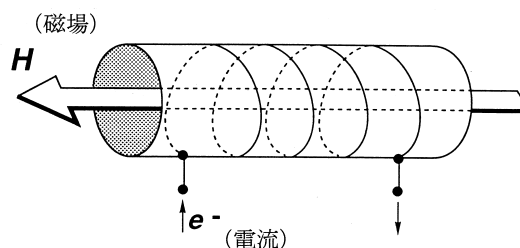
ナノサイズ分子系の特異性の開発に関する共同研究

プロジェクトリーダー 山 邊 時 雄

(財)基礎化学研究所 研究担当理事



カーボンナノチューブ



カーボンナノチューブによる
分子ソレノイドモデル

1. 研究の目的

新物質創製のキーテクノロジーは、作製時の表面・界面におけるナノ (10^{-7} cmの分子レベルのサイズ) 構造の原子スケールでの制御にあります。近年、巨視的な物質と微視的な物質の中間に位置づけられるメソスコピック系として、カーボンナノチューブ、アモルファスカーボン、ポーラスシリコン等のナノサイズ分子材料に関して、多くの興味と期待が寄せられています。特に、これらナノ構造の形成過程およびそれらの表面・界面における相互作用やダイナミクスの形態などは、しばしばこれまでの概念や知識では理解できない極めて特異な性質を示すことがあるのです。これらの材料の特異な機能は、主としてそのサイズ効果および表面・界面構造の電子状態とダイナミクスに由来していると考えられ、このような分子材料の特異な物性を量子論的アプローチに基づいて制御すれば、従来の材料には見られない電磁氣的・光学的性質を有する新規材料が創製される可能性があります。

本研究の目的は、特にこれらのナノサイズの構造が示す特異な性質に焦点を絞り、その現象の解明に重きをおくと共に、特異な性質を理論的に予測し、さらに原子スケールからの制御に基づいてこれらの分子材料の設計・開発を行い、21世紀の我国の高度基盤技術に資することのできる新規材料の創製を目指しています。

2. 研究の内容

(i) カーボンナノチューブの作製ならびに精製法の確立と電子物性

カーボンナノチューブは炭素を骨格とした新しい1次元電子材料として期待されています。我々はまずカーボンナノチューブの作製と精製法を確立し、その生成機構について理論と実験の両面から解析を行ってゆきたいと考えています。さらにこれらナノサイズの炭素チューブの電子物性とその磁場効果を測定し、理論と比較することによってそれらが示すと予測されている極めて特異な電子物性を解明することを考えています。

(ii) ナノサイズ表面・界面ダイナミクス

シリコンあるいは炭素集合系においては特殊なナノサイズの構造欠陥を生じることがしばしばあります。これらが示す特異な電子状態や動的挙動をコンピュータを用いて理論的に予測し、さらにそれらと原子・分子との相互作用の解析を行っています。またナノサイズ空間に閉じこめられた金属系の特殊な電子状態についても理論的に研究しています。

(iii) ナノサイズ炭素集合系におけるアルカリ金属の動的挙動

ナノサイズ炭素集合系や金属酸化物・硫化物におけるアルカリ金属の動的挙動をNMR、ESR等によって解明し、それらの特異な性質を利用して高性能2次電池の開発を目指しています。その他、燃料電池の作用機構の解明等も行っています。

(iv) 多層積層ナノスケール超格子構造におけるハイブリッド機能界面の光・電子物性

性質の大きく異なる複数の導電性高分子、導電性高分子とフラーレン、さらには導電性高分子と無機物質を分子状あるいはクラスターとしてナノスケールで複合化した分子系およびこれらをオングストロームオーダーで積層した多層積層超格子構造におけるハイブリッド機能界面の電子的、光学的、磁氣的性質の解明を行っています。

(v) ナノサイズ分子系の光物性

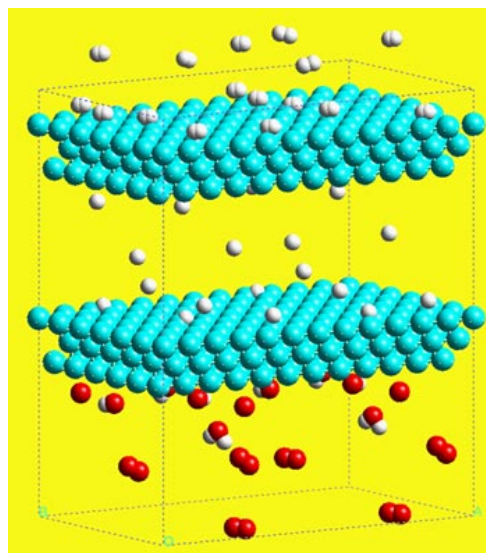
種々のナノサイズ分子性グラファイト（グラフェン: graphene）を合成し、光物性を測定することから、高効率太陽電池としての可能性を探っています。また、ケイ素と種々の π -電子系とを規則正しく交互に含む球状分子（ dendrimer ）の作製とこの新規機能性材料の表面・界面における光・電子物性の解明も行っています。

3. 研究の体制

期 間：1996年4月～2001年3月

構 成：プロジェクトリーダー1名、コアメンバー3名、研究協力者21名で構成されています。この他、下記の大学研究室に属する大学院学生が多数この研究に参加しています。

実施場所：この研究の主拠点は基礎化学研究所ですが、他に大阪大学工学研究科電子工学専攻吉野研究室、倉敷芸術科学大学機能物質化学科石川研究室、小林研究室及び三重大学工学部分子素材工学科佐藤研究室、また関連する研究を行っている企業とも緊密な連絡を取って、弾力的にプロジェクトを進めています。



燃料電池の作用機構の解明