

【基盤研究(S)】

大区分E



研究課題名 ポストナノカーボン科学：ナノ π 空間の精密構造科学

東京大学・大学院理学系研究科・教授

いそべ ひろゆき

磯部 寛之

研究課題番号： 20H05672 研究者番号：30302805

キーワード： ナノカーボン、有機合成化学、物理有機化学、巨大分子、湾曲 π 共役

【研究の背景・目的】

「ナノカーボンの科学」は、フラーレン (1985)、カーボンナノチューブ (1991)、グラフェン (2004) の発見に端を発す。現在、とくに、巨大なナノカーボンであるナノチューブやグラフェンに寄せられる期待が高まっているが、これらの物質には「分子構造が明確になっていない」という大きな問題がある。これらの巨大ナノカーボンは単一の分子性物質ではなく「混合物 (=化学種)」なのである。

本研究は、明確・一義な構造を持つ新しいナノカーボン分子を設計・合成し、その特性解明に基づく機能開拓を目指すものである。「大きく曲がった π 電子系の特性とはなにか？」を根源的な問いに据え、「新分子・新物質創造」によりその解を追い求めるものである。さらにそこで得られた解を、単に化学分野のみでの理解・価値とするのではなく、広く異分野を含めた視野で捉え、「機能性」という価値に読み替えることを目指す。

【研究の方法】

本研究課題では、以下の3項目を検討項目とし、その三つ巴の研究展開により、「分子性ナノカーボンの科学」を飛躍的に発展させる。

① 多様構造の創造。我々がこれまでに遂行してきたナノカーボン分子合成研究の最大の特徴は、「簡便かつ極めて汎用性の高い分子設計法」にある (図1)。例えば我々が開発した「フェナイン = 1,3,5-三置換ベンゼン」を基本要素とする「ジオデシックフェナインフレームワーク (GPF)」という設計により多様なナノカーボン分子を合成する。とくにその基本骨格としては単純な組成をもつ炭化水素を中心とする。

② 基本特性の解明。「新分子の構造解析」を基本とし、ナノカーボン分子の基本特性の解明を行う。現代の構造解析法を広く活用し、理論化学・計算化学手法を合わせた解析を進める。基本的な先端解析法を新奇分子に当てはめることで、新しい理解・深い理解につなげるものである。

③ 機能性への展開。「大きく曲がった π 電子系の特異な基本特性」を機能性へと展開する。ごく最近、我々は「固体内で、 C_{60} 分子が慣性回転する」ことを見出している。1 ナノメートルサイズの球状分子が、固体中、筒状ホスト内で、200 GHz を超える回転周波数で回転するのである。この超高速回転体を利用した機能性分子機械の開発が本項目の検討内容の一例である。

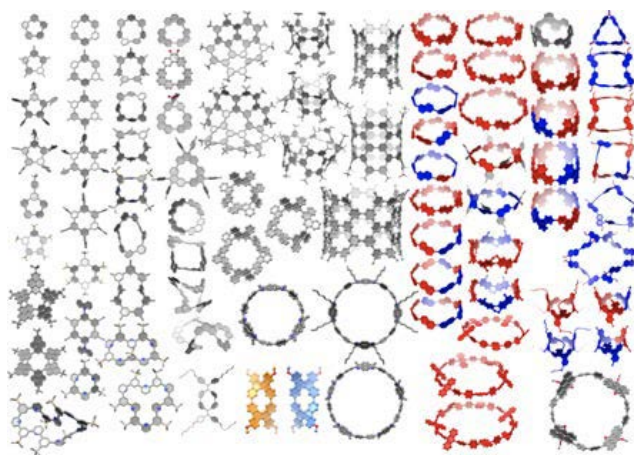


図1. これまでに合成したナノカーボン分子の代表例.

【期待される成果と意義】

カーボンナノチューブ・グラフェンといった巨大なナノカーボン類に対し、明確・一義的な分子構造に基づいた、原子レベル精度の構造論をもたらすことで、新しい特性の発見と理解の深化が望めることは間違いない。本課題終了時には、多様構造の創造・基本特性の解明・機能性への展開という3項目の検討を通して、多種多様な分子構造に基づきナノカーボン分子の特異性・機能性を理解し、以て、次世代の機能物質・材料の設計が可能となるものと考えている。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ "Ratchet-free solid-state inertial rotation of a guest ball in a tight tubular host" Matsuno, T.; Nakai, Y.; Sato, S.; Maniwa, Y.; Isobe, H. *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 1907.
- ・ "Finite phenine nanotubes with periodic vacancy defects" Sun, Z.; Ikemoto, K.; Fukunaga, T. M.; Koretsune, T.; Arita, R.; Sato, S.; Isobe, H. *Science* **2019**, *363*, 151-155.

【研究期間と研究経費】

令和2年度～6年度 149,800千円

【ホームページ等】

<https://physorg.chem.s.u-tokyo.ac.jp/>
isobe@chem.s.u-tokyo.ac.jp