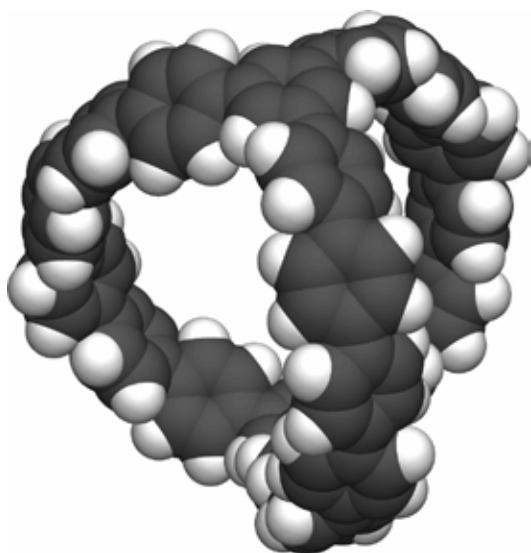


カーボンナノケージ：全く新しい「かご状」炭素ナノ分子の合成に世界で初めて成功

名古屋大学の伊丹健一郎教授らは、120 個の炭素原子と 78 個の水素原子からなる「かご状」炭素ナノ分子、カーボンナノケージの合成に世界で初めて成功した。カーボンナノケージは 20 個のベンゼンがかご状に配置した極めて美しい分子である。また、カーボンナノケージが光を吸収し発光するという点において極めて優れた特性（高い蛍光効率と二光子吸収特性）を有することが、産業技術総合研究所 ユビキタスエネルギー研究部門（鎌田賢司主任研究員）との共同研究によって明らかとなった。さらに、カーボンナノケージは分岐型カーボンナノチューブの接合ユニットであるという構造的特徴ももち、カーボンナノチューブの精密ボトムアップ合成を目指す研究に不可欠な分子である。このように様々な構造的特徴と物性を併せもつカーボンナノケージは、有機エレクトロニクスやバイオイメージング分野における全く新しい鍵分子となる可能性をもつ。

カーボンナノケージ 全く新しい炭素ナノ分子の登場



構造的特徴

- ・ 炭素原子と水素原子のみから構成 ($C_{120}H_{78}$)
- ・ ベンゼンが20個 かご状に配置した美しい分子
- ・ ゲスト分子を取り込む1.8ナノメートルの空間
- ・ 分岐型カーボンナノチューブの接合ユニット

特徴ある物性

- ・ 白色固体でほとんどの有機溶媒によく溶ける
- ・ 300°C以上でも分解しない
- ・ 光を効果的に吸収する（1光子吸収，2光子吸収）
- ・ 強い青色蛍光をもつ（蛍光量子収率：87%）

様々な応用展開の可能性

有機EL材料、有機トランジスタ材料、光記録材料、高密度光ストレージ、生体分子の蛍光イメージング、ゲスト分子の光センサー、分岐型カーボンナノチューブの精密化学合成

本研究成果は、英国化学会誌「ケミカルサイエンス誌」(Chemical Science) のオンライン版で 2012 年 8 月 27 日に公開される予定である。

【研究の背景、経緯、内容】

伊丹教授らのグループは、ベンゼンをリング状につないだ分子であるカーボンナノリングの合成を 2009 年に報告し、この分野で世界をリードしている。カーボンナノリングは炭素原子と水素原子のみからなる分子であり、本来平面であるベンゼンがリング状にひずんでいることから合成は困難であった。独自の手法により合成段階におけるひずみの解消に成功したことで、これまでに様々な大きさや形状のカーボンナノリングの合成を可能にしている。カーボンナノリングは直線型カーボンナノチューブの最短部分骨格であり、太さや側面構造を制御した純正カーボンナノチューブの完全化学合成に向けた理想的なビルディングブロックである。

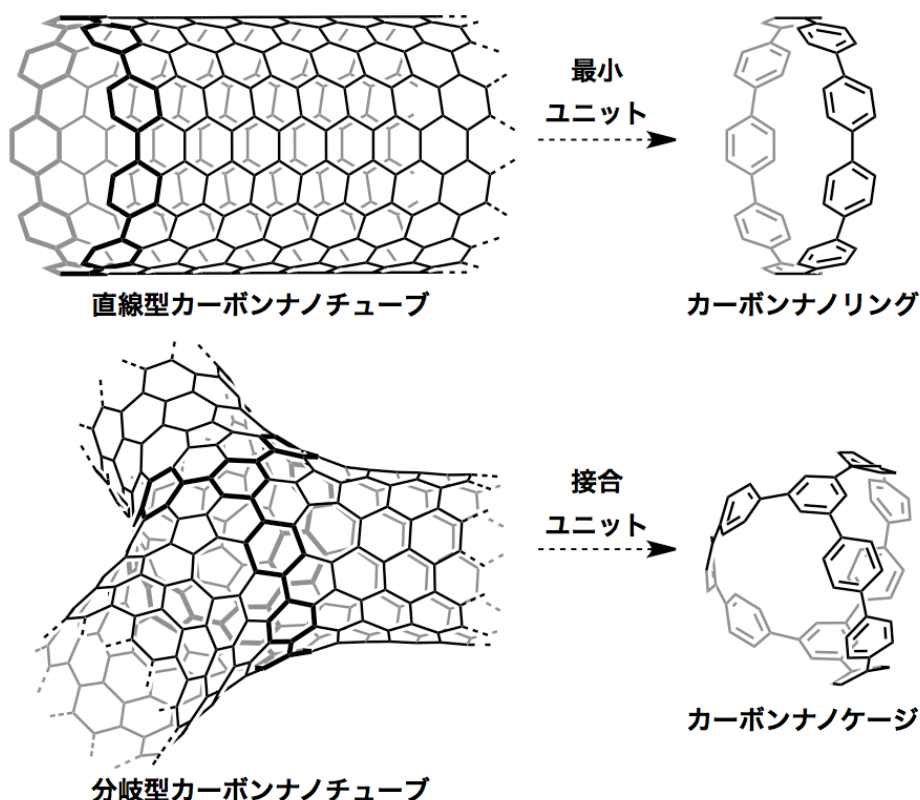


図 1：カーボンナノチューブとその部分構造

今回、伊丹教授らのグループ（松井克磨（修士 2 年）、瀬川泰知（助教））は、ベンゼン 20 個からなるかご状分子「カーボンナノケージ」の合成に世界で初めて成功した。カーボンナノケージは、カーボンナノリングと同様に本来平面であるベンゼンが弧を描くように曲がっており、ひずみが生じている。カーボンナノリングの合成手法を応用することでこのひずみを解消し、カーボンナノケージの合成を達成した。具体的には、図 2 に示すように、L 字型のユニットと三叉のユニットを鈴木・宮浦カップリング（2010 年ノーベル賞）などの遷移金属触媒反応によって組み合わせ、ひずみのない箱状の前駆体化合物をまず合成した。最後に L 字のカドに使用しているシクロヘキサン部位を芳香族化反応によってベンゼン環に変換することで、一様に湾曲したアーチを 3 本もつカーボンナノケージを合成した（図 2）。

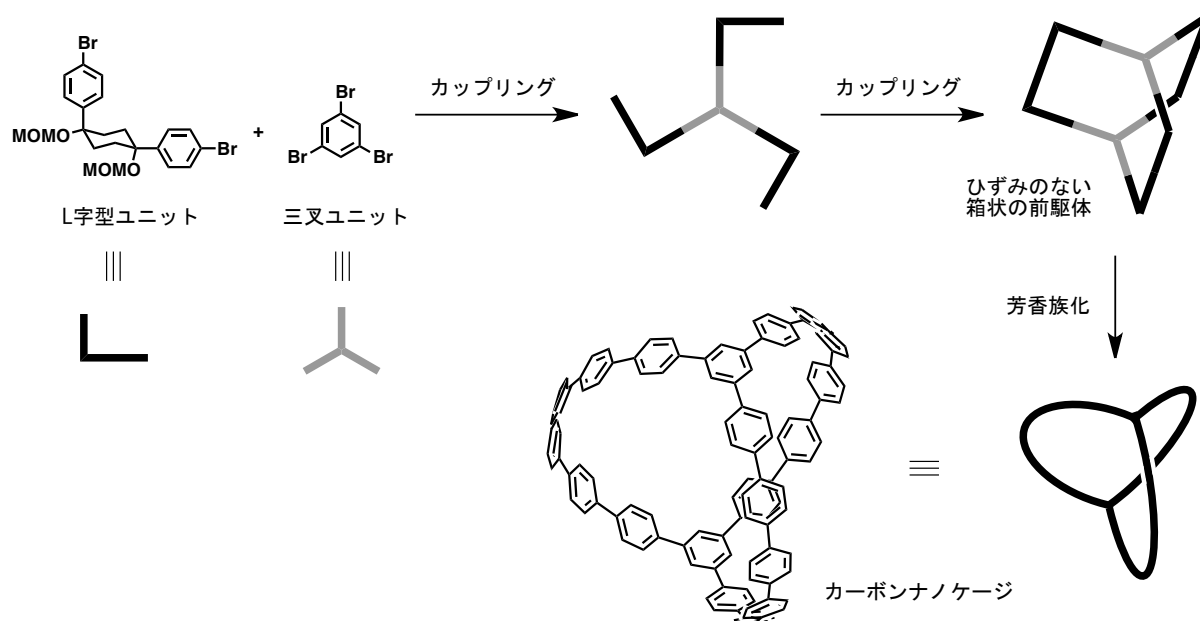


図 2：カーボンナノケージの合成経路

今回合成したカーボンナノケージは、120 個の炭素原子と 78 個の水素原子からなるかご状化合物である。白色固体でほとんどの有機溶媒によく溶け、また 300℃以上でも分解しないという非常に取り扱い易い性質をもつ。ケージの中心部に直径 1.8 ナノメートルの球状のナノ空間を有していることから、ゲスト分子の取り込みが可能となる。またカーボンナノケージの光物性は産業技術総合研究所 ユビキタスエネルギー研究部門（鎌田賢司主任研究員）との共同研究によって詳細に明らかにされており、1 光子吸収、2 光子吸収ともに効率的に起こることや溶液中において強い青色の蛍光を発すること（蛍光量子収率：87%）が確認されている。

このような特徴的な光物性および構造的特徴のため、カーボンナノケージは有機 EL 材料、有機トランジスタ材料、光記録材料、高密度光ストレージ、生体分子の蛍光イメージング、またゲスト分子の光センサーといった広範囲に渡る分野への応用展開の可能性をもつ。さらに、カーボンナノケージは分岐型カーボンナノチューブの接合ユニットに相当する。分岐型カーボンナノチューブは最小のトランジスタや論理ゲートとしてエレクトロニクス分野への応用が非常に期待されている材料であり、カーボンナノケージはその精密ボトムアップ合成を可能にする理想的な部品であると考えられる。

【まとめと今後の展望】

ベンゼン 20 個からなるかご状分子「カーボンナノケージ」の合成に成功した。カーボンナノケージはそれ自体が非常にユニークな光物性や構造的特徴を有し、有機 EL、有機トランジスタ、各種光機能材料への応用や、内部のナノ空間を利用したゲスト光センサーなどへの展開が可能である。さらに、エレクトロニクス分野において非常に注目を集める次世代材料である分岐型カーボンナノチューブの精密合成へ向けた大きな一歩を踏み出した。これらの産業界における期待は極めて大きく、今回の全く新しい炭素ナノ分子の登場は各方面に大きな波及効果をもたらすだろう。

【掲載雑誌名、論文名、著者】

掲載雑誌：Chemical Science (ケミカルサイエンス、英国化学会誌)

論文名：“Synthesis and Properties of Benzene Carbon Nanocages: A Junction Unit of Branched Carbon Nanotubes” (ベンゼンのみからなるカーボンナノケージの合成と性質：分岐型カーボンナノチューブの接合ユニット)

著者：Katsuma Matsui, Yasutomo Segawa, Tomotaka Namikawa, Kenji Kamada and Kenichiro Itami
(松井克磨、瀬川泰知、並河知孝、鎌田賢司、伊丹健一郎)