

燃える炎の中で成長するカーボンナノチューブ

量子理論の計算により、カーボンナノチューブの成長と炭化水素の燃焼が起こる過程に類似性があることを初めて見出した。

名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所(WPI-ITbM)のStephan Irle教授は京都大学、米国のOak Ridge National Lab (ORNL)、中国の研究機関の研究者との共同研究によって、カーボンナノチューブの成長と炭化水素の燃焼プロセスに類似性があることを、量子理論を用いたコンピュータシミュレーションによって見出しました。本研究成果は、米国炭素協会の科学会誌「Carbon(カーボン)」のオンライン速報誌で公開されました。今回の研究は、今まで制御するのが難しかったカーボンナノチューブの合成、および炭化水素の燃焼プロセスへの理解を深めることに貢献するものと思われます。

カーボンナノチューブは、円柱型のナノ構造を持つ分子で(ナノ= 10^{-9} メートル または $1 / 1,000,000,000$ メートル)、その特異的な物性および化学的な性質から、エレクトロニクス、光工学および物質科学の分野に応用が期待されています。これまで、カーボンナノチューブは高温・不活性ガスの存在下で炭化水素ガスを遷移金属触媒の上で反応させる、化学蒸着法(CVD法)を用いて合成されてきました。しかしながら、CVDによって生成するカーボンナノチューブは、その直径や側面の構造を制御できない、という問題を有しています。今回、Irle教授らは、アセチレン分子(C_2H_2 、炭素と炭素の間に三重結合がある分子)を用い、カーボンナノチューブの成長をコンピュータシミュレーションで解析しました(図1)。

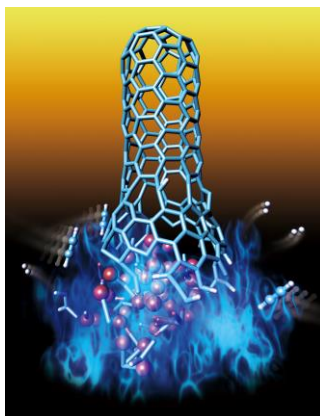


図1. カーボンナノチューブの合成

Irle教授らは、鉄(Fe_{38})の粒子とアセチレン分子を用いて、カーボンナノチューブが生成する反応をコンピュータでシミュレーションしました。これまでの研究では、炭化水素が完全に炭素原子に分解された後にカーボンナノチューブが形成される、と報告されていました。「私たちのシミュレーションによって、主にアセチレン同士の結合が、炭素原子への分解と共に、カーボンナノチューブの合成過程で起こっていることが分かりました」。また、「これらは、炭

素燃料の燃焼プロセスでよく見られる水素の引き抜き・アセチレン付加のメカニズムに似ていることが示唆されます」とIrle教授は語っています。

一般に燃焼のプロセスは、炭化水素から水素の引き抜き・生成したアセチレン付加が繰り返し起こることで、煤（すす）のもととなる多環芳香族炭化水素（ベンゼン環を2つ以上有する化合物）を生成していると考えられています。非常に反応性の高いアセチレンラジカル ($C_2H\cdot$) 中間体が継続的に生成され、多環芳香族炭化水素の成長を促し、すすが生成します。カーボンナノチューブの生成過程にも同様の中間体が確認され、アセチレンラジカルが触媒として働いています。さらに興味深いことに、水素を多く含む炭化水素はカーボンナノチューブ以外の副生成物を生成し、また、水素が少ない炭化水素はカーボンナノチューブを生成するということが、今回のシミュレーションによって明らかとなりました（図2）。

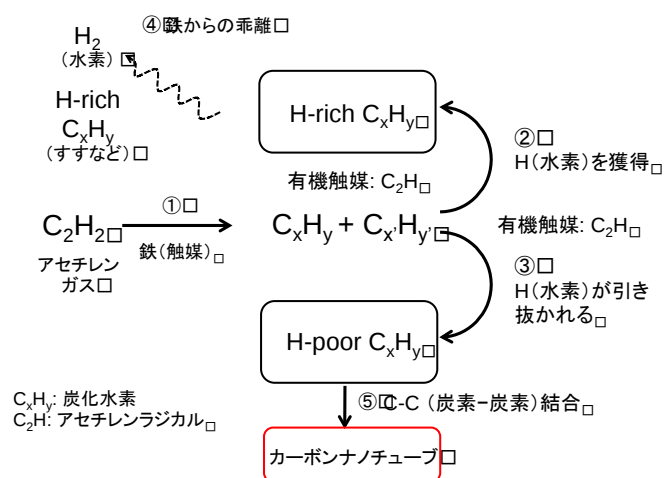


図2. カーボンナノチューブの合成機構

Irle教授によると、「この研究は、2000年から始まり、長いシミュレーション時間が大きな課題でありました。炭素と水素は比較的に強く結合するため、全ての分子をシミュレーションするのは非常に難しいことでした。より早い計算方法を確立することで、水素原子を計算に入れ、今回初めてカーボンナノチューブの合成と炭化水素の燃焼過程の類似性を見出すことができました。今回の成果の面白い点は、今まで全く異なると考えられていた燃焼とカーボンナノチューブの生成という2つのプロセスに共通点を見出すことができた、ということです。」

「私たちの研究によって、カーボンナノチューブの合成およびすすの生成を制御する新しい要素(水素量の調整など)を提案することができました。今後、更に早い計算ツールを開発することで、カーボンナノチューブの合成および化石燃料の燃焼プロセスをより深く理解するための可能性を模索していきたい」とIrle教授は考えています。

論文情報

“Quantum chemical simulations reveal acetylene-based growth mechanisms in the chemical vapor deposition synthesis of carbon nanotubes” by Ying Wang, Xingfa Gao, Hu-Jun Qian, Yasuhito Ohta, Xiaona Wu, Gyula Eres, Keiji Morokuma, Stephan Irle

掲載雑誌：Carbon **2014**, 72, 22-37

掲載日：2014年1月24日 DOI: 10.1016/j.carbon.2014.01.020

今回の研究は、名古屋大学およびChinese Academy of SciencesのYing Wang教授、Chinese Academy of SciencesのXingfa Gao教授、Jilin UniversityのHu-Jun Qian教授、京都大学の太田靖人氏（JSTフェロー）、名古屋大学のXiaona Wu 研究員、米国Oak Ridge National LaboratoryのGyula Eres教授、および京都大学・エモリー大学の諸熊奎治教授らの共同研究によって行われました。

WPI-ITbMについて (<http://www.itbm.nagoya-u.ac.jp/>)

文科省の世界トップレベル拠点プログラム(WPI)の一つとして採択された、名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所(ITbM)は、従来から名古屋大学の強みであった合成化学、動植物科学、理論科学を融合させることで研究を進めております。ITbMでは、精緻にデザインされた機能をもつ全く新しい生命機能の開発を目指しております。ITbMにおける研究は、化学者と生物学者が隣り合わせて研究し、融合研究を行うミックス・ラボという体制をとっております。このような「ミックス」をキーワードに、化学と生物学の融合領域に新たな研究分野を創出し、トランスフォーマティブ分子を通じて、社会が直面する環境問題、食料問題、医療儀実の発展といった様々な議題に取り組んでおります。