

【基盤研究(S)】

理工系（総合理工）



研究課題名 ナノスケールラボラトリーの創製と深化

京都大学・化学研究所・教授

むらた やすじろう
村田 靖次郎

研究課題番号：17H06119 研究者番号：40314273

研究分野：有機化学

キーワード：ナノカーボン

【研究の背景・目的】

通常有機化学反応は、ガラスや金属製の容器中、液体の溶媒に基質と試薬を混合することによって行われることが多い。このようなフラスコ中には、アボドガロ数程度の数の複数種類の分子が混在しており、例えば基質分子は、溶媒分子や試薬分子、ならびに基質分子同士と頻繁に衝突し、お互いに相互作用を受けている。このような複雑な状況の下、狙った化学反応を選択的に進行させることが、有機化学の目的の一つである。

しかし、一つの分子と別の分子の相互作用は必ずしも明らかとはなっていない。なぜなら、これまでの実験研究では、主に溶媒分子の存在下、多数の分子の平均的な挙動を観測しているのに留まっているからである。単分子の挙動を研究するためには高真空条件がしばしば用いられるが、この条件下（10⁻¹⁰ Torr, 22.4 mL）でさえ、6億個の気体分子が存在しており、分子間の相互作用を完全に排除することは困難である。

このような状況の下、本研究では、ナノメートルサイズのフラスコを自在に合成し、その中に1つあるいは2つの化学種を閉じ込めることによって、これまで知られていなかった分子科学における学理を明らかにすることを目的としている。外界から完全に孤立された単分子を実現させ、その性質や反応性を室温・溶液中で解明する。そのためには、適切な内部空間をもち、内側は化学的に不活性であり、かつ外部とのアクセスを完全に遮断できるナノスケールラボラトリーを創製する必要がある。

【研究の方法】

図1に示すように、炭素原子が球状に結合したクラスターであるフラーレンは、その内部に中空空間を有しており、これは小分子が存在するのに最適な大きさである。これまで、金属イオンや希ガス原子

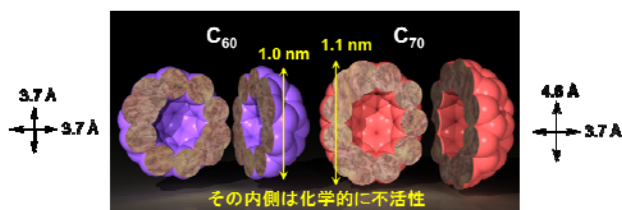


図1 フラーレン C₆₀ と C₇₀ の分子構造

がフラーレン内部に導入された化合物の合成法がいくつか知られているものの、閉じ込められる化学種の種類やフラーレン骨格の大きさに関して、高選択性と高効率を両立させる手法は無かった。本研究では、有機合成によりフラーレン骨格に開口部を構築し、そこから内部に小分子を導入し、その後、開口部を元通りに修復するという「分子手術」を行い、多彩な化学種を内包したフラーレンを自在に合成する手法を開発する。

閉じ込められる化学種としては、分子間相互作用を持たない単分子、電気双極子や磁気双極子を有する小分子、高反応性化学種、金属原子、ならびにこれらの組み合わせによる複数化学種を検討する。それぞれの化学種の内包に最適な開口部（大きさと官能基の種類、さらに閉じやすさ）を設計し、高効率な合成経路を確立させ、多彩なナノスケールラボラトリーを創製する。

【期待される成果と意義】

外界から完全に隔離された環境を利用することによって、これまで知られていなかった化学種を発生させ、溶液中室温条件下でその性質を明らかにすることが可能となる。よく知られたバルクの性質とは全く異なることが予想される孤立化学種の性質が解明され、分子間の弱い相互作用に関する研究も可能となる。このように、物質科学の新しい学理構築に大きな貢献を果たすことができる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ナノカーボンの科学—セレンディピティから始まった大発見の物語（ブルーバックス）、篠原久典、講談社（2007年）
- ・フラーレンとナノチューブの科学、篠原久典・齋藤弥八、名古屋大学出版会（2011年）

【研究期間と研究経費】

平成29年度—33年度 160,100千円

【ホームページ等】

<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~kouzou/>