

ナノカーボン材料の開発とその応用

Development and Application of Carbon Nanomaterials

キーワード：ナノ物質、非平衡場合成、シミュレーション / key words: nanomaterial, non-equilibrium synthesis, simulation

横井 裕之 准教授 Doc. of Eng. / **Hiroyuki YOKOI** Assoc. Prof., Doc. of Eng.

物質材料生命工学部門 機能材料設計学分野 / Research Field of Functional Materials Design, Division of Materials Science and Chemistry

E-mail : yokoihr@※ Tel : 096-342-3727 URL : <http://www.msre.kumamoto-u.ac.jp/~yokoi-gr/index-j.html>

●ナノカーボン物質の合成法と新規ナノ構造物質の開発

炭素は一重結合から三重結合までのさまざまな結合形態を取って、幅広くしかも構造によっては既存物質を凌駕する機能を発現できる。独自に開発した液面下化学気相合成法（サブマリン式基板加熱法）では急峻な温度勾配中でナノカーボン物質の合成が可能であり、2014年には新規のつぼ型ナノ物質「カーボンナノポット」の創製に成功した。カーボンナノポットには奥深い有底メソ孔と偏在密集したグラフェン端を持つなどの特徴があるため、それを活かして医療やエネルギー、環境などのさまざまな分野への応用に取り組んでいる。

●第一原理計算によるナノカーボン物質の構造と物性発現機構の解明

ナノカーボン物質はナノ構造の違いによって、電気・磁気・光学・化学・力学的に興味深い性質を発現する。その構造を特定して、物性発現のメカニズムを解明するために第一原理計算によるシミュレーションを活用している。これまでに、光還元により酸化グラフェンが磁性を持ち、新たな光吸収を示すことが共通のエネルギー構造変化に起因していることを明らかにしました。

Development of synthesis techniques of carbon nanomaterials and creation of materials with novel nanostructures : We have developed a submarine-style substrate heating chemical vapor deposition (CVD) technique, in which steep temperature gradients are generated in a synthesis chamber. This technique has enabled us to create a new carbon nanomaterial with a deep, dead-end mesopore and densely-localized distribution of graphene edges. We named it 'carbon nanopot' and are investigating its application to various fields including medical, energetic, and environmental ones.

Ab initio study of the structures of carbon nanomaterials and the mechanisms of their remarkable properties : We employ ab initio calculations to understand how the structures specific to each carbon nanomaterial could induce its remarkable properties.

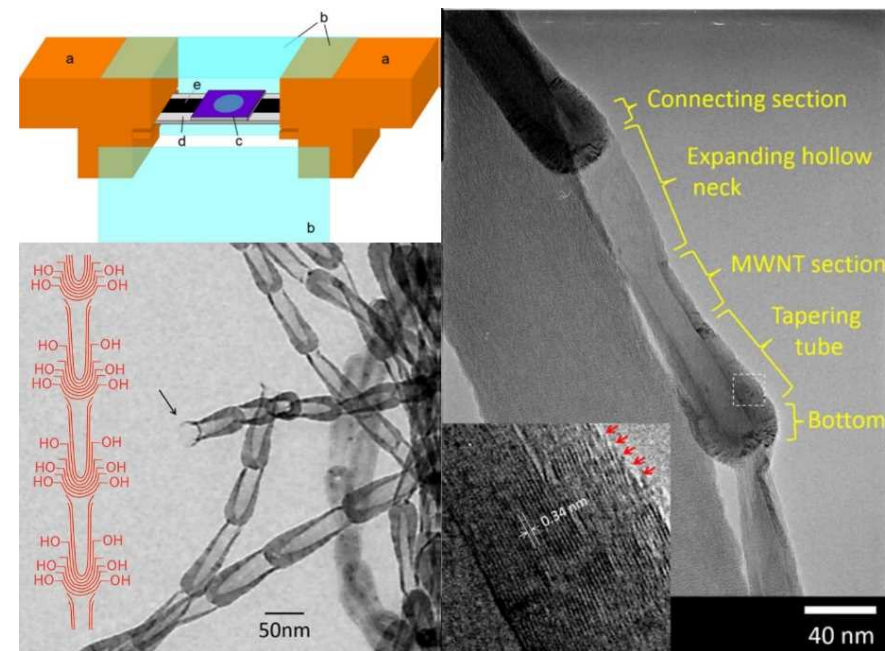


Figure 1 (Left top) Schematic of the synthesis chamber of the submarine-style CVD apparatus. (a) Electrodes, (b) borosilicate glass plates, (c) catalyst-loaded silicon substrate, (d) substrate support, and (e) carbon plate heater. (Left bottom) TEM image of carbon nanopot fibers. A schematic of a carbon nanopot fiber hydroxylated at the graphene edges is also exhibited. (Right) TEM image of carbon nanopots. The inset is a magnified view of the section indicated in the tapering tube part. The arrows point to the graphene edges. After H. Yokoi et al., *J. Mater. Res.* **31**, 117 (2016). (Cop.: Materials Research Society, Reprinted with permission)