

## 世界初 窒素ドーピング型ナノチューブ分子登場

東京大学大学院理学系研究科の磯部寛之教授の研究グループは、周期的に窒素原子が埋め込まれたナノチューブ分子(窒素ドーピング型ナノチューブ分子)の化学合成に世界で初めて成功しました。昨年、独自に開発したばかりのナノチューブ分子の化学合成法に、窒素原子を埋め込む工夫を新たに凝らした結果です。窒素ドーピング型炭素材料には、半導体利用などの応用研究において注目されています。

カーボンナノチューブやグラフェンなどのナノカーボンは、その発見以来、新材料として期待を集めています。ナノカーボンに、炭素以外の異種元素をドーピング(埋め込み)すると、物性を大きく変えられることから、その開発が注目されています。なかでも、窒素ドーピング型ナノカーボンの研究が盛んになっており、年間200報に迫る論文が発表されています。しかし、物理的な製造法を利用していることから、ナノカーボンに窒素原子の位置や数を制御しながら埋め込むことが不可能であったことが、新材料開発を阻むボトルネックとなってきました。

今回、研究グループは、窒素原子を特定の位置に特定の数だけ埋め込んだナノチューブ分子の化学合成に成功しました(図1、図2)。

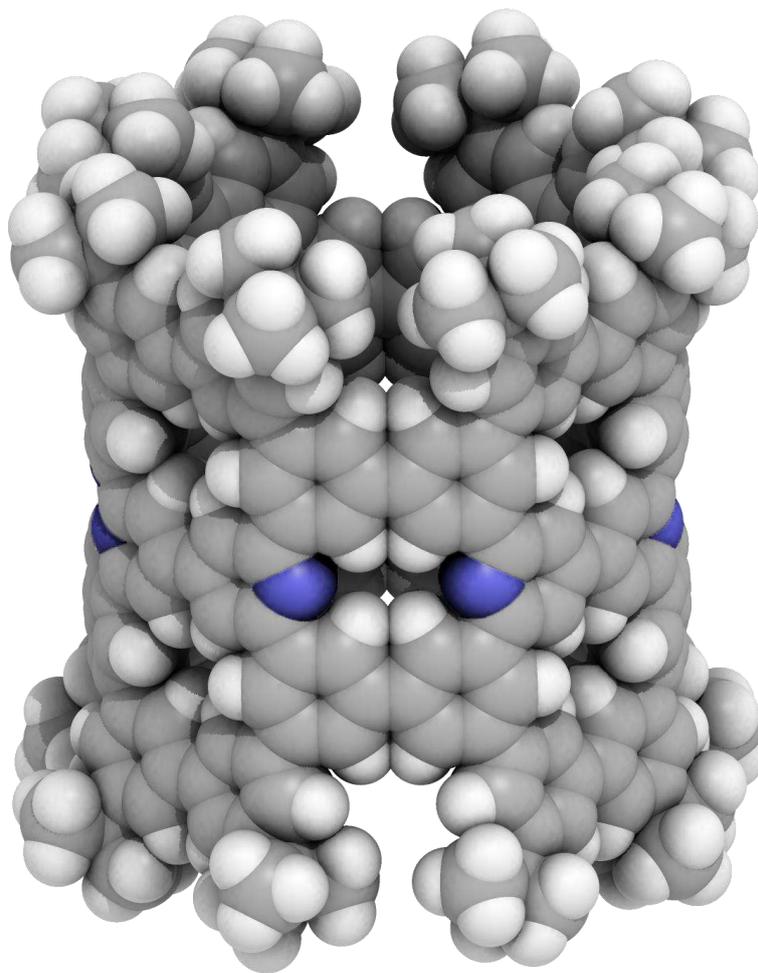


図1：窒素ドーピング型ナノチューブ分子の分子構造。青い部分が窒素原子。(結晶構造を横から見た図)

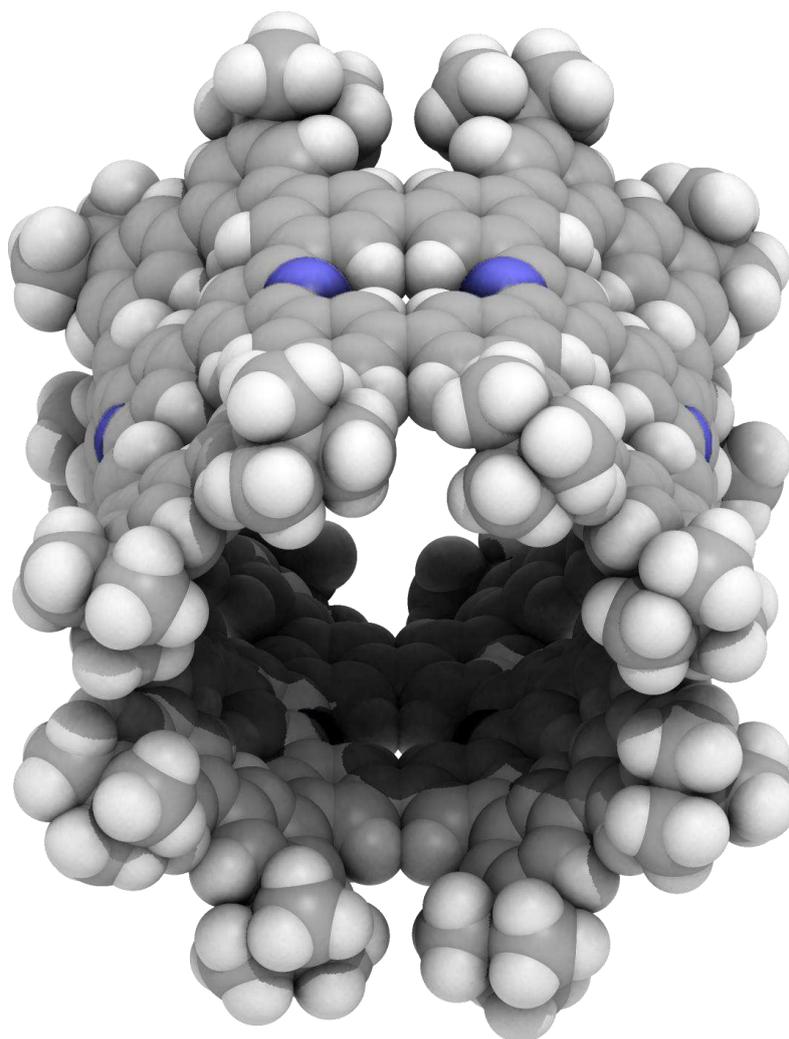


図 2：窒素ドーピング型ナノチューブ分子の分子構造。青い部分が窒素原子。（結晶構造を下から見た図）

2019年に独自に開発したナノチューブ分子化学合成法(<https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/2019/6191/>)に、新たに窒素原子を埋め込む工夫を凝らしました。これまでベンゼンを用いてきた化学合成法に、新たにピリジンを活用した成果です。本法により、ナノチューブ分子の 304 個の構成主原子のうち、8

個を窒素原子とすることができ、窒素原子の含有率を精確に 2.6%とすることができました。これまで材料科学分野で検討されてきた窒素ドープナノカーボンの窒素含有率は 2-5%の幅でした。本法で合成した窒素ドープナノチューブ分子は、その幅内に収まる窒素含有率を持っていることから、材料検討されてきた窒素ドープナノカーボンの電子的性質・化学的性質を正確に探るのに適した組成を持っていることとなります。

今回の研究では、また、最先端 X 線構造解析法により、窒素上の孤立電子対 (ローン・ペア) の存在を明確にし、さらに理論計算によりその電子的寄与を明らかにしました(図 3、図 4)。

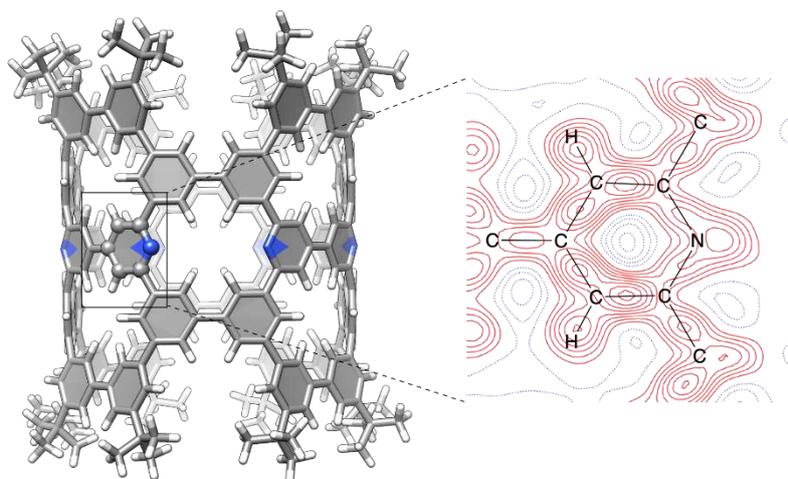


図 3：窒素ドーピングナノチューブ分子上の孤立電子対(ローン・ペア)。右側の図が窒素原子周辺の電子分布を示している。

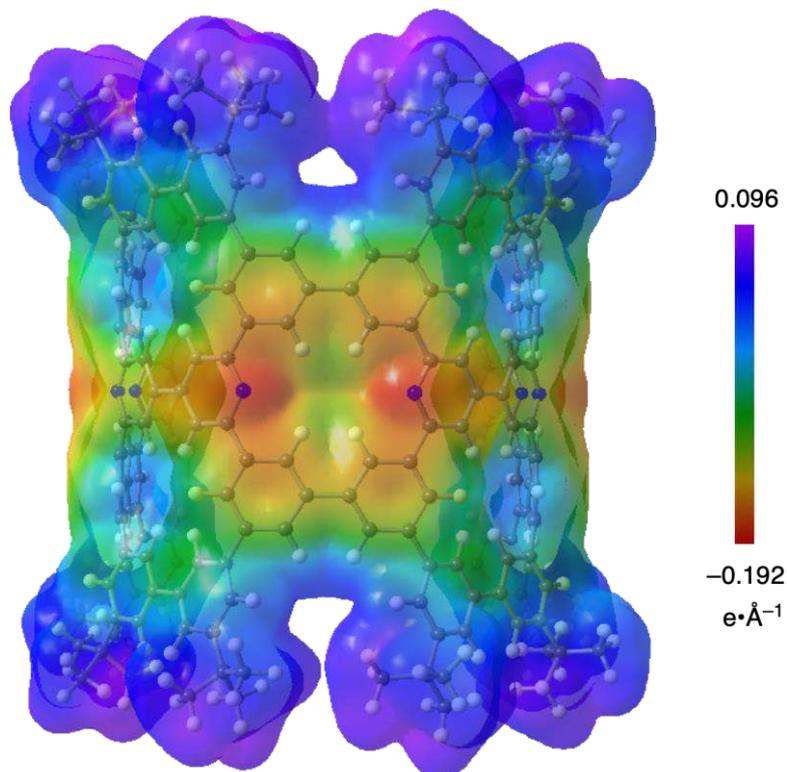


図 4：窒素ドーピングナノチューブ分子上の孤立電子対(ローン・ペア)による電子状態変化。赤い部分が電子密度が高く、青い部分が電子密度が低い。

その結果、窒素にはナノチューブに電子を注入させやすくする効果があることが見つかりました。これまで窒素ドーピングナノチューブは、p 型半導体にも n 型半導体にもなることが報告されていましたが、その由来や制御法は明らかにな

っておりませんでした。今回の研究成果は、窒素が電子を受け取り易くすることで、n型半導体になりやすくさせることを明らかにしたものとなります。これらの新知見は、今後の窒素ドープナノカーボン材料の開発を加速することが期待されます。

論文情報

タイトル A nitrogen-doped nanotube molecule with atom vacancy defects

雑誌 Nature Communications

DOI [10.1038/s41467-020-15662-6](https://doi.org/10.1038/s41467-020-15662-6)

日本語原文 <https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/2020/6741/>

文 JST 客観日本編集部