

光り輝くダイヤモンド、鉛筆の芯のグラファイト、さらに代表的なナノテク(超微細技術)の素材のフラーレン(球状炭素分子)やカーボンナノチューブ(筒状炭素分子)も炭素原子だけでできている。それぞれの結晶構造は違い、さらに新しい構造の炭素新物質が誕生しようとしている。ポイントは物質開発に数学が活用されつつあることだ。

東北大学の数学、計算科学、材料合成のそれぞれ専門家が組んで開発に取り組む炭素新物質が材料研究者の間で大きな話題になっている。数学者である明治大学の砂田利一教授(東北大名教授)が昨年二月に米国数学会誌で発表した新しい幾何学的構造「K4」を炭素で作ろうというチャレンジだ。

「数学が物質開発に貢献するすばらしい事例になるだろう」と数学者の小谷元子(東北大名教授)は期待する。砂田名誉教授からK4構造の話聞いた小谷教授は「こんな物質作れますか」と学内で材料合成が専門の阿尻雅文教授と、計算科学を担当する川添良幸教授に相談。共同で合成に取り組むことで意気投合した。科学技術振興機構(JST)のプロジェクトで、〇八年から研究がスタートした。まず川添研で計算科学の技術を身につけた伊藤正寛助教が炭素でK4のシミュレーション。その結果、構造が安定であるとともに、電気を通す金属の性質があることが計算結果として得られた。伊藤助教らの成果は今年に入り米国物理学

新構造の炭素物質

合成のヒント 数学で予言

イノベーションの潮流

組み合わせると切頂二十面体ができそうだとわかった(大沢名誉教授)と約四十年前を振り返る。この物質は十五年後の一九八五年に英米の研究チームが合成に成功し「フラーレン」と名付けた。九六年に合成にかかわった数学者がノーベル化学賞を受賞した。最初に構造を提案した大沢名誉教授はノーベル賞を受賞できなかったが、現在もさらに新しい幾何学構造の炭素物質の開発を目指している。大気や海洋の変化の大規模なシミュレーションに使う超高速スーパーコンピュータ「地球シミュレータ」を扱う財団法人・高度情報科学技術研究機構(RIST)と共同で研

究に取組んでいる。大沢名誉教授は京都大学の助手

晶。まだ計算上の物質だ。英ロンドン大学のアラン・マツカイ名誉教授が九一年に提案した結晶構造で、フラーレンを立体的に積み重ね、圧力を加えてお互いの接触面を合体した構造をしている。牧野研究員らは昨年夏、様々な寸法のマツカイ結晶と、それぞれの電氣的、機械的データをシミュレーションし、いくつかの大きな特徴をみつ

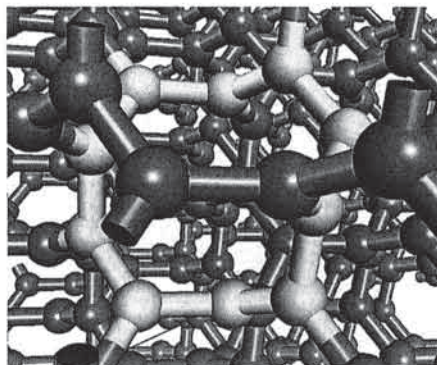
た。まず太陽電池設計に必要な「バンドギャップ」とよぶ電子エネルギーの特性値がわかった。可視光に加え赤外光や紫外光をそれぞれ電気に変換できるマツカイ結晶を積み重ねれば、広い波長帯域の光を電気に変えられるよ

環境エネ材料開発に期待

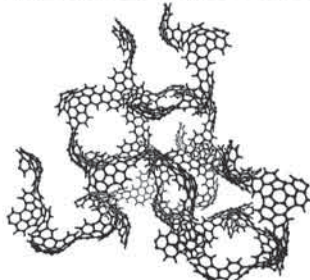
だった一九七〇年、古代ギリシャの数学者であるアルキメデスが提案した「切頂二十面体」、身近な例ではサッカーボールの構造に注目。「結合の手が三本ある炭素原子を組

うになるはずだと考えた。現在、大沢名誉教授がRISTの手島正吾主任研究員、牧野浩二研究員らと注目しているのは「マツカイ構造」の

うに集めて全方位から圧縮する方法を提案している。一方、牧野研究員はカーボンナノチューブを貯木場にある木材の芯を分解して炭素だけを残す。最後にゼオライトをフッ



炭素原子10個が環状構造(色の薄い部分)になっている「K4」のCCG画像(写真上)と「ZTC」のCCG画像(いずれも東北大学提供)



| これまでに発見または構造が推定された主な炭素の結晶 | |
|---------------------------|--|
| 名称 | 構造の特徴 |
| グラファイト | 炭素原子6個の輪で構成される面状分子「グラフェン」が積層した構造。鉛筆の芯の主成分 |
| ダイヤモンド | 炭素原子が立体的に組み上がった構造。最も硬い物質 |
| フラーレン(球状炭素分子) | 炭素原子5個の輪と6個の輪が組み合わさったサッカーボールのような構造 |
| ナノチューブ(筒状炭素分子) | 炭素原子6個の輪で構成される筒状構造。筒が1層、2層のほか、底の開いたコップを重ねた構造など様々 |
| ゼオライト鋳型カーボン(ZTC) | 炭素原子5個の輪と6個の輪からなる細い帯状シートがジャングルジムのようにつながった構造 |
| マツカイ結晶 | フラーレンが立体的に積み重なった構造。まだ合成されていない |
| K4 | 炭素原子10個の輪で構成される立体構造。まだ合成されていない |

形状や結晶構造を幾何学的に設計して作る炭素新物質は、今後も続々誕生する可能性がある。太陽電池や燃料電池など、省エネ技術につながる新物質が生み出されることに期待したい。(黒川卓)

ポイント

東北大学の京谷隆教授は「物質開発は何度も失敗を重ねる地道な作業。コンピューターでシミュレーションすれば、様々な構造を予

専門家の連携 不可欠に

新物質の形状や結晶構造がポレーションが必要で、そのための仕組み作りが必要になるだろう。

「合成まで五年、それから八年かかったが、この材料が新しい結晶構造をしていることが昨年夏によくわかった」(京谷教授)。七種類も

の化学や物理の分析手法で構造をおおよそ推定し、最後に分子軌道法という計算で結晶構造をついに突き止めた。

炭素原子からなる五角形と六角形の輪が組み合わさった幅約一ナノメートルの帯状のシートが立体的に結合し、遊園地にあるジャングルジムのような形状を形成していた。成果は、今年一月に炭素材料の国際学術誌「カーボン」(電子版)で発表された。この物質は室温で大量の水素を吸着したり脱着できる。すでに二年前から日産自動車と組んで燃料電池の水素貯蔵用に研究を進めている。

「計算結果だ。英ロンドン大学のアラン・マツカイ名誉教授が九一年に提案した結晶構造で、フラーレンを立体的に積み重ね、圧力を加えてお互いの接触面を合体した構造をしている。牧野研究員らは昨年夏、様々な寸法のマツカイ結晶と、それぞれの電氣的、機械的データをシミュレーションし、いくつかの大きな特徴をみつ

ば、現在の金属材料を使うより軽くできることも計算でわかった。体積当たりの重さと同機械的強さの指標となる硬さの関係を計算。鉄鋼材料と同じ強さなら重さを約四分の一にできる値が得られた。しかしコンピュータでは様々なデータを得ても実際にどうやれば合成できるかが課題になる。大沢名誉教授はフラーレン(十億分の一)の穴が開いた多孔質の炭素物質を二〇〇〇年に合成した。ゼオライトの穴に炭素を含む原料を詰め込み、高温で原料を分解して炭素だけを残す。最後にゼオライトをフッ

酸で溶かして取り除き炭素だけを残した。「ゼオライト鋳型炭素」の英語表記の頭文字をとってZTCと名付けた。

「合成まで五年、それから八年かかったが、この材料が新しい結晶構造をしていることが昨年夏によくわかった」(京谷教授)。七種類も

の化学や物理の分析手法で構造をおおよそ推定し、最後に分子軌道法という計算で結晶構造をついに突き止めた。