



TOHOKU
UNIVERSITY

平成 27 年 4 月 21 日

報道機関 各位

東北大学未来科学技術共同研究センター

五角形のグラフェンの発見 —夢の新素材として期待—

【概要】

東北大学未来科学技術共同研究センターの川添良幸教授と北京大学の王前教授の研究グループは、第一原理シミュレーション計算により、五員環のみから構成され、通常のグラフェンとは全く異なる物性を有するペンタグラフェンの理論設計に成功しました。

この新規炭素物質は、

- (1) 透明半導体
- (2) 負のポアソン比（押すと、その垂直方向にも縮む。通常物質とは逆）
- (3) ドーピングにより超伝導体
- (4) ペンタナノチューブは全て半導体

等の応用上極めて重要な特長を有しています。

理論計算により安定なことが証明されているので作成可能で、従来の物質では見られない優れた物性を活用した幅広い範囲の工業利用が期待されます。

本研究成果は、米国科学アカデミー紀要 PNAS に掲載されました。

【背景】

1985 年の炭素のサッカーボール構造として知られるフラーレン C60 に続き、カーボンナノチューブ、グラフェンと次々に炭素系のナノ構造体が発見され、現在に至るまで盛んに研究がなされています。特にグラフェンはグラファイト（煤）をセロファンテープで一層ずつ剥がすという一見ローテクで作られ、直後の 2010 年にノーベル賞を受賞し、さらにトポロジカル絶縁体の物性を有することが知られ、一躍脚光を浴びるようになりました。

しかし、原子構造はグラファイト（煤）の一層そのもので、炭素原子は六角形に結合したハニカム格子です。古来、2 次元面は、三角形、四角形、六角形で埋め尽くせますが、五角形では埋め尽くせないことが、タイルの敷き詰め問題として知られています。今回のペンタグラフェンは、この常識を完全に覆すもので、エジプトのカイロ市にある五角形のタイル敷き詰めと同様の形が炭素のナノ構造でも実現するという画期的な発見です。

【研究手法と成果】

東北大学及び国内大学のスーパーコンピュータを活用した第一原理シミュレーション計算によって、原子構造を決定しました。また、その機械的、熱的安定性も算定し、実際に作れることを保証しました。

物理・化学的性質としては、以下の通り、他の材料では見られない優れた特長を見出しました。(1) 電子状態計算により、可視光を全て透過することを確認し、酸化亜鉛に替わる透明半導体を実現出来ることを示しました。(2) 機械的性質を検討し、一方向に圧力をかけるとその方向に縮むのは当然ですが、それと垂直方向にも縮みます。普通材料ではあり得ない性質です。圧力をかけた方向の縮みと垂直方向の伸びの比をポアソン比と言いますが、ペンタグラフェンでは負のポアソン比を持つことになります。これはペンタグラフェンを通常材料に混合すれば圧力をかけても伸び縮みしない画期的な新材料が作れることを意味します。(3) 少量の電子を追加すると超伝導体を実現出来る性質に魅力的です。

(4) カーボンナノチューブでは、グラフェンの巻き方(キラリティ)によって金属と半導体になり、実際の作成ではその混合物が出来てしまいます。ペンタグラフェンはキラリティに寄らずに半導体なので、これまであったグラファイトの電子物性問題を抜本的に改善出来ます。

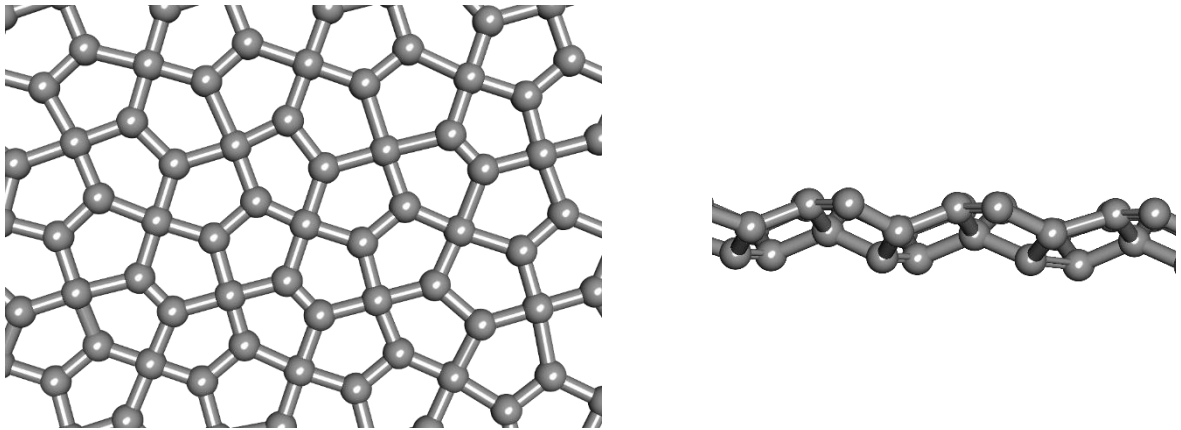


図1. (左) 真上から見たペンタグラフェン、(右)横から見た図
(カイロタイリングとして知られる五角形で面を埋めている。ただし、全くの平面ではなく、右図の様に0.6Å程の凸凹がある)

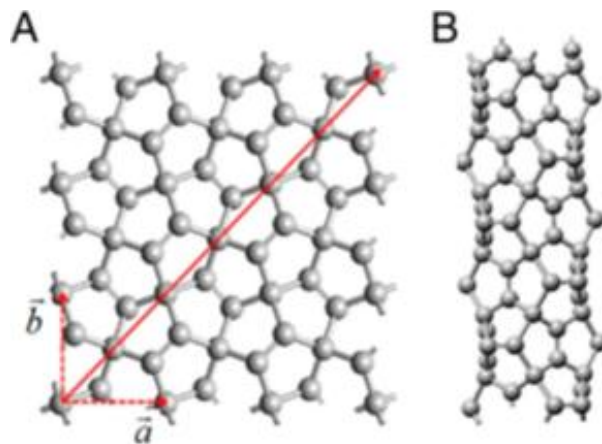


図3. ペンタナノチューブ (Aの赤線方向に巻くとBが出来る)

【今後への期待】

自然界では未だ見出されていないペンタグラフェンが、実験的に合成されれば、他の材料にはない特長ある上記の新物性が実現出来ます。炭素だけで出来る新材料であるため、特定国からの輸入に頼るレアメタルの様な資源問題もなく、我が国産業界が独自の開発を行える夢の新材料として期待されます。

【論文情報】

タイトル：Penta-graphene: A new carbon allotrope (ペンタグラフェン；新炭素同素体)

著者：Shunhong Zhang, Jian Zhou, Qian Wang, Xiaoshuang Chen, Yoshiyuki Kawazoe, and Puru Jena

掲載誌：PNAS, February 24, 2015, vol. 112, no. 8, pp. 2372-2377

【補足説明】

・負のポアソン比

歪みエネルギー関数の理論的考察から、ポアソン比 ν は、 $-1 < \nu < 1/2$ の値が取れることが知られていますが、実際には圧力をかけたり引っ張ったりすると体積を一定するように、力と垂直方向には逆の伸び縮みをする物質が大半です。これまでに、特殊な例として、シリカの構造の一つでのクリストバライト（方珪石）等が負の ν を持つことが知られています。グラファイトの作るハニカム格子の ν は正で、通常材料特性です。

・同素体

一元素の作る原子構造で異なる形の間を同素体と言います。炭素には上述の様に、昔から知られていたダイヤモンドとグラファイトに加え、フラーレン、ナノチューブ、グラフェンと多くの同素体が知られる様になりました。二酸素（普通の酸素分子） O_2 とオゾン O_3 も良く知られています。

【お問い合わせ先】

<発表者> ※研究内容については発表者にお問い合わせ下さい。

東北大学未来科学技術共同研究センター

教授 川添良幸

電話 022-795-3121 Fax 022-795-3670

電子メール kawazoe@imr.edu

<機関窓口>

東北大学未来科学技術共同研究センター

特任教授 磯村明宏

電話 022-795-4002

電子メール isomura@niche.tohoku.ac.jp