

2013年4月3日

報道関係各位

疎水性のカーボンナノチューブ表面は水で薄く“濡れている”という奇妙な現象を発見！ ～大気中の材料・生体物質の表面性質を解明する第一歩～

東京理科大学 科学技術交流センター (承認 TLO)

東京理科大学 理学部 物理学科・総合研究機構ナノカーボン研究部門長 本間芳和 教授、同工学部 教養学科 山本貴博 講師、ならびに、東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻 千足昇平 講師らの研究チームは、疎水性とされるカーボンナノチューブの表面にも、水分子の薄い水和層が形成されることを実験と理論計算から解明しました。水分子に包まれているにも関わらず、カーボンナノチューブは水をはじくという、従来の常識を覆す濡れ性に対する新概念を提唱するものです。なお、本研究成果は米国物理学会の発行する専門誌 (Physical Review Letters [PRL]) に掲載されます (4月8日発行予定)。

【研究の背景】

カーボンナノチューブ (CNT) は層状物質であるグラファイトの一層分のシート (グラフェン) を直径 1 nm 程度の筒状に丸めた構造をもつ物質です。優れた電気伝導性、熱的・機械的強度や化学的安定性を有することから次世代の炭素材料として注目されています。グラファイトがそうであるように、CNT やグラフェンは疎水性 (水をはじく性質) を示し、そのままでは水に溶かすことはできません。炭素原子の 6 員環構造からなるこれらの物質は極性を持たないため、極性を持つ水分子とは水素結合を作らないためと考えられています。今回、本研究チームでは、レーザー励起蛍光分光法を用い、雰囲気中の水蒸気圧を変化させて単一の CNT からの発光を観測したところ、水蒸気圧が CNT の直径と温度で決まる特定の値を超えた途端に、発光の波長がステップ的に変化することを見出しました (図 1)。これは、CNT の周囲に『水分子が吸着した』と考えなければ説明をすることが出来ません。そこで、本研究チームでは、精密な実験と分子動力学シミュレーションから、CNT と水分子の相互作用を研究してきました。

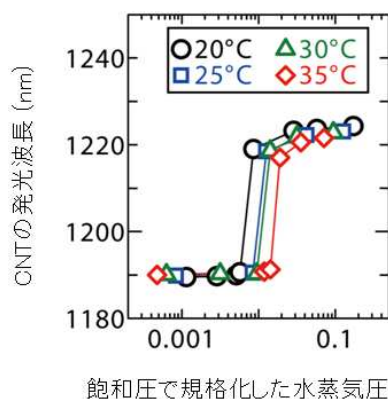


図 1 CNT の発光波長の温度および水蒸気圧依存性

【研究成果の概要】

東京理科大学の本間と東京大学の千足らは、単一の CNT を微細加工で作製した石英の柱の間に電線のように架橋させ（図 2）、これを光学顕微鏡に搭載した環境セルに入れることにより、温度や水蒸気圧を変化させながらレーザー励起蛍光分光測定を行う独自の技術を確認しました。従来の測定技術では、一度に多くの CNT からの発光を計測しており、また、CNT 同志の接触を避けるため、CNT を界面活性剤等で包む必要があったのに対し、本研究ではたった 1 本の架橋 CNT を使って、直径の異なる CNT の影響を排除したこと、および、他の物質に接触させずに水分子との相互作用だけを計測したことがポイントです。この結果、飽和水蒸気圧の数%に満たない低い蒸気圧（遷移水蒸気圧）を境として、CNT が吸収する光の波長、CNT が放出する光の波長ともに長波長側にわずかに増加することを見出しました（図 3）。これは、遷移水蒸気圧以上では CNT の周囲に薄い水の層が形成されることにより、CNT 中の電子が感じる誘電率が裸の CNT に比べて増加するためであると解釈できます。さらに、遷移蒸気圧の温度依存性の解析から、CNT 周囲の薄い水の層は通常の水よりも蒸発しにくいことを明らかにしました。

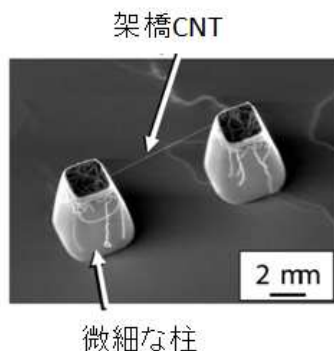


図 2 架橋 CNT

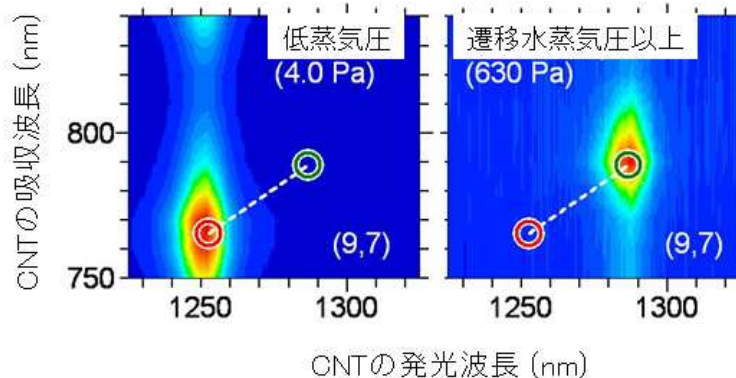


図 3 CNT の吸収および発光波長の水蒸気圧による変化

また、東京理科大学の山本らは分子動力学シミュレーションにより CNT の周りの水吸着層の分子構造を解析し、水分子同士が CNT の表面に沿った平面的な結合を作って安定化されることを見出しました（図 4）。これは、CNT の炭素原子が作る弱い分子間力ポテンシャルの谷間に捉えられた水分子同士が水素結合により凝集し、分子の厚みの吸着層、すなわち、水和層を形成したものです。水和層は 2 層までは増加しますが、それ以上には厚くなりません。これは、水分子同士が平面的に結合することにより、それより外にある水分子との間の結合を作りにくくなるためです。すなわち、CNT の表面は水で薄く“濡れている”にも関わらず、それ以上には濡れることができないのです。

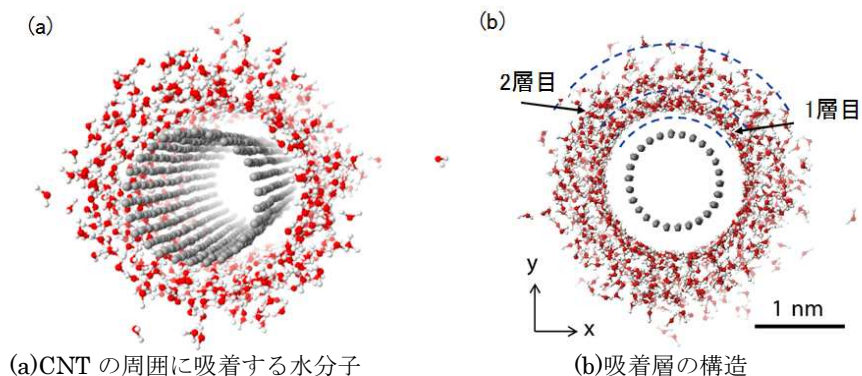


図4 分子動力学シミュレーションによる CNT の周囲の水分子分布

【今後の展望】

本研究成果は、分子レベルでの疎水性の理解に大きく寄与するものです。これまでは、水分子との間に結合を作ることのできる物質だけに水和層が形成され、水に濡れるという状態になると考えられてきました。ところが、今回、弱い分子間力ポテンシャルの谷間に水分子が捉えられるだけで、水分子同士が自発的に平面的な水和層を形成することが明らかになりました。これは、CNTに限らず、他の疎水性物質表面で同じことが起こっていることを示唆しています。言い換えれば、湿度を含む大気中にある全ての表面は、表面の分極性の有無に関わらず水和層でおおわれていることとなります。これは、大気中での材料の機械的あるいは化学的特性に影響を及ぼし、また、清浄な真空中で測定を行う基礎実験と、湿度を含む大気中で現実にかかることとの間の齟齬の解決に繋がる研究であり、今後、大気中における材料や生体物質の表面の性質を理解する鍵となると考えられます。

以上

【本研究内容に関するお問合せ先】

■東京理科大学 理学部 物理学科 本間 芳和

Tel : 03-5228-8244

e-mail : homma@rs.tus.ac.jp

【当プレスリリースの担当事務局】

■東京理科大学 科学技術交流センター (承認 TLO)

企画管理部門 担当 : 宮田、松下

Tel : 03-5876-1530

Fax : 03-5876-1676