



カーボンナノチューブと物質の相互作用が「熱力学」で解析可能に

概要

カーボンナノチューブ (CNT) (※1) は、21 世紀の科学技術の鍵となる物質として期待されている新素材で、多彩な分野への応用が進行中です。しかし、CNT と分子との相互作用の強さの定量的な評価はこれまで困難でした。九州大学大学院工学研究院の中嶋 直敏 教授 (JST-CREST, WPI-I2CNER)、新留 康郎 准教授、大学院工学府博士課程 加藤 雄一、同修士課程 井上 彩花は、CNT と分子の相互作用が熱力学により定量的に評価出来ることを明らかにしました。

この成果は、平成 24 年 10 月 12 日に英科学誌 Nature 姉妹誌のオンラインジャーナル「Scientific Reports」で公開されます。

背景

中嶋教授の研究グループは、CNT の溶媒への可溶化と機能化に関する研究を世界に先駆けて展開してきました。平成 15 年には、DNA が CNT を水中に可溶化することを発見しました。可溶化 CNT は、化学材料、燃料電池、デバイス、バイオなど、多彩な分野に応用できます。可溶化は、DNA に限らず多くの物質で利用できますが、どのような物質が、CNT とどのように相互作用するかを知ることが重要です。しかし、これまでは定量的な評価法はありませんでした。研究グループは、その相互作用解析に、科学的な学問体系が確立している「熱力学」を初めて導入しました。首記の論文のタイトルは、”Thermodynamics on Soluble Carbon Nanotubes” (溶解カーボンナノチューブに対する熱力学)です。

内容

研究グループでは、コール酸ナトリウム (Na) (※2) が CNT に吸着し、CNT が水中に孤立分散している状態 (図 1 左) をスタートの段階として設定しています。ここにオリゴ DNA (dC20) (※3) を滴下すると、CNT 表面で分子の交換反応が生じ、DNA が吸着した状態になります (図 1 右)。例えるなら、溶液中でコール酸 Na と DNA とが CNT 上で椅子取りゲームをし続けているような状態になります (※4)。どのくらいの DNA 濃度のときに反応がどれだけ進むのかは、平衡定数を決定することによって知ることができます。これが相互作用の強さを表すパラメータです。さらに平衡定数の温度変化により、エントロピー (※5) およびエンタルピー (※6) を算出することができます。

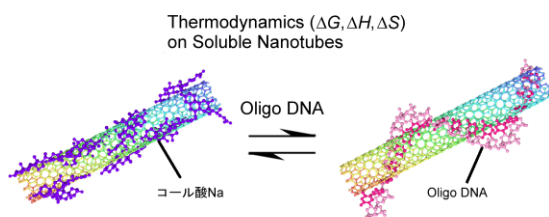


図 1 : CNT 表面でのコール酸 Na から DNA への置換の模式図

本研究では、オリゴ DNA を dC4, 5, 6, 7, 8, 10, 15 と鎖長 (長さ) を変えて実験、解析し、本手法が CNT と物質との相互作用解析の一般的な手法であることを示しています。また、CNT の直径と物質との相互作用の関係を明らかにしています。

例えば、DNA の鎖長の影響を見てみると、短くなるほど平衡定数は小さく、エントロピー変化量は正から負に、エンタルピー変化量は負から正に変化することが分かりました。これは、概ね次のように合理的に説明できます。鎖長が短い場合には、CNT 上に吸着して押し込めることがエントロピーとして不利に働きます。ただし、それぞれの分子がフレキシブルであるために、より強く吸着できる形がとれて、それがエンタルピーとして有利に働く面もあります。トータルでは平衡定数は減少、すなわち

CNT との相互作用は DNA が短いほど弱まることとなります。ただ、同一の分子骨格（シトシン）であるにも関わらず、鎖長が変化することにより駆動源が逆転するという事は、CNT 表面への吸着構造に dC7 前後を境に何か大きな違いが生じている可能性があります。

CNT の直径の違いによる影響を見てみると、直径がおおよそ 0.2 nm 大きくなることで、平衡定数が 100 倍程度も大きくなる場合があることが分かりました。直径の違いとエンタルピー変化量、エントロピー変化量の関係は非常に複雑です。このことは、DNA が CNT の僅か数ナノの直径の違いをきちんと認識しているというとても興味深い結果と言えます。

本研究は、JST 戦略的創造研究推進事業チーム型研究 (CREST) 「プロセスインテグレーションに向けた高機能ナノ構造体の創出」研究領域における研究課題「溶解カーボンナノチューブ高機能ナノシステムデザイン」(研究代表者：中嶋直敏)の一環として行われました。

■効果、今後の展開

本研究は、CNT と物質との相互作用に対して「熱力学」が利用できることを示したものです。この手法の適用により、様々な物質に対して、CNT と物質との相互作用について定量的な評価ができるようになります。そして、物質の構造や分子の大きさと体系づけて議論できるようになります。これらは、CNT 科学とテクノロジーの基盤研究として位置づけられ、ナノメートルの世界での相互作用という学問的探求が進展することが期待できます。

■用語解説 (※注)

- (※1) カーボンナノチューブ (CNT) : 炭素原子が筒状に化学結合して形つくられている物質。
- (※2) コール酸 Na : 生体内では胆のうから分泌され、脂肪の消化吸収に働く界面活性剤コール酸の Na 塩。CNT を水中に孤立分散させる働きがある。
- (※3) オリゴ DNA (dC20) : 分子量が数千以下の DNA。(dC)20 は、シトシンが 20 個繋がった DNA である。
- (※4) 椅子取りゲームで、笛が鳴った後に押しくらまんじゅうを続けている状態。この状態を「平衡」と言う。
- (※5) エントロピー : 系の乱雑さのパラメータ。平衡定数の温度に依存する項から求まる。主に分子のフレキシブルさや大きさに関係する。
- (※6) エンタルピー : 反応に伴う系の熱量変化を表すパラメータ。平衡定数の温度に依存しない項から求まる。

【お問い合わせ】

大学院工学研究院教授 中嶋 直敏

電話 : 092-802-2840

FAX : 092-802-2840

Mail : nakashima-tcm@mail.cstm.kyushu-u.ac.jp

大学院工学研究院准教授 新留 康郎

大学院工学府博士課程 加藤 雄一

電話 : 092-802-2841