

# フラーレン生成の実際とメカニズム

東京大学工学部機械工学科  
丸山茂夫

接触アーク加熱法<sup>(1)</sup>やアーク放電法<sup>(2)</sup>などの手法によって、実験用材料として少量のC<sub>60</sub>やC<sub>70</sub>を入手することは困難でなくなった。ところが、フラーレンの量的生成方法がいわば偶然に発見されたこともあり、その生成機構に関しては依然として未知の部分が多い。このため、C<sub>60</sub>、C<sub>70</sub>をさらに大量に効率よく生成する方法や、高次フラーレン、ナノチューブや金属内包フラーレンについてのマクロな量の生成方法の解明は手探りの状態である。マクロな量のフラーレンを生成する方法として、上述の手法以外にもレーザー蒸発<sup>(2)</sup>、燃焼<sup>(3)</sup>、スパッタリング<sup>(4)</sup>、電子ビーム<sup>(4)</sup>、抵抗発熱加熱<sup>(5)</sup>、太陽光<sup>(6)</sup>等を用いた方法が試されており、さらに地下鉱脈中<sup>(7)</sup>や宇宙空間<sup>(8)</sup>にもフラーレンの存在が報告されている。このことから、適当な不活性ガスの雰囲気中で炭素材料が炭素原子又は小さなクラスター程度の大きさまで分解できる温度と適当な冷却がなされれば収率の多少はともかくC<sub>60</sub>やC<sub>70</sub>等のフラーレンが生成できると考えられる。ただし、生成に適した不活性ガスの条件、温度、気体状炭素の密度、冷却速度といった物理的パラメーターを特定するには至っていない。一方、高次フラーレン、金属内包フラーレンとなるとこれらを量的に生成するための実験的パラメーターさえ明らかでない。特に高次フラーレンや金属内包フラーレンの生成について考える上では、生成法とともに生成後の大気中での反応や有機溶媒への溶解や分離過程について注意する必要がある。そこで、実際のフラーレン生成装置および分離過程で起こる現象についての再検討を行い、かつ生成時の温度場などの情報を元にフラーレンの生成を支配する因子を検討する。

一方、C<sub>60</sub>の極めて対称性の高い構造を炭素原子が自己形成するメカニズムは、炭素原子の最も興味ある化学反応であり、種々の概念的なモデルが提案されている。C<sub>2</sub>やC<sub>3</sub>が順に結合していく段階で欠陥として五員環ができ、その曲率により丸まった形状になるとするモデル<sup>(2)</sup>や平面的な炭素ネットワークが丸まって生成するとするモデル<sup>(9)</sup>が提案されていたが、最近では、適当な大きさの環状クラスターが積み重なってできるとするリングスタッキングモデル<sup>(10)</sup>と環状や二重環、三重環のクラスターが高温状態で変形することによってフラーレンが生成されるというモデル<sup>(11)</sup>が有力となっている。フラーレンを生成する反応の途中で比較的安定な環状クラスターが観察されることや、リングスタッキングモデルによって可能となるC<sub>76</sub>やC<sub>84</sub>の異性体の分類などがその理由である。しかしながら、現在の段階ではいずれがより現実に近いモデルかの判断は困難である。また、C<sub>60</sub>より大きなフラーレンやグラファイトの方がエネルギー的には安定であるにもかかわらず、実用的なフラーレン生成装置ではC<sub>60</sub>が特別に選択的に生成され、フラーレン全体の80%程度までを占めることや、金属内包フラーレンではM@C<sub>82</sub>のみの単離ができる等の非常に興味深い問題を説明できるような動力学的なモデルが期待される。そこで、分子動力学法を用いてフラーレン構造が生成する過程のシミュレーションを試みている。

## 参考文献

- (1) W. Krätschmer et al.: *Nature* **347**, 354 (1990).
- (2) R. E. Haufler et al.: *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **206**, 627 (1991).
- (3) J. B. Howard et al.: *J. Phys. Chem.* **96**, 6657 (1992).
- (4) R. F. Bunshah et al.: *J. Phys. Chem.* **96**, 6866 (1992).
- (5) 船坂ら: 第4回C<sub>60</sub>総合シンポジウム講演要旨集, 128 (1993).
- (6) L. P. F. Chibante et al.: *J. Phys. Chem.* (1993).

- (7) C. F. Buseck et al.: *Science* **259**, 1599 (1993).
- (8) B. H. Foing and P. Ehrenfreund: *Nature* **369**, 296 (1994); F. R. Brozolo et al.: *Nature* **369**, 37 (1994).
- (9) D. H. Robertson, D. W. Brenner, and C. T. White: *J. Phys. Chem.* **96**, 6133 (1992).
- (10) T. Wakabayashi et al.: *Chem. Phys. Lett.*, **201**, 470 (1993).
- (11) G. Helden, N. G. Gotts and M. T. Bowers: *Nature*, **363**, 60 (1993).

## 連絡先

〒113 東京都文京区本郷3-7-1 東京大学工学部機械工学科 丸山茂夫

TEL: 03-3812-2111 (内線6421)

FAX: 03-5800-6983

E-Mail: maruyama@mech.t.u-tokyo.ac.jp