

2026 年 7 月 28 日

ナノカーボン合成の新展開:「骨格編集」戦略を実証 ～次世代デバイスなど機能性材料の創出につながる知見～

【本研究のポイント】

- ・分子骨格内部の結合開裂と再修復を鍵として新規ナノカーボン分子^{注1)}を創出した。
- ・ナノカーボン合成における挑戦的課題(十員環の導入と不斉合成^{注2)})を達成した。
- ・本成果は、従来は医薬品開発を対象としていた「骨格編集」という戦略がナノカーボン合成においても有効であることを実証している。

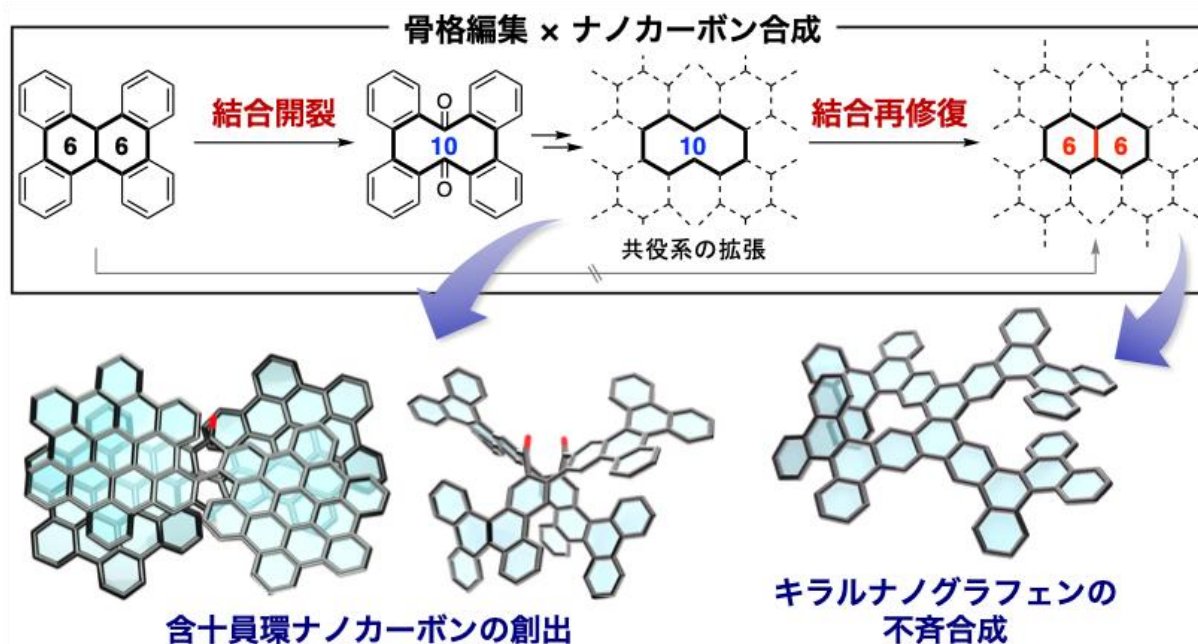
【研究概要】

名古屋大学大学院工学研究科の平野 純一郎 博士後期課程学生、井改 知幸 教授、日下 心平 講師、松田 亮太郎 教授、忍久保 洋 教授、福井 識人 准教授らの研究グループは、「骨格編集」という分子骨格内部に着目した化学変換が新規キラルナノカーボン分子^{注1、2)}の創出に有効であることを実証しました。

ナノカーボン分子は次世代材料の基盤骨格として有望視されています。これまで精密有機合成の飛躍的な発展により多彩なナノカーボン分子が創出されてきました。これら従来型のナノカーボン合成では、ボトムアップ型合成戦略^{注3)}と呼ばれる分子骨格周辺における化学変換が基盤となっています。一方、ナノカーボンのような巨大分子は骨格内部にも数多くの原子を有するものの、骨格内部は標的分子の合成を計画する上で有効な変換対象とは考えられていませんでした。

本研究では、「骨格編集」という分子骨格内部に着目した合成戦略を基盤に、含十員環ナノカーボンの創出とキラルナノカーボンの不斉合成という二つの成果を達成しました。この戦略によって得られた新規ナノカーボン分子は、高いラセミ化障壁^{注4)}・効率的な円偏光発光^{注5)}・多段階の可逆な酸化還元挙動^{注6)}・多孔性構造体^{注7)}の形成といった、材料として有用な物性を示しました。本成果は、従来は生理活性物質の合成を対象としていた「骨格編集」がナノカーボン合成にも有効であることを実証するものであり、次世代材料の創出に向けた新たな指針になると期待できます。

本研究成果は、2026 年 7 月 28 日(日本時間)付で国際学術誌『Nature Communications』に掲載されました。



【研究背景と内容】

1985 年にフラーレンが発見されて以降、ナノカーボン科学は飛躍的に発展しました。現在ではナノカーボン分子は次世代材料の基盤骨格として着目されています。これまでのナノカーボン分子の合成では、ボトムアップ型合成と呼ばれる分子骨格周辺における化学変換を基盤とした精密有機合成が威力を発揮してきました(図 1)。一方、ナノカーボンのような巨大分子は、骨格周辺部以外にも骨格内部に数多くの原子を有します。しかし、新たなナノカーボン分子の合成を計画する際、分子骨格内部は有効な変換対象とは考えられていませんでした。

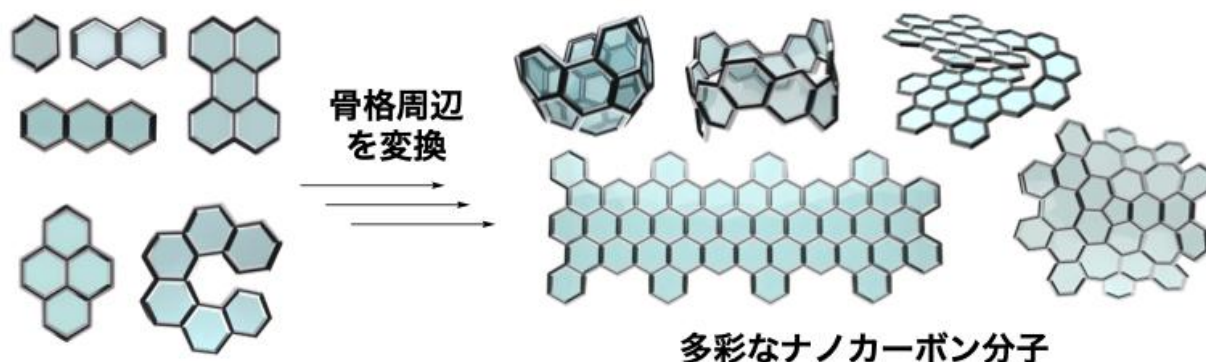


図 1 ナノカーボン分子の合成

ナノカーボンに関する現在の合成化学にはいくつかの課題があります。その一つに含十員環ナノカーボンの創出があります。ナノカーボン分子の多くはグラフェンを切り取ったような六員環のみから構築される構造を示します。これは主たる構成要素である sp^2 混成炭素^{注 8)}にとって安定な結合角が 120 度であるためです。他方で近年では、合成化学の発展により七員環や八員環を含むナノカーボンも創出されています。これらの分子は従来の平面ナノカーボン分子とは異なり非平面に曲がった構造を示し、それに由来す

る特異な機能を示します。しかし、九員環よりも大きな環をナノカーボン骨格に導入することは合成化学的に困難でした。

加えてキラルナノカーボンの不斉合成も挑戦的です。非平面構造を有するナノカーボン分子の中にはキラリティーを示すものもあります。これらは次世代暗号技術やスピントロニクス^{注 9)}の材料として期待されています。そのため、これらキラルナノカーボン分子の光学異性体^{注 2)}の片方を選択的に合成する手法、すなわち不斉合成が求められます。しかし、ナノカーボン分子の不斉合成は過去に 2 例しか報告がありませんでした。

今回、研究グループはジベンゾクリセンという市販分子の骨格内部の結合を開裂した後に π 共役系の拡張^{注 10)}を施すことで、3 種類の含十員環ナノカーボン分子の創出に成功しました(図 2)。得られた分子は、共役系の構造に応じて 8 の字型やバスタブ型といった特異な非平面構造を示すとともに、複数の魅力的な特性(高いラセミ化障壁・効率的な円偏光発光・多段階の可逆な酸化還元挙動)を示しました。さらに合成した含十員環ナノカーボン分子に対して、一度開裂した結合を再修復したところ、従来法では合成が困難であったナノグラフェン^{注 1)}分子の片方のエナンチオマー^{注 2)}を選択的に合成することに成功しました。ここで得られたナノグラフェン分子は六員環のみで構成されるにも関わらず分子内の立体障害によってねじれたキラルな構造を示します。興味深いことに、このキラルナノグラフェン分子は、固体中で分子の積層を駆動力とした多孔性構造を形成し、二酸化炭素を可逆的に吸着しました。このように非共有結合から成る多孔性材料は π OF とも呼ばれ、2025 年度にノーベル賞を受賞した MOF に続く次世代材料として期待される物質群です。 π OF の中でもキラルな内部空孔を有するものは前例がなく、この観点でも本成果は意義を持ちます。

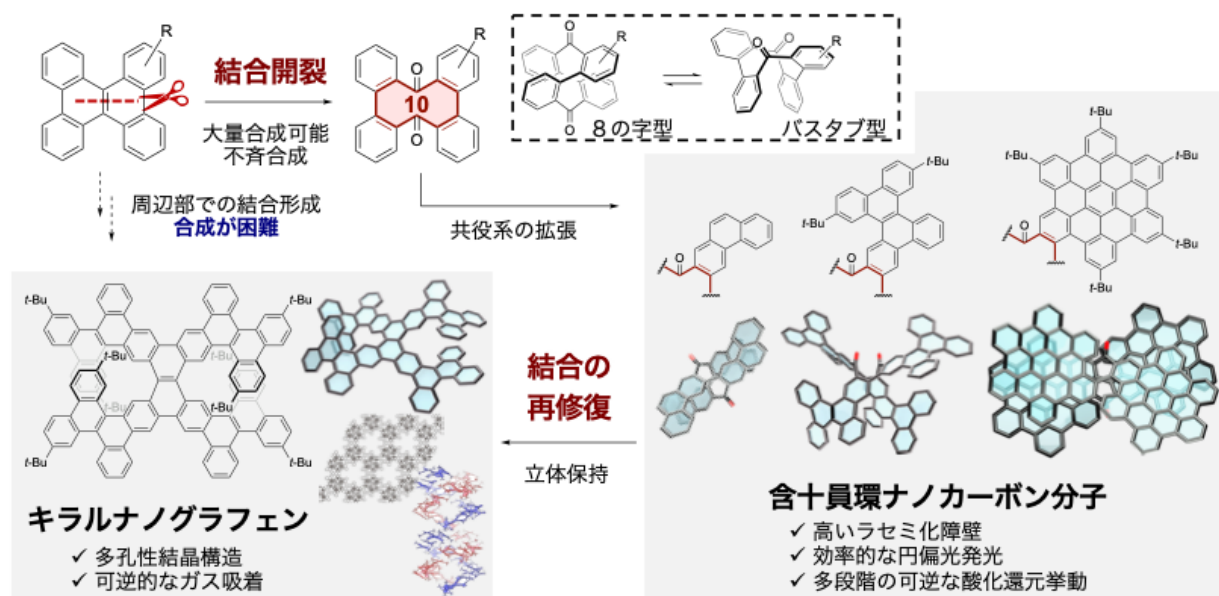


図 2 本研究の成果

【成果の意義】

本成果は「骨格編集」という戦略をナノカーボン合成に適用した初めての例になります。「骨格編集」とは分子骨格内部の結合を直接改変する合成技術を指し、特に 2020 年代前半ごろから飛躍的に発展しています。これまで、「骨格編集」の主な標的は、天然物や医薬品といった飽和炭化水素^{注 1)}を主骨格とする生理活性分子でした。一方で、ナノカーボンのような sp^2 混成炭素から構成される π 共役分子の場合、骨格内部の原子は平面かつ剛直な分子構造に埋め込まれているため、本質的に反応性が低く、分子変換に有効な起点としてみなされていませんでした。これに対して本研究では、従来の固定観念を逆手に取ることで、ナノカーボン合成における二つの挑戦的課題を達成しました。この結果はナノカーボン合成における新たな方向性を実証するものであり、今後はこの知見に基づき有用な物質が創出されると期待されます。

【付記】

本研究は、日本学術振興会 科学研究費助成事業 基盤研究(B)「 π 共役分子の骨格内部の結合開裂を基盤とする新物質創製」(JP24K01467)、挑戦的研究(萌芽)「8の字型構造を有する液晶用キラルドーパントの開発」(JP24K21766)、学術変革領域研究(A)「高密度共役の科学:電子共役概念の変革と電子物性をつなぐ」(JP20H05867)、学術変革領域研究(A)「動的エキシトンの学理構築と機能開拓」(JP23H03947)、学術変革領域研究(A)「フォトキネティズム:励起現象のマルチスケール速度論と革新的光機能」(JP26H00381)、および科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 さきがけ「 π 共役分子の内部を探索空間とする未来材料の創製」(JPMJPR21Q7)、創発的研究支援事業「発想の逆転が拓く8の字型 π 共役分子の機能創発」(JPMJFR232G)の支援のもとで行われたものです。

【用語説明】

注1)ナノカーボン、ナノグラフェン:

フラーレンやグラフェン、カーボンナノチューブの部分構造のように、数多くの sp^2 混成炭素から構成される有機分子を総称してナノカーボンと呼ぶ。この中でも特に六員環のみから構成される分子をナノグラフェンと呼ぶ。

注2)キラル、不斉合成、光学異性体、エナンチオマー:

右手と左手のように、鏡写しの関係にありつつもそれぞれを重ね合わせることができない性質をキラルという。ここで鏡写しの関係にある二つの化合物を光学異性体もしくはエナンチオマーと呼ぶ。光学異性体のうち片方を化学的に与える合成手法を不斉合成という。

注3)ボトムアップ型合成戦略:

パズルを組み合わせるように、合成の標的とする分子骨格の部分構造を繋げることで逐次的に組み上げる合成戦略。

注4)ラセミ化障壁:

光学異性体が反対の鏡像体に変化する際に必要なエネルギー。

注5)円偏光発光:

日常の光は右回りと左回りの円偏光が同じ割合で含まれているが、これらのうちどちらかに偏った光を発光する現象を円偏光発光という。

注6)可逆な酸化還元挙動:

分子から電子を奪うもしくは分子に電子を与える操作を行っても、生成物が安定であること。有機電子材料として利用する上で重要な性質。

注7)多孔性構造体:

内部に無数の微細な空孔を持つ物質の総称。ゼオライトや活性炭、MOFなどが代表例。

注8) sp^2 混成炭素:

ベンゼンの炭素原子のように結合手を三つ有する炭素原子。通常、周辺の三つの結合は同一平面上に存在する。

注9)スピントロニクス:

電子のもつ電荷とスピンの両方を同時に利用・制御する技術。省電力半導体や大容量メモリなどの基盤技術として期待される。

注10) π 共役系の拡張:

骨格を構成する sp^2 混成炭素の数を増やすこと。共役系を拡張すると可視光領域の光吸収や酸化還元特性の発現が期待される。

注11)飽和炭化水素:

水素と結合手を四つ有する炭素のみから構成される有機分子の総称。

【論文情報】

雑誌名:Nature Communications

論文タイトル:Skeletal transformation to chiral nanocarbon molecules

著者:平野 純一郎(名古屋大学)、井改 知幸(名古屋大学)、日下 心平(名古屋大学)、松田 亮太郎(名古屋大学)、忍久保 洋(名古屋大学)、福井 識人*(名古屋大学)(*は責任著者)

DOI:[10.1038/s41467-026-75280-6](https://doi.org/10.1038/s41467-026-75280-6)

【報道連絡先】

名古屋大学総務部広報課

TEL:052-558-9735 FAX:052-788-6272

E-mail:nu_research@t.mail.nagoya-u.ac.jp

科学技術振興機構 広報課

TEL:03-5214-8404 FAX:03-5214-8432

E-mail:jstkoho@jst.go.jp

【JST 事業に関する連絡先】

科学技術振興機構 創発的研究推進部

加藤 豪(かとう ごう)

TEL:03-5214-7276

E-mail:souhatsu-inquiry@jst.go.jp