

研究成果報告書

研究テーマ (和文)	超高分解能原子間力顕微鏡を用いた力誘起化学反応「単分子メカノケミストリー」の制御		
研究テーマ (英文)	Control of single-molecule mechanochemistry: force-induced chemical reactions by high-resolution atomic force microscopy		
研究期間	2019年～2020年	研究機関名 東京大学	
研究代表者	氏名	(漢字)	塩足 亮隼
		(カタカナ)	シオタリ アキトシ
		(英文)	Akitoshi Shiotari
	所属機関・職名	東京大学大学院新領域創成科学研究科・助教	
共同研究者 (1名をこえる場合は、別紙追加用紙へ)	氏名	(漢字)	
		(カタカナ)	
		(英文)	
	所属機関・職名		

概要 (600字～800字程度にまとめてください。)

メカノケミストリーとは機械的刺激を与えて反応を起こす化学のことであり、熱、光、電子による化学反応とは機構が異なるため、新物質の画期的な合成法として期待されている。本研究は、個々の原子を画像化でき、かつ、2原子間に働く力を精密に計測できる非接触式原子間力顕微鏡 (AFM) を用いて 単分子メカノケミストリー を実現することを目的とした。

標的分子を合成するために、金属基板を加熱することで触媒作用によりその表面上の分子の化学反応を起こす「表面合成法」を用いた。狙いの試料作製のために、まずリボン状のナノグラフェンを高品質で作製する条件を見出した (**発表文献の1番目**)。

次にその最適条件を用いて、そのリボン末端に、スプリングワッシャー型 (ねじれたC型) 形状の炭化水素分子を結合させて「ヘリセン接合グラフェンナノリボン」を合成する新手法を開発した。その末端に AFM 探針を接近させたところ、ねじれたC型骨格がフリップする構造変化 (キラル反転) が誘起された。この反転は探針の制御によって選択的かつ可逆的に実行できた。このようなヘリセン単分子のキラル反転は報告が無く、本研究が初の成功例である。この反応機構の詳細を調べたところ、探針からの力によって炭素骨格が変形することに起因していることが示された。この分子の変型は原子組成の変化を伴わないため、狭義の化学反応とはいえない。しかしながら、探針からの 局所的な力を効率的に使用することで変換を起こす という当初の目的に沿う重要な結果を得た。この成果をまとめた論文は現在、国際学術雑誌に投稿中である。

上記のほか、本研究に適した試料を探索する過程で、探針を金属触媒として利用したナノグラフェン合成 (**発表文献の2番目**) や表面に吸着した分子の複雑な自己組織化構造の解明 (**3番目**) に成功した。これらはメカノケミストリーには該当しないものの、単分子レベルの分子計測・反応制御技術として重要な成果である。

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）						
雑誌	論文課題	Quality control of on-surface-synthesised seven-atom wide armchair graphene nanoribbons				
	著者名	A. Ishii, A. Shiotari, Y. Sugimoto	雑誌名	Nanoscale		
	ページ	6651~6657	発行年	2 0 2 0	巻号	12
雑誌	論文課題	Manipulable Metal Catalyst for Nanographene Synthesis				
	著者名	A. Shiotari, I. Hamada, T. Nakae, S. Mori, T. Okujima, H. Uno, H. Sakaguchi, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, Y. Sugimoto	雑誌名	Nano Letters		
	ページ	8339~8345	発行年	2 0 2 0	巻号	20
雑誌	論文課題	Role of intermolecular interactions in the catalytic reaction of formic acid on Cu(111)				
	著者名	A. Shiotari, S.E.M. Putra, Y. Shiozawa, Y. Hamamoto, K. Tregaki, Y. Morikawa, Y. Sugimoto, J. Yoshinobu, I. Hamada	雑誌名	Small		
	ページ	未定~未定	発行年	2 0 2 1	巻号	未定（出版決定済）
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ページ	
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ページ	

英文抄録（100語～200語程度にまとめてください。）

Mechanochemical reactions, mechanical-stimulus-induced chemical reactions, can provide novel materials that are hardly obtained by reactions induced by heat, light, and electrons. The aim of this study is the achievement of “single-molecule mechanochemistry.” To realize it, atomic force microscopy (AFM) is a powerful method because noncontact AFM can visualize individual atoms and detect interatomic interactions precisely.

With an on-surface synthesis method, a new type of aromatic hydrocarbon (nanographene) was fabricated on a metal surface. The edge of nanographene has a helical structure. The chirality was controlled selectively and reversibly by the approach of an AFM tip to the protruding part. The achievement of the mechanically induced, single-molecule chiral switch is the first step toward nanoscale mechanochemistry.