

機械学習を援用したカーボンナノチューブの有機溶媒への完全溶解とその理解

Machine-learned 100 %-yield carbon nanotube dissolution in arbitrary organic solvents

奈良先端大物質¹, JST さきがけ², 奈良先端大データ駆動型サイエンス³, 東大院工⁴

○野々口 斐之^{1,2}, 宮尾 知幸^{1,3}, 後藤 千草¹, 村山 智子¹, 船津 公人^{1,3,4}, 河合 壮¹

NAIST, Mater. Sci.¹, JST PRESTO², NAIST, Data Sci.³ Univ. Tokyo⁴ ○Yoshiyuki Nonoguchi^{1,2},

Tomoyuki Miyao^{1,3}, Chigusa Goto¹, Tomoko Murayama¹, Kimito Funatsu^{1,3,4}, Tsuyoshi Kawai¹

E-mail: nonoguchi@ms.naist.jp

単層カーボンナノチューブ (SWCNT) の高効率な溶媒分散は水などの限られた溶媒に限定されている。また N-シクロヘキシルピロリドンなどのいくつかのマジック溶媒を除いて有機溶媒には高収率で溶けないとされていた[1,2]。導電性ポリマーによる分散は数少ない成功例であるが、トルエンなどの非極性ならびに低極性溶媒に限られている。一方で実用的な観点からは、ケトン、エーテル、エステル、アルコールなどの幅広い極性範囲の溶剤の利用が待たれている。

本研究では種々の分散剤を利用し、アルコール、ケトン、エステル、エーテルなどの幅広い有機溶媒への SWCNT の高収率溶解とその普遍性を実証する。今回見出した界面活性剤の多くは酸塩基ペアリング化合物であり、SWCNT の可溶性は分散剤-溶媒の極性やプロトン性と相関している。一例として、エチルセルロースなどのセルロース誘導体を用いることで有機溶媒への SWCNT の効率的な溶解が可能となった (図 1A)。溶媒 81 種の吸収スペクトルデータを用い、多変量解析と遺伝的アルゴリズムに基づく特徴量抽出を行うことで、効率的溶解のために必要と推測される物理化学的因子を明らかにした (図 1B)。これら因子は、溶媒と界面活性剤だけでなく、溶媒と SWCNT の相互作用にも関連づけられる。ここで述べた SWCNT 分散システムの自在なデザインは、ナノフルイディクス研究からコーティングおよび印刷技術に至るまで、多くの展開の基礎を築くことが期待される。

[1] J. L. Bahr *et al.* Chem. Commun. **2001**, 193.

[2] S. D. Bergin, *et al.* ACS Nano **3**, 2340 (2009).

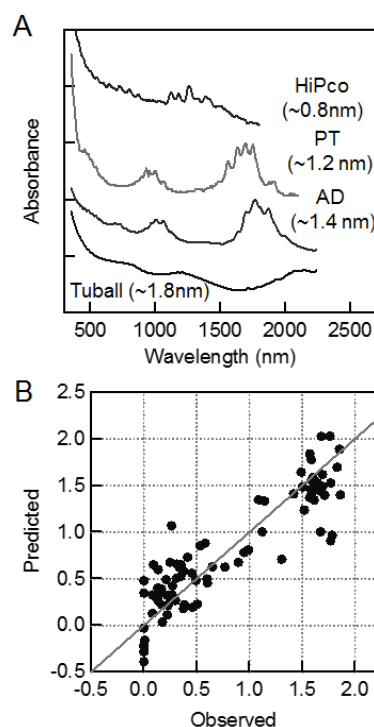


Fig. 1 (A) Dispersion of SWCNTs in THF with the aid of ethyl cellulose. (B) Cross-validation analysis of SWCNT solubility in 81 solvents examined using S₂₂ absorption.