

## カーボンナノチューブの電子準位を決定できる「経験式」を確立

### 概要

九州大学大学院工学研究院／カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 (I<sup>2</sup>CNER) の中嶋直敏教授、Gergely Juhasz 博士(工学研究院)及び平分康彦(ひらなやすひこ)博士 (工学研究院) の研究グループは、京都大学の松田一成教授、宮内雄平准教授らとの共同研究で、単層カーボンナノチューブ (SWNT) の電子準位を「実験なし」で決定出来る「経験式」を確立しました。CNT は、21 世紀の科学技術の鍵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。本研究成果は 2013 年 10 月 16 日 午前 10 時 (英国夏時間)、Nature 系オンラインジャーナル『Scientific Reports』に掲載されました。

### 背景

単層 CNT (SWNT) は螺旋度 (巻き方) が異なった多くの混合物として合成され、これらはカイラリティ(n,m)SWNT で表記されます。この(n,m)の値が異なると電子準位(酸化電位、還元電位、フェルミ準位、仕事関数)が異なります。研究グループは、2009 年に、「その場フォトルミネッセンス分光電気化学」(※1) により (n,m)SWNT (直径 0.7~1.1nm) の電子準位を実験的に決定できることを報告しています。しかし図 1 に示す様に SWNT には、巻き方(n,m)が異なる (直径も異なる) 多くの SWNT が存在し、これらの違いにより、電子準位が異なります。ところが、これらを実験的に決定できるのは、直径 0.7~1.5nm の SWNT に限られます(実際、1.2nm より大きいと実験的決定も容易ではない)。直径が 1.5nm より大きくなると、孤立溶解(一本一本バラバラにほどけた状態)SWNT の調製が困難なこと、また、0.7nm の SWNT は合成 SWNT の中で、存在量自体が極めて少ない、という理由で、これらの (n,m)SWNT の電子準位は「実験なし」で決定する必要があります。このためには、「経験式」が必要となります。

### 内容

研究グループは、まず、「その場フォトルミネッセンス分光電気化学」が適用できる直径が小さい(5,4)SWNTs ( $d = 0.620$  nm)の電子準位を決定し、以前決定した 18 種の(n,m)SWNT のデータと合わせ、直径 0.5~2.5nm の電子準位を決定できる「経験式」を導き出すことに成功しています。これを用いて決定した 220 種の mod=1 もしくは mod=2(巻き方のファミリーパターン)の(n,m)SWNT の酸化電位(Eox)、還元電位 (Ered) 及びフェルミ準位(EF)を SWNT の直径に対して示したデータを図 2 に示しています。また、導き出した「経験式」を計算化学による理論的な値と比較し、「経験式」の優位性を明らかにしました。

### 効果・今後の展開

電子準位は、SWNT の基礎基盤特性であり、本研究成果は、カーボンナノチューブ科学に大きな学問的寄与を成すものです。電子準位が異なると(n,m)SWNT の物性 (電子的性質など) が異なってきます。電子準位を知ることによって、CNT の様々な分野 (エネルギー、エレクトロニクス、ナノ材料、複合材料など) への利用/応用に対して、目的の材料/システムへのデザイン、構築をより適切に、精密に行なうことが可能となります。

### 【用語解説】

(※1) その場フォトルミネッセンス分光電気化学

「フォトルミネッセンスとその電場依存性を同時に測定する手法」で、本研究では、測定対象物がカーボンナノチューブです。

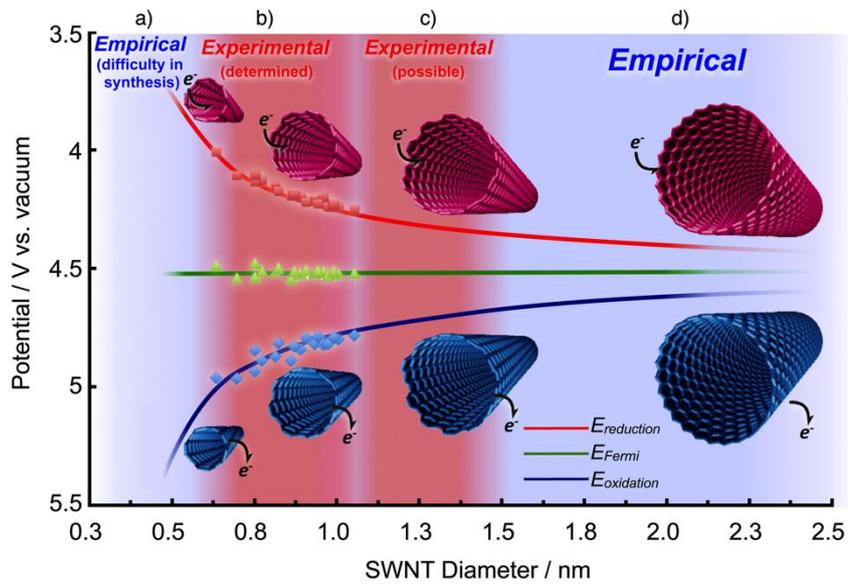


図 1. SWNT 直径 (横軸) に対するそれらの電子準位 (縦軸)

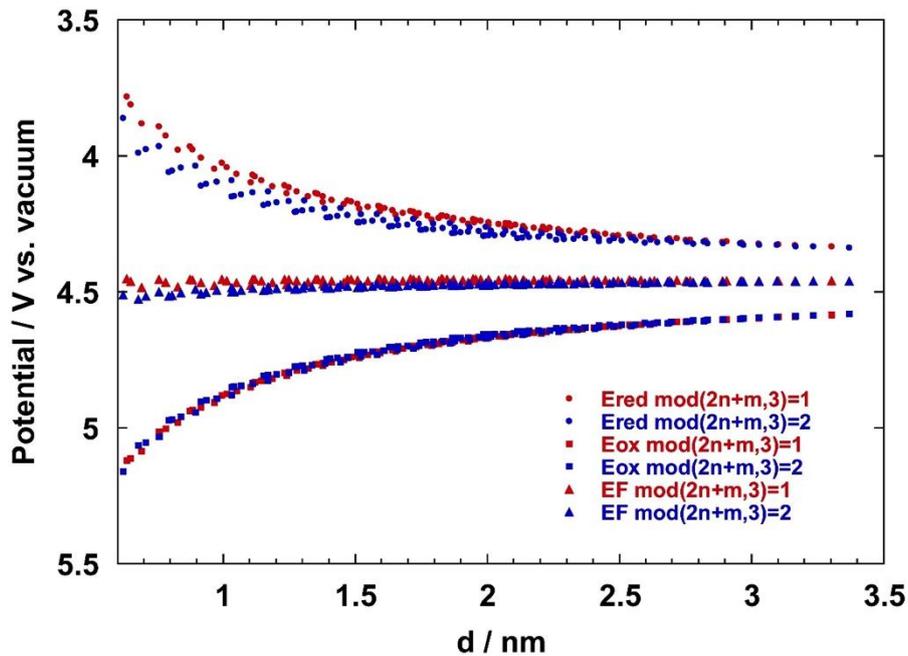


図 2. 「経験式」で決定した SWNT の電子準位 (縦軸). d: SWNT の直径

【お問い合わせ】

大学院工学研究院教授 中嶋 直敏 (なかしま なおとし)

電話: 092-802-2840

FAX: 092-802-2840

Mail: [nakashima-tcm@mail.cstm.kyushu-u.ac.jp](mailto:nakashima-tcm@mail.cstm.kyushu-u.ac.jp)

(I<sup>2</sup>CNER に関わること)

九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所

支援部門渉外グループ 増本・藍谷・田中・岩永

電話: 092-802-6935

FAX: 092-802-6939

Mail: [wpsiyogai@jimu.kyushu-u.ac.jp](mailto:wpsiyogai@jimu.kyushu-u.ac.jp)