

ナノチューブの構造制御と物性

柳和宏

東京都立大学理学部物理学科

物質の構造としてナノチューブ構造を有する物質群は、円筒方向の周期的境界条件により量子化された電子状態、一次元性、そしてまたカイラル構造に依存した多様な物性を示す。グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドといった層状化合物がチューブ構造を形成した単層カーボンナノチューブ(SWCNT)や遷移金属ダイカルコゲナイドナノチューブ(TMDC-NT)が代表例であるが、合成時には様々な構造多形が存在する為、ある特定の構造に由来する物性を巨視的に見出すことは容易ではない。しかし、近年の分離精製技術や合成技術の進展により、両者とも構造に依存した物性を巨視的に見出すことができつつある。本講演では、SWCNT系の熱電物性に見られる一次元性、TMDC-NTに見られるバンドギャップの直径依存性など、筆者らの成果を中心に議論する。

SWCNT系は合成及び分離精製技術が進み、現在では、単一カイラリティから、右巻き・左巻きのエナンチオピュアなCNTを得ることが可能である。ここではその熱電特性について議論する。SWCNT系では、1次元性を反映した状態密度が発散するファンホープ特異点構造が一つの特徴として挙げられる。このような特異的な電子構造は、熱電変換において有利であることが理論的に提案されており、その背景を理解する為、筆者らは電子構造・フェルミレベル・熱電特性との関係を系統的に明らかにすることを行ってきた¹⁾。そこでは、vHS構造に由来した通常の金属では見られない熱電特性トレードオフの破れ、熱電伝導率の振る舞い、ゼーベック係数の等方性などユニークな振る舞いが見られ、その帰結として、 $14\text{mWm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 程の非常に大きなパワーファクターをCNTファイバにおいて見出している。

TMDC-NT系においては、大量合成が可能なのは直径が100nm程のものであり、現状では、単層TMDC-NTを大量に得る合成手法は未だ確立されていない。TMDC-NTを合成する手法は様々なアプローチがあるが、筆者らはCVD法を用いたアプローチで、直径が細く・結晶性の良いTMDC-NTを合成することやヘテロ構造化を進めている²⁾。ここではTMDC-NTの一つである WS_2 -NTのバンドギャップと直径依存性について議論する。一般的にナノ物質は量子閉じ込め効果により、サイズが小さくなるとバンドギャップは大きくなる。しかし、 WS_2 -NTなどの半導体TMDC-NT系においては、歪みによる d 電子の混成効果により、直径が小さくなるとバンドギャップが小さくなるというSWCNTとは真逆な振る舞いをすることが理論的に予想されてきた。筆者らは、直径の小さな WS_2 -NTの合成を進め、その光学特性(光吸収・発光)を明らかにすることで、直径が小さい程、励起子ピークの位置が低エネルギー側にシフトすることを見出し、その振る舞いを実験的に明らかにしてきた。

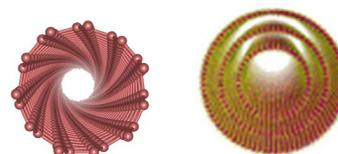
以上、SWCNTおよびTMDC-NTに関するチューブ構造と物性に関する話題について議論する。

謝辞 本研究成果は、JST-CRESTおよび科研費の支援を受けて得られたものです。

参考文献

1) Yanagi et al., Nano Lett. 14, 6437 (2014), Fukuhara et al., Appl. Phys. Lett. 113, 243105 (2018), Ichinose et al., Nano Lett. 19, 7370 (2019), Ichinose et al., Phys. Rev. Mater. 5, 025404 (2021), Komatsu et al., Nat. Commun. 12, 4931 (2021), Yanagi, JSAP review 230424, (2023).

2) Yomogida et al, Nano Lett. 23, 10103 (2023), Rahman et al., Sci. Rep. 13, 16959 (2023)



SWCNT(左)とTMDC-NT(右)