



光吸収材料としての SWCNTs

岡山大学 田嶋智之

単層のカーボンナノチューブ (SWCNTs) は、グラフェンシートを筒状に丸めた構造をもつ物質で、巻き方によって金属性を示すものと半導体性を示すものがある。半導体性 SWCNTs は、バンド構造が量子化したファンホーブ特異点と呼ばれる状態密度が特異的に高いバンドをもっている。これは HOMO や LUMO といった分子軌道をもつ有機分子の性質と類似しており、バンド間の遷移に伴う吸収や発光をもつ。

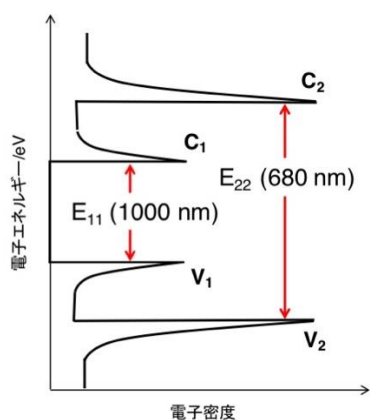


図 1. (8,3) SWCNT の電子状態密度。

(8,3) SWCNT の電子状態密度とエネルギーを図 1 に示した。(8,3) SWCNT では、 V_1 から C_1 への電子遷移および V_2 から C_2 への遷移に伴う E_{11} 吸収帯 (1000 nm) と E_{22} 吸収帯 (680 nm) をもつ。炭素材料と聞くと真っ黒い物質を思い浮かべる読者も多いと思われるが、SWCNT のバンド構造は、それぞれのヘリシティで異なるため、ヘリシティ分離した SWCNT はカラフルな材料である。半導体性 SWCNTs は、光電変換材料として魅力的な物質であり、わずか 4 種類のヘリシティの SWCNTs を組み合わせるだけ

で、太陽光エネルギーの 28% のエネルギーを活用できると提唱されている[1]。しかし、SWCNT を光電変換材料として利用する際には、光励起により生じる励起子の束縛エネルギーが問題となる。この励起子束縛エネルギーは少なくとも 100 meV 以上と見積もられており[2]、励起子 (電子-正孔対) が自発的に解離し、電子と正孔を生成することは困難であることを意味している。この問題を解決するためには、s-SWCNT 界面に適切な電子アクセプターを物理吸着させたヘテロ接合の形成が有効であることが示されている。励起電子を電子受容体で抽出することで効率的な光誘起電子移動が実現できるためである。

筆者の研究グループでは、フラーレンと SWCNTs との π - π 相互作用を利用し、SWCNT/ C_{60} 光機能界面を有する光触媒について研究を進めてきた。単色光を用いたヘリシティ選択的な SWCNT の光励起による水からの水素発生について検討した結果、(8,3) SWCNT の E_{22} 励起に相当する 680 nm の単色光照射における水素生成の内部量子収率は 17% となった[3]。さらに、(8,3) SWCNT の E_{11} 励起に相当する 1005 nm の単色光を照射した場合、内部量子収率 12.8% で水素が発生した[4]。この結果は、近赤外光領域の光を用いた水素製造に対し、半導体性 SWCNT を光吸収材料とした光触媒系が有効な突破口の 1 つであることを示しており、大変興味深い。

参考文献

- [1] D. D. Tune, et. al., *Energy Environ. Sci.*, **6**, 2572 (2013).
- [2] P. Gilliot, et al., *Phys. Rev. B*, **87**, 205412, (2013).
- [3] Y. Takaguchi, et. al., *Sci. Rep.*, **7**, 43445 (2017).
- [4] Y. Takaguchi, et. al., *Chem. Lett.*, **48**, 410 (2019).