

## 界面活性剤 SDS による半導体／金属カーボンナノチューブ分離の 機構解明のための第一原理計算

### *Ab Initio* Study of Mechanism for Metal/Semiconductor Carbon Nanotube Separation by Surfactant SDS

富士通研 °大淵 真理

Fujitsu Labs., °Mari Ohfuchi

E-mail: mari.ohfuti@jp.fujitsu.com

界面活性剤 SDS を用いた金属／半導体カーボンナノチューブのゲル分離については、ナノチューブ表面の SDS 濃度の差による SDS の形状の違い(図のようにナノチューブ表面に沿って吸着している場合とミセル状)が寄与していると考えられている。しかしながら、金属ナノチューブと半導体ナノチューブ表面において SDS の濃度差が生じる根本的な機構についてはいまだ解明されていない。今回この機構の解明をめざし、SDS アニオンの金属および半導体カーボンナノチューブへの吸着について第一原理計算を行った。

図(a)(b)に金属(5, 5) および半導体(8, 0)ナノチューブに界面活性剤の SDS アニオンが4つ吸着しているモデルを示す。SDS アニオンの数を1から4まで変えて吸着エネルギーの計算を行った(図(c))。吸着エネルギーは金属ナノチューブの方が低く、SDS アニオンあたり約 0.06eV のエネルギー差が得られた。室温 ( $T = 300\text{K}$ ) の  $kT = 0.026\text{eV}$  ( $k$ :ボルツマン定数)を考慮すると、このエネルギー差は金属と半導体ナノチューブ表面で SDS の形状の違いをもたらすと考えられる10倍以上の濃度差を引き起こす。図(d)に示すように、SDS がナノチューブ表面に吸着すると SDS アニオンからナノチューブへ電荷移動が起こることがわかった。しかし、金属と半導体ナノチューブで移動量に差はなく、移動した電荷の空間的な分布にも顕著な違いはみられなかった。したがって、電子-電子相互作用エネルギーに差は現れず、吸着エネルギーの差はちょうどナノチューブに移動した電子が占有するバンドエネルギーの差に相当することが分かった。

すなわち、SDS アニオンの吸着エネルギーの強さはナノチューブのバンドギャップと伝導体のバンド分散によって決まる。この知見は最近のカイラリティ分離の機構とも関連していると考えられる。

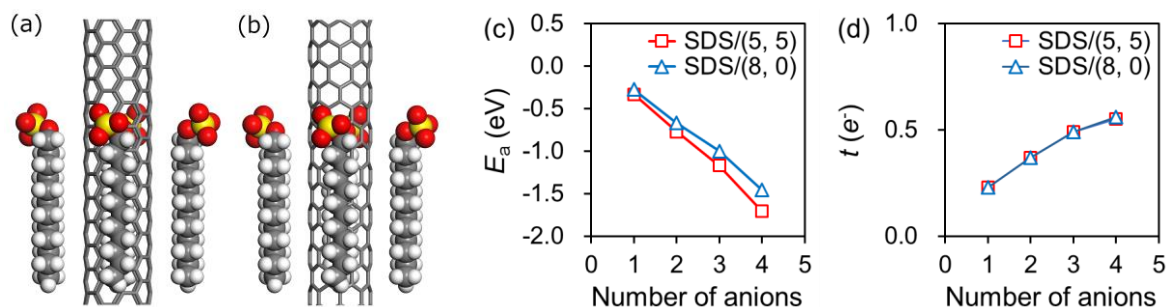


図:(a) 金属(5, 5)および (b)半導体 (8, 0) カーボンナノチューブに界面活性剤の SDS アニオンが4つ吸着している場合の3次元周期構造モデル。灰、白、赤、黄球は炭素、水素、酸素、硫黄原子を表すが、区別のためナノチューブ内の炭素-炭素結合は灰色の棒で表している。ナノチューブの直径と長さはそれぞれ(a)0.68nm、2.69nm、(b) 0.63nm、2.99nm、ナノチューブに垂直な単位格子は一辺 3nm の正方形である。(c)SDS アニオンの数に対するカーボンチューブへの吸着エネルギー $E_a$ 。(d)SDS アニオンの数に対するカーボンナノチューブへの電荷移動量  $t$ 。