

純度計算に関する解釈

当社のカーボンナノチューブの濃縮度を相対的に定量化するための方法を以下に説明しています。タイト・バインディング計算法を使って当社カーボンナノチューブ製品の金属性・半導体トランジションエネルギーピークを割り出します。そして吸光度にてそれらのピークを計測して、吸光係数を使って各ピークエリアを導く出すことができます。

出発物質と予測

当社のプロセス

- 直径分布が狭いアーク放電単層カーボンナノチューブから始めます。

製造元の情報

- 製造元のデータによると、ナノチューブの直径分布は1.2-1.7 nm (大部分は1.25-1.55 nm) で、直径1.4nmのカーボンナノチューブがもっとも多いとされています。

簡単なタイトバインディングに関する予測

文献“ *Acc. Chem. Res.* 35, 1018 (2002) ”を基にして、タイトバインディング計算で大体のトランジションエネルギーの値を得ることができます。

E_{ii} エネルギーの公式

金属性

- ${}^M E_{11} = 6\gamma_0 a_{cc}/d$
- ${}^M E_{22} = 12\gamma_0 a_{cc}/d$
- ${}^M E_{33} = 18\gamma_0 a_{cc}/d$

半導体

- ${}^S E_{11} = 2\gamma_0 a_{cc}/d$
- ${}^S E_{22} = 4\gamma_0 a_{cc}/d$
- ${}^S E_{33} = 8\gamma_0 a_{cc}/d$

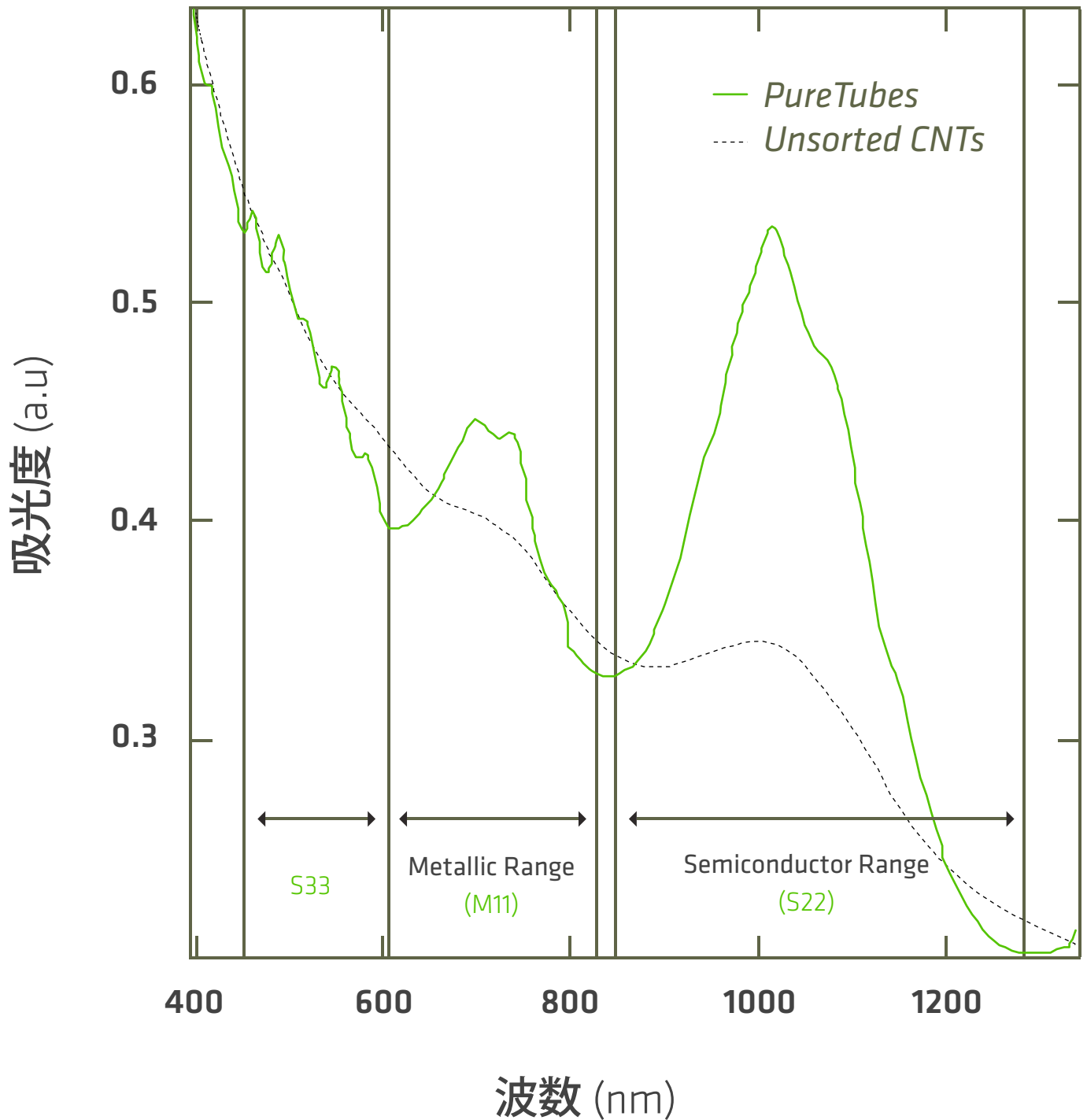
簡単なタイトバインディングに関する予測

$a_{cc} \sim 0.143$ nm, $\gamma_0 \sim 2.9$ eV と $d \sim 1.2-1.7$ nm の値を使い、 E_{ii} の範囲を推定することができます。

- 900-1270 nm 付近に ${}^S E_{22}$ トランジションを確認できます。
- 600-850 nm 付近に ${}^M E_{11}$ トランジションを確認できます。
- 450-630 nm 付近に ${}^S E_{33}$ トランジションを確認できます。
- 300-420 nm 付近に ${}^M E_{22}$ トランジションを確認できます。

- ${}^M E_{11}$ と ${}^S E_{22}$ オーバーラップは最小限です。
- 紫外可視近赤外分光光度計を使って、予測した値を確認できます。

純度計算に関する解釈



紫外可視近赤外分光結果: PureTubes

はっきりとしたピークが金属性と半導体ナノチューブにみられました: M11, S22, S33

純度計算に関する解釈

分別されていない単層カーボンナノチューブの吸光度

- 900-1270 nm 付近のブロードなピーク → S22
 - 600-850 nm 付近のブロードなピーク → M11
 - 400-600 nm 付近でのいくつかの小さいピーク → S33
- 予想した波数付近にピークを確認することができます
- 背景減算の後、M11とS22のピークエリア比を基に純度を計算することができます。
- 金属性・半導体の純度を測定する実験で得られたM11とS22の吸光係数を使って、各ピークエリアを導く出すことができます。

金属性・半導体性質の実験による確証

文献“ [Arnold et al, Nature Nano 1, 60 \(2006\)](#) ”によると

- 濃縮されたサンプル (M11 対 S22の比) は薄膜トランジスタの作成のために使えることが確認されました。
- 900-1200 nm の吸光度を持つナノチューブは半導体のような特性を持っていることが確認されました。
- 600-800 nm の吸光度を持つナノチューブは金属のような特性を持っていることが確認されました。

金属性・半導体性質の実験による確証 (追加)

文献“ [Avouris & Hersam, ACS Nano 2, 2445 \(2008\)](#) ”によると、

- 純度 99% の半導体性質をもつナノチューブでつくられた 83 個のトランジスタのうち 82 個が半導体のように作用することが確認されました。
- 純度 99% のカーボンナノチューブで作られた透明導電膜は高いオンオフ比と高いオン電流の特性をもっていることが確認されました。
 - 高いオンオフ比= おおよそ 10^3
 - 高いオン電流: $I_{ON} > 1\text{mA}$ at $V_{sd} \sim 2\text{V}$