



## 導電性硫黄の局所電子構造解析

藤森 利彦<sup>1,2</sup>

1 信州大学環境・エネルギー材料科学研究所, 2 JST さきがけ

### 1. 背景と研究目的

これまでの研究から、カーボンナノチューブ (CNT) の内部空間を鋳型とすることで、硫黄原子が鎖状に連結して一次元伝導体となることを明らかにしてきた<sup>1</sup>。導電性硫黄の内殻電子に関する情報は X 線光電子分光により得られていたものの、バルク体でない、特異な一次元鎖状構造を反映した局所電子構造に関する情報が未解明であった。そこで本研究では、導電性硫黄を内包した単層カーボンナノチューブ (S@SWCNT: S@Single Wall Carbon Nanotube) 及び ゴム状硫黄の XANES (X-ray Absorption Near-Edge Structure) 測定を行い、その局所構造の違いについて比較検討することを目的とする。

### 2. 実験内容

予め準備しておいた、気相導入法で合成した S@SWCNT (粉末)<sup>1</sup> 及び急冷法で調製したゴム状硫黄 (塊状) をそれぞれ銀テープ及びカーボンテープを用いて試料台に固定した後、真空中で XANES スペクトルを測定した。実験は、BL6N1 ラインで実施した。

### 3. 結果および考察

Fig. 1(a) は S@SWCNT の TEM (Transmission Electron Microscopy) 像を示す。SWCNT の内部空間に一本の硫黄の原子鎖 (図中赤矢印) が内包されていることがわかる。また、TEM-EDX (Energy Dispersive X-ray spectroscopy) による元素マッピングから、硫黄が高い充填率で SWCNT に内包されていることが確認できる (Fig. 1(b))<sup>1</sup>。

Fig. 2 は S@SWCNT 及びゴム状硫黄の S-K 端における XANES スペクトルを示す。振動構造に顕著な差異が確認できた。このことは、導電性硫黄が planar 鎖 (metallic) であるのに対してゴム状硫黄は helical 鎖 (insulator) であることを反映した局所電子構造の違いに起因すると解釈できる。本実験により、導電性硫黄に特異的な局所電子構造を実証することに成功した。今後は理論計算を進めていき、本実験で得られた振動構造の原理解明をめざす。

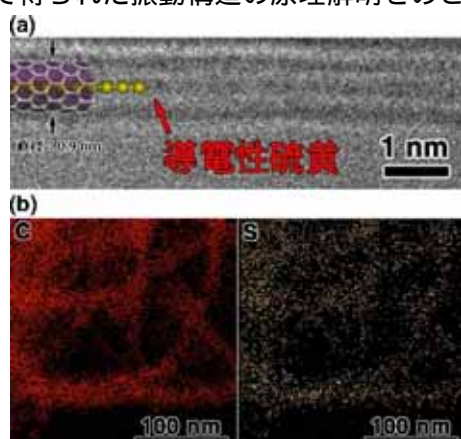


Fig.1 (a) A typical TEM image of S@SWCNT. (b) Elemental mapping analysis of S@SWCNT. Left: carbon, right: sulfur.

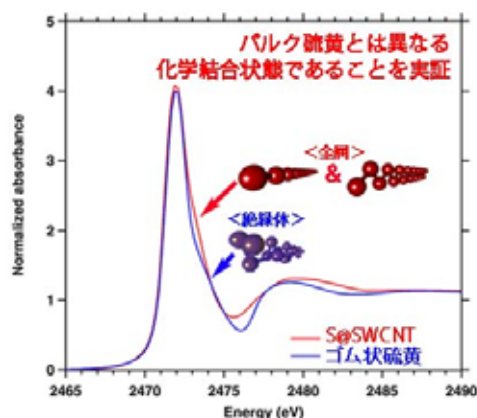


Fig.2 S-K edge XANES spectra of S@SWCNT (red) and polymeric sulfur (blue).

### 4. 参考文献

1. T. Fujimori *et al.*, *Nature Commun.* **4**, 2162 (2013). DOI: 10.1038/ncomms3162