



## Sulfur-encapsulation in nanocarbons

Wang Shuwen, 田中 秀樹, 金子 克美

信州大学先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所 (RISM)

キーワード : EXAFS, 多孔性炭素, 二次元制約, 擬高压効果

### 1. 背景と研究目的

微小空間内における物質の制約は、擬高压効果による特異な相挙動をもたらす。例えば、通常 90 GPa にまで加圧すると硫黄が金属的となることが知られているが、硫黄をカーボンナノチューブ中に制約させると、1 次元鎖を形成し、常圧下において金属的特性を発現することを見出している<sup>1)</sup>。そこで、本研究では、硫黄を 2 次元微小空間内に制約させた場合の構造および物理特性を明らかとすることを目的としている。

### 2. 実験内容

無孔性のカーボンブラック (CB) の表面上に硫黄を析出させたサンプルおよび、各種の活性炭 (AC\*) の細孔内に硫黄を導入したサンプルをカーボンテープに貼り付け、He 気流下にて CEY 法および PFY 法による S-K 吸収端の EXAFS 測定 [InSb(111) を使用] を行った。

### 3. 結果および考察

CB の表面上にバルク硫黄を析出させたサンプルの動径分布関数 (RDF) と、それに対するフィッティング結果を Fig. 1(a) に示す (Athena/Artemis を使用)。ここで、配位数  $N$  は 2 に固定してフィッティングを行い、得られたパラメーターはそれぞれ、 $E_0 = 8.94$  eV,  $S_0^2 = 0.95$ ,  $\sigma^2 = 0.0040$  Å<sup>2</sup>,  $r = 2.06$  Å であった。そこで、活性炭 AC1 の細孔中に制約された硫黄の RDF については、 $S_0^2$  の値を 0.95 に固定して解析を行った [Fig. 1(b)]。その結果、 $N = 1.86 \pm 0.20$ ,  $\sigma^2 = 0.0042$  Å<sup>2</sup>,  $r = 2.06$  Å が得られ、S-S 結合距離は変わらないものの、やや配位数が減少することが分かった。このことは、S<sub>8</sub> 分子の一部の結合が切断されたものや、鎖状にポリマー化した分子が混在していることを示唆しているものと考えられる。しかし、CEY 法では検出深度が浅いという問題があり、活性炭内部の情報が上手く得られていない可能性もある。一方、PFY 法では十分な検出深度を持っているが、今回の実験ではノイズが大きく、良好な RDF を得ることができなかった。従って、次回以降の測定では、PFY 法でも良好なスペクトルが得られるよう検討を進めて行く予定である。

### 4. 参考文献

1. T. Fujimori, A. Morelos-Gómez, Z. Zhu, H. Muramatsu, R. Futamura, K. Urita, M. Terrones, T. Hayashi, M. Endo, S.-Y. Hong, Y.-C. Choi, D. Tománek, K. Kaneko, *Nat. Commun.* **4**, 2162 (2013).

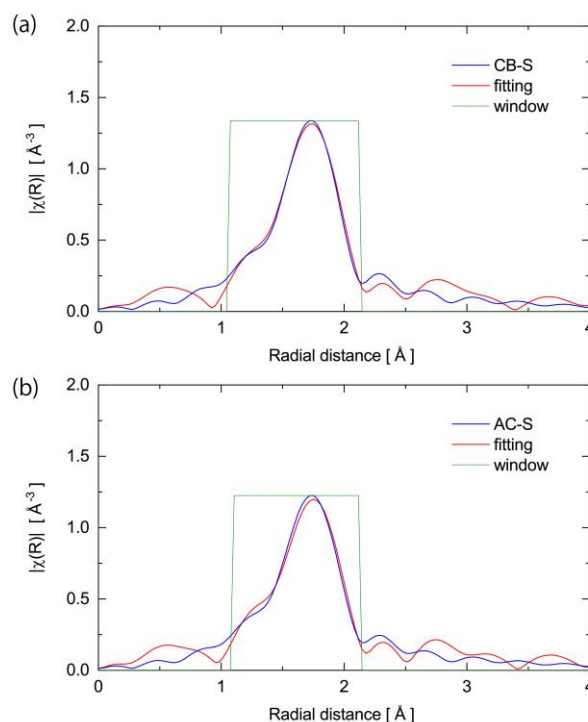


Fig. 1 (a) CB 上のバルク硫黄および (b) 活性炭 AC1 の細孔中に制約された硫黄の動径分布関数