

# カーボンナノチューブに包摂された Te 鎖の構造

加藤彰悟<sup>A</sup>、池本弘之<sup>A</sup>、宮永崇史<sup>B</sup>  
<sup>A</sup> 富山大学理学部    <sup>B</sup> 弘前大学理工学部

第 16 族元素である Te の安定相は、トリゴナル相 (t-Te) である。t-Te では、Te 原子は共有結合で結ばれて 3 回螺旋鎖を形成し、鎖間相互作用によりこの Te 鎖が並行に配列している。Te 鎖の断面の面積の直径は約 5.2 Å である。本研究では、単層カーボンナノチューブ (SWCNT : 有効内径 10 Å)、二層カーボンナノチューブ (DWCNT : 有効内径 6 Å) に包摂された Te (それぞれ、Te@SWCNT、Te@DWCNT と表記) の構造を明らかにすることが目的である。

試料は、真空中で水抜きした CNT と Te を石英ガラス管に封入し、加熱して作製した。試料は元信州大学准教授の藤森利彦博士に提供いただいた。XAFS 測定は PF-AR の NW10A で透過法により測定した。

XAFS 関数のフーリエ変換(FT)では、鎖間最近接相関のピークが消失している。鎖間相関の消失、および CNT の内径の大きさから、CNT 中には孤立した Te 鎖が形成されると考えられる。EXAFS 解析によって求めた共有結合の原子間距離と配位数を、表に示す。Te@CNT の共有結合長は t-Te に比べて 0.06 Å 程度短縮している。これは、鎖間相互作用消失による共有結合の強まりを反映していると考えられる。また、配位数も結晶の 2 配位から大きく減少している。

結晶 Te、Te@SWCNT、Te@DWCNT の XANES を、図に実線で示す。すべてのデータに共通する 60eV 付近のピークの位置をそろえている。t-Te では 10、25、40、60eV にピークが見られる。これに対し、Te@SWCNT、Te@DWCNT では、10、60eV は t-Te と同様にピークがあるが、20~50eV ではひとつになっている。また、10eV 付近のピークは、持ち上がっており、特に Te@DWCNT で顕著である。

計算半径を 8 Å として、FDMNES<sup>[1]</sup>を用いたシミュレーションの結果を、図に点線で示す。t-Te について実験と比較すると、ピーク位置など t-Te の特徴を再現している。次に、孤立した Te 鎖のモデルとして、t-Te の基本構造の 3 回螺旋鎖と、直線鎖のシミュレーションを行った。いずれの孤立鎖モデルにおいても、15、35、60eV 付近にピークが現れた。Te@DWCNT の 10eV 付近のピークにおいては、直線鎖モデルの方がより持ち上がっている。

以上の解析により、SWCNT には孤立した 3 回螺旋鎖、DWCNT には孤立した直線鎖が包摂されていると考えている。これは、SWCNT と DWCNT の内径の違いに起因すると考えている。

表

	結合長[Å]	配位数	デバイ・ワラー因子[Å <sup>2</sup> ]
t-Te 文献値 <sup>[2]</sup>	2.83	2.00	
t-Te	2.84	2.10	0.0478
Te@SWCNT	2.78	1.58	0.0556
Te@DWCNT	2.77	1.30	0.0550

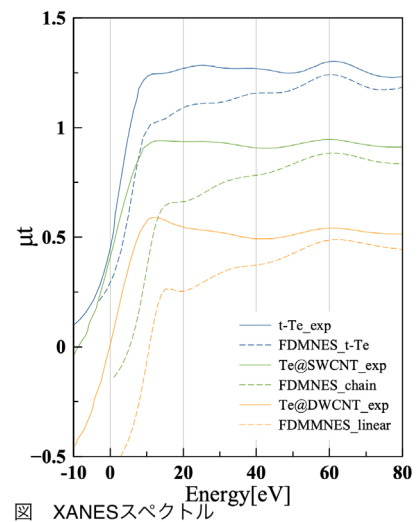


図 XANESスペクトル

[1] O. Bunau and Y. Joly J. Phys. : Condens. Matter, **21**, 345501 (2009).

[2] C.Adenis, V.Langer, and O. Lindqvist, Acta Crystallogr. Sect. C, **45**, 941(1989)