

Title	アルカリ-アンモニア-C60複合化合物の結晶構造解析
Author(s)	宮本, 康弘
Citation	
Issue Date	1997-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/2403
Rights	
Description	Supervisor: 岩佐 義宏, 材料科学研究科, 修士

Rietveld法によるアルカリ金属・アンモニア・ C_{60} 複合化合物の結晶構造解析

宮本 康弘 (岩佐研究室)

A_3C_{60} (A: アルカリ金属) の組成で fcc 構造をもつ C_{60} 結晶は超伝導体となり、その超伝導転移温度は格子定数の増大に伴い上昇する事が知られている。従って、高い超伝導転移温度をもつフラーレン結晶を得るには格子定数の大きい A_3C_{60} の結晶を合成すれば良く、その手段としてアンモニア分子を結晶格子内に導入し格子を広げる方法が考案された。1 例である $(NH_3)_4Na_2CsC_{60}$ は、格子定数が Na_2CsC_{60} の 14.132 Å から 14.473 Å に増大し、超伝導転移温度も 10.5 K から 29.6 K に上昇している。ところが、同様にアンモニア分子を結晶内に含む $(NH_3)_xNaA_2C_{60}$ (A=K, Rb) ($x=0.6 \sim 1.0$) では、アンモニア組成 x を変化させ格子定数を大きくすると、その超伝導転移温度は下降する事が最近明らかにされた。(図 1)。これは従来のフラーレン超伝導体とは全く逆の傾向である。

本研究では $(NH_3)_xNaA_2C_{60}$ がこのような特異な振る舞いを示す原因を解明するため、低温での X 線回折実験を行ない超伝導状態での結晶構造を Rietveld 解析により決定した。その結果、八面体サイト内には $Na-NH_3$ が対になって存在しており、ナトリウムイオンがそのサイトの中心からずれた位置にある事が分かった (図 2)。この本系特有の結晶構造、すなわちカチオンがサイトの中心からずれている事がその超伝導転移温度に影響を与えたと考えられる。

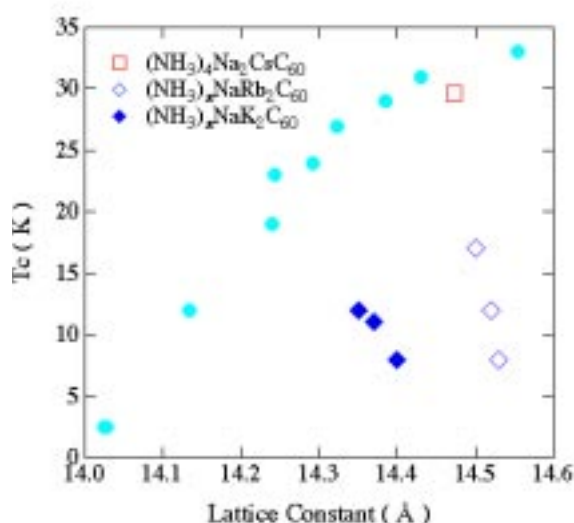


図 1: 格子定数と超伝導転移温度の関係

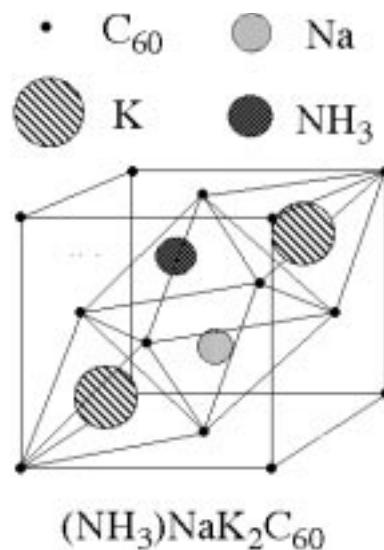


図 2: $(NH_3)NaK_2C_{60}$ の結晶構造

keywords

結晶構造, off-center, 固溶相, 超伝導, C_{60}