

Title	フラーレン化合物におけるバンドフィリングと格子定数の制御
Author(s)	多賀, 進
Citation	
Issue Date	1998-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/2460">http://hdl.handle.net/10119/2460</a>
Rights	
Description	Supervisor:岩佐 義宏, 材料科学研究科, 修士

# フラーレン化合物におけるバンドフィリングと格子定数の制御

多賀 進 (岩佐研究室)

$C_{60}$ 分子は大きな $\pi$ 電子系を有し結晶中で-1価から-12価と極めて広範囲な分子価数をとる特異な系である。固体電子物性の観点から見た場合、 $C_{60}$ の分子価数がどの価数の時、超伝導を発現するのか、あるいはしないのかは基本的だが重要な問題である。電子が $C_{60}$ の $t_{1u}$ 軌道(第一LUMO)に收容された系では、 $C_{60}$ の分子価数が-3のときのみ超伝導を発現する。一方、電子が $t_{1g}$ 軌道(第二LUMO)にまで收容された $C_{60}$ 高還元状態の超伝導発現条件ははまだ明らかにされていない。昨年、 $C_{60}$ の分子価数が-9価に相当する $A_3Ba_3C_{60}$ ( $A=K,Rb,Cs$ )が三元化合物として初めて合成され、二元化合物では実現不可能な電子状態を実現した。この結晶構造はBCC構造を有している。注目すべきことは、アルカリ金属Aとアルカリ土類金属BaがBCC構造内の隙間サイトにおいて秩序化することなく不規則に固溶していることである(BCC固溶体)。そこで、BCC構造を保持しつつアルカリ金属Aとアルカリ土類金属Baの固溶比を連続的に変化させ、バンドフィリングと格子定数を独立に制御することを目的として研究を行なった。

BCC固溶体である三元化合物の開発には母体物質が必要不可欠である。本研究では、その母体物質として $Ba_4C_{60}$ を選んだ。この物質は合成法が確立されていないため単相を得ることが非常に困難であったが、本研究において初めて単相化に成功し、同時にこの相こそ $Ba_xC_{60}$ の超伝導相であることを同定した。 $Ba_4C_{60}$ は超伝導転移温度 $T_c=7.0K$ 、体心斜方構造を有するフラーレン超伝導体で唯一の非立方晶系超伝導体となった。この母体物質 $Ba_4C_{60}$ に対し、アルカリ金属を導入することによって、 $C_{60}$ の分子価数が-10に相当する三元化合物 $A_2Ba_4C_{60}$ を得ることに成功した。結晶構造はすべてBCC構造を有しアルカリ金属AをK、Rb、Csと置換することにより、格子定数の制御が可能であることも分かった(図1)。興味深いことに、 $K_2Ba_4C_{60}$ は超伝導転移温度3.6Kを有する超伝導体であった。 $t_{1g}$ 超伝導体について図2にまとめた。図2から、 $t_{1g}$ 軌道における超伝導発現条件は、結晶構造や $C_{60}$ 分子価数にあまり強く依存しないことが明らかとなった。このことは、 $t_{1u}$ 超伝導体における非常に限られた超伝導発現条件とは極めて対照的である。

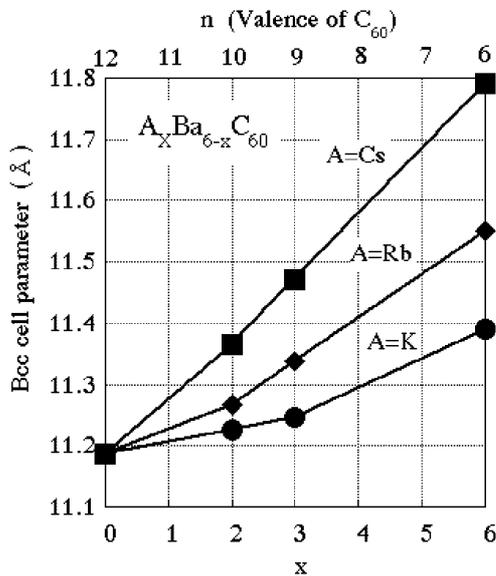


図1: BCC構造におけるバンドフィリングと格子定数の制御

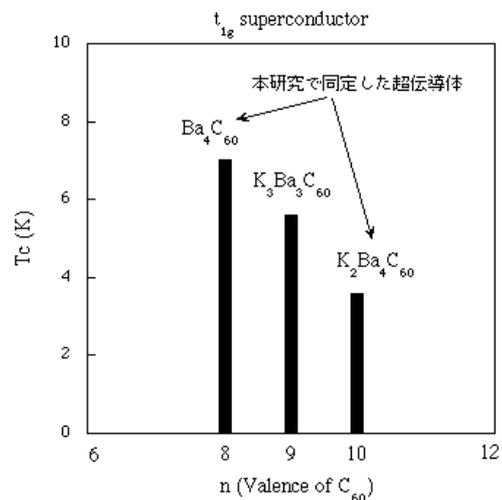


図2:  $C_{60}$ 分子価数で見ると $t_{1g}$ 軌道における超伝導

keywords

BCC固溶体,  $Ba_4C_{60}$ ,  $K_2Ba_4C_{60}$ , バンドフィリング