

2P004

新規三元系フラーレン化合物の合成と構造及び物性評価

(法政大院工) 何木 隆史、本橋 覚、緒方 啓典

1. 緒言

C_{60} を構成要素とする分子性固体は、多彩な物性を示すことが知られている。特に、アルカリ- C_{60} 化合物においては多くの超伝導体が発見されており、現在、 C_{60} 化合物における超伝導転移温度 T_c の最高値は $RbCs_2C_{60}$ における $T_c=33K$ に達している。

一連のアルカリ- C_{60} 化合物のなかでも、 $Na-C_{60}$ 二元系化合物においては超伝導相の報告はなされていないが、第 3 の元素である水素を導入することにより超伝導相 ($T_c=15K$) が安定化することが今枝らにより報告されており、アルカリ- C_{60} 化合物中における水素の固体電子状態への寄与に関心が持たれている。しかし、アルカリ- C_{60} 化合物中の水素の安定性およびアルカリ-水素- C_{60} 化合物相の構造と電子状態の関連性に関しては未だ明らかにされていない。

本研究では、アルカリ- C_{60} 化合物中における水素の挙動、およびアルカリ-水素- C_{60} 化合物相の結晶構造および電子状態の関連性を明らかにすることを目的として、 $(NaH)_2C_{60}$ 系化合物に KH を導入した $(NaH)_2(KH)_2C_{60}$ 三元系化合物を合成し、その結晶構造および局所構造、アルカリ金属イオンおよび水素の site 選択性および水素の状態の相関について粉末 X 線回折、磁化率測定、および固体 NMR 等の手法を用いて調べた結果について報告する。

2. 試料合成方法

- 1) Ar ガス雰囲気下で、 NaH および C_{60} を仕込み組成 $(NaH)_2C_{60}$ として秤量し、乳鉢で混合を行った。
- 2) 混合物をパイレックスガラス管に入れ、脱気封管する。
電気炉で $280^\circ C$, 1h 加熱反応を行った。
- 3) 得られた試料と KH を仕込み組成 $(NaH)_2(KH)_2C_{60}$ で Ar ガス雰囲気下で秤量し、乳鉢で混合を行った。
- 4) 混合物を再びパイレックスガラス管に入れ、脱気封管後電気炉で $200^\circ C$, 36h 加熱反応を行った。
- 5) 得られた試料について粉末 X 線回折および固体 NMR 測定 (1H , ^{23}Na および ^{39}K) を行った。

3.結果と考察

figure1.に $(\text{NaH})_2(\text{KH})_2\text{C}_{60}$ 化合物の粉末 X 線回折プロファイルおよびシュミレーション結果を記す。

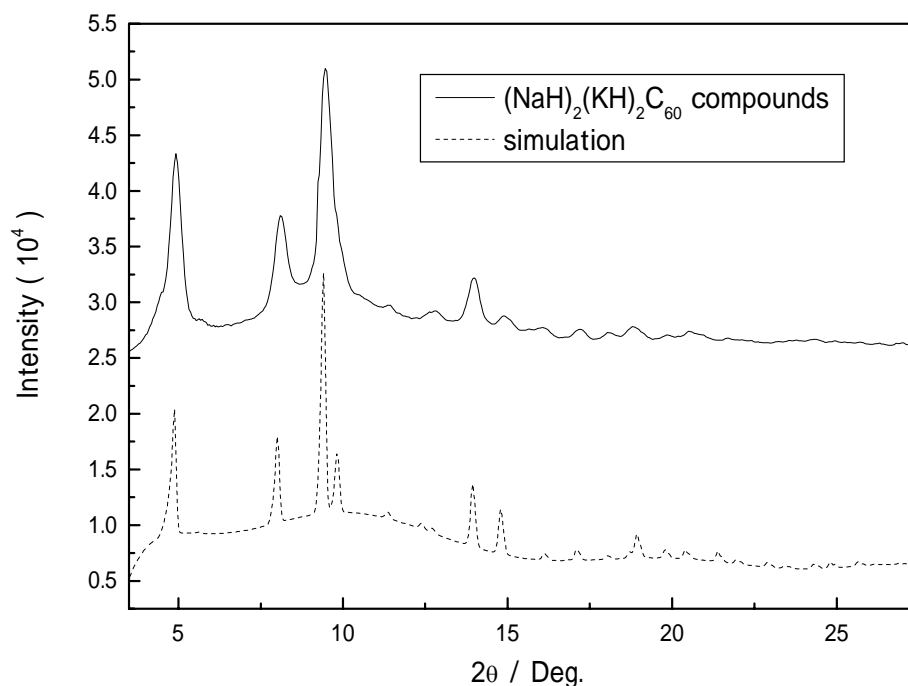


figure1. $(\text{NaH})_2(\text{KH})_2\text{C}_{60}$ 化合物の粉末 X 線回折およびシュミレーション結果

得られた回折プロファイルは f.c.c (空間群:Fm3m, $a=14.266$)で指数付けすることができ、シュミレーションの結果から C_{60} 格子内の T-site に K^+ イオン、O-site に Na^+ イオンが site 選択的に挿入されたとき、実験結果と一致することがわかった。

固体 NMR の実験結果、および他の組成における詳細な結果については当日報告する。

4.参考文献

- 1)K.Imaeda et al, Solid State Commun., 99, 479(1996)
- 2)C.NaKano et al, Chemistry Letters, 343,(1997)