

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ ФУЛЛЕРЕНА C_{60} В УСЛОВИЯХ МНОГОСТУПЕНЧАТОГО ДИНАМИЧЕСКОГО СЖАТИЯ ДО 300 кбар

В.И.Постнов, В.В.Авдонин*, К.Л.Каган, Д.В.Шахрай, А.Ф. Шестаков, Р.К.Николаев¹, Н.С.Сидоров¹, В.В.Кведер¹, Ю.А.Осипьян¹ и В.Е. Фортов

Институт Проблем Химической Физики РАН
142432 Россия Московская область Черноголовка

¹ Институт Физики Твердого Тела РАН 142432 Россия Московская область Черноголовка

*Fax:(095)785-70-29 E-mail:avdonin@icp.ac.ru

Введение

Фуллерен C_{60} в кристаллическом состоянии является полупроводником с шириной запрещенной зоны E_g порядка 2 эВ. Край оптического экситонного поглощения соответствует энергии порядка 1.7 эВ.

В кристалле молекулы C_{60} связаны, в основном, слабым Ван-дер-Ваальсовым взаимодействием и поэтому сжимаемость кристаллов C_{60} при гидростатическом давлении очень велика (модуль Юнга составляет 13.5 ГПа). Таким образом, уже при умеренных давлениях происходит заметное сокращение расстояний между соседними молекулами C_{60} в кристалле. Это приводит к резкому увеличению перекрывания электронных оболочек и, соответственно, к резкому уменьшению ширины запрещенной зоны из-за расширения как заполненных (валентных) так и незаполненных энергетических зон. В пределе можно ожидать переход кристалла в металлическое состояние.

Результаты и их обсуждение

В первой части настоящей работы нами была измерена удельная электропроводность кристаллов фуллерена C_{60} в условиях квазиизентропического нагружения размытой ударной волной до давления 15 ГПа при начальных температурах $T=293$ К и 77 К. В результате было зарегистрировано резкое увеличение электропроводности более чем на 6 порядков в диапазоне давлений 0-15 ГПа, рис.1. При снятии давления значение электропроводности возвращалось к исходной величине. Полученные результаты свидетельствовали о резком уменьшении ширины запрещенной зоны кристаллов C_{60} при приложении давления. Однако, характер наблюдающейся зависимости электропроводности под нагрузкой от температуры свидетельствовал в пользу того, что ширина запрещенной зоны уменьшалась не до нуля и образец при 15 ГПа все еще оставался полупроводниковым. Рентгенофазовый анализ

показал, что в этих условиях образец C_{60} сохраняет свое исходное фазовое состояние после снятия давления. Подобные, но немного менее выраженные эффекты в поведении электропроводности были обнаружены в кристаллах C_{70} в экспериментах по гидростатическому сжатию.

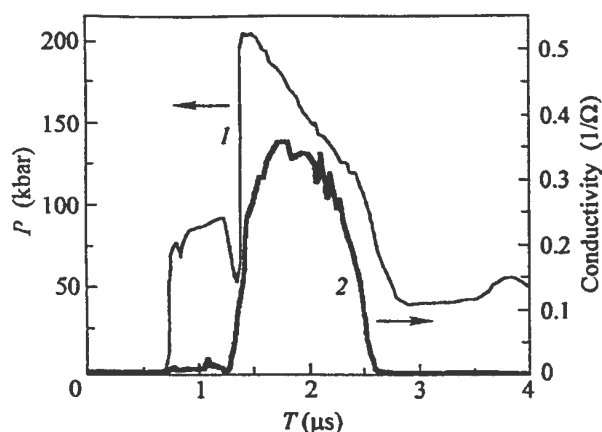


Рис.1 Зависимость давления и электропроводности кристалла C_{60} от времени при сжатии размытой ударной волной.

Целью второй части настоящего исследования является измерение электропроводности кристаллов фуллерена C_{60} при более высоких давлениях, чем в первой части, чтобы выяснить возможна ли металлизация C_{60} . Во второй части работы мы использовали режим многоступенчатого квазиизентропического сжатия кристаллов фуллерена серией последовательных плоских ударных волн, который дает возможность достичь очень высоких давлений без существенного разогрева, характерного для сжатия однократной ударной волной. Идея метода состоит в следующем [1]: образец - кристалл C_{60} в виде прямоугольной пластинки размером $8 \times 2 \times 1 \text{ мм}^3$, а также пьезорезистивный манганиновый датчик давления располагались между двумя металлическими пластинами (основание и отражатель), отделенными от образца слоями фторопласта толщиной 1 мм.

Динамическое нагружение образца осуществлялось серией ударных волн, циркулирующих между основанием и отражателем, которая инициировалась ударом стальной пластины, разгоняемой до скорости 2-2.5 км/с специальным взрывным устройством.

Результат типичного эксперимента по измерению электропроводности C_{60} при ступенчатом квазиизэнтропическом сжатии до конечного давления ~ 30 ГПа представлен на рисунке 2 в виде зависимостей от времени электропроводности образца и давления, измеренного при помощи манганинового

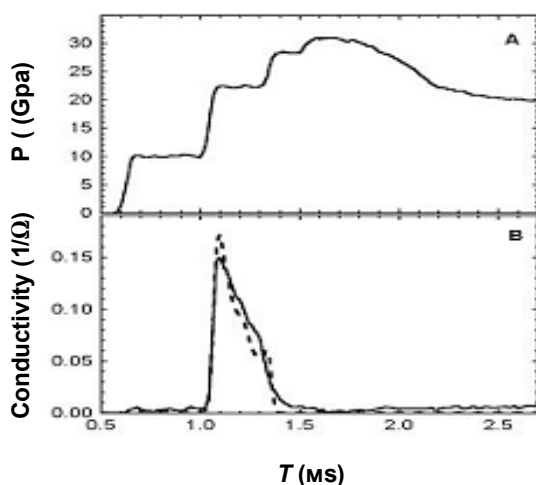


Рис.2 Зависимость давления и электропроводности кристалла C_{60} от времени при сжатии серией последовательных ударных волн.

датчика. Видно, что электропроводимость образца сначала резко увеличивается, а затем начинает плавно уменьшаться, несмотря на продолжающееся увеличение давления. В отличие от диапазона 0-15 ГПа, после воздействия более высоких (до 30 ГПа) давлений наблюдается изменение рентгенограмм

сохраненных образцов - в них происходят сложные превращения.

Выводы

Наиболее существенным фактом, полученным в настоящей работе, является то что при увеличении давления свыше 20 ГПа электропроводность вместо дальнейшего увеличения наоборот начинает падать, что формально соответствует увеличению эффективной величины E_G . Это можно связать с фазовыми превращениями происходящими в системе согласно данных рентгенографического анализа.

Принципиальным обстоятельством является то, что при давлениях выше $P_0 = 0.5-1$ ГПа термодинамически выгодной становится полимерная фаза C_{60} [2-5], характеризующаяся образованием ковалентных связей между молекулами C_{60} . Таким образом, полученные экспериментальные данные можно объяснить в предположении, что энергетический барьер полимеризации C_{60} понижается с ростом давления примерно в той же мере, что и ширина запрещенной зоны.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 03-02-16322, гранта Президента России № НШ 1938.2003.2 и программы фундаментальных исследований РАН "Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий".

Литература

1. Yu.A. Osip'yan, V.E.Fortov, V.I.Postnov, V.V.Kveder at others. JETP Letters. Vol. 75. No. 11. 2002. pp. 563-565.
2. N.P.Kobelev, R.K.Nikolaev, Ya.M.Soifer, S.S.Khasanov, Chemical Physics Letters 276, 263 (1997)
3. A.K.Sood, Solid State Comm., 81, 89 (1992)
4. K.P.Meletov, V.K.Dolganov, O.V.Zharikov, I.N.Kremenskaya, Yu.A.Ossipyan, J.Phys.Paris, 2, 2097 (1992)
5. K.Harigaya, Phys. Rev., 1995, B52, 7968.