



グラファイト層間化合物 KCaC_8 の XAFS 分析

八方 直久
広島市立大学

キーワード：グラファイト層間化合物，超伝導材料，XAFS

1. 背景と研究目的

グラファイト層間に K と Ca をインターカレートした超伝導体 $\text{K}_{1-x}\text{Ca}_x\text{C}_y$ の臨界温度は、 $x = 0$ の KC_8 のとき $T_c = 0.14 \text{ K}$ と最も低く、 x の増加とともに上昇し、 $x = 1$ の CaC_6 のとき $T_c = 11.5 \text{ K}$ となる^[1]。X 線回折実験からは、 $x = 0.6$ 程度の Ca 濃度まで、 $\text{K}_{1-x}\text{Ca}_x\text{C}_y$ は KC_8 構造を保つことが分かっている。その対称性は $Fddd$ で、 CaC_6 の $R-3m$ とは異なり、層間距離も CaC_6 よりも 0.9 \AA 長いままである。しかし、 T_c は CaC_6 に近い 10 K 程度に上昇する。X 線回折の結果からは、Ca が K とランダムに置換されていることが予想されるが、単純な置換で T_c の上昇を説明することは難しい。そこで本研究では、 $\text{K}_{1-x}\text{Ca}_x\text{C}_y$ の Ca、および K 周辺の詳細な構造を調べるために、広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS) 実験を行った。

2. 実験内容

$\text{K}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{C}_8$ の Ca の K 吸収端 (4.038 keV)、及び K の K 吸収端 (3.607 keV) EXAFS の測定は、BL6N1 にて行った。大気中での試料の変質を防止するため、予め実験室のグローブボックス内で、ポリエステルテープでシールし、それをガラス管に真空封止して持ち込み、直前にガラス管より取り出し、ヘリウム置換チャンバーに導入し、室温において蛍光法で測定した。EXAFS の解析は Athena を使用した。

3. 結果および考察

Fig.1(a)に測定した $\text{K}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{C}_8$ の K の K 吸収端スペクトルより抽出した EXAFS 振動を、また、それをフーリエ変換した強度を Fig.1(b)に示す。矢印で示す 2.5 \AA 付近のピークが K-C 配位を示すと考えられる。この位置は位相シフトを考慮すると、母材である KC_8 中の距離と一致している。

Fig.2(a)に Ca の K 吸収端スペクトルより抽出した EXAFS

振動を、また、それをフーリエ変換した強度を Fig.2(b)に示す。矢印で示す 1.8 \AA と 3.0 \AA 付近のピークが Ca-C 配位を示すと考えらる。今後、Artemis を使用した詳細な解析を行う予定である。

4. 参考文献

1. H. T. L. Nguyen, *et al.*, Carbon **100** (2016) 641.

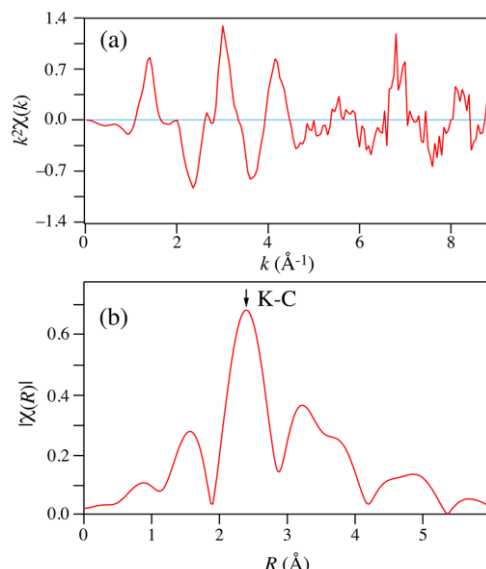


Fig.1 (a) $\text{K}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{C}_8$ の K の K 吸収端 EXAFS 振動と、(b) そのフーリエ変換

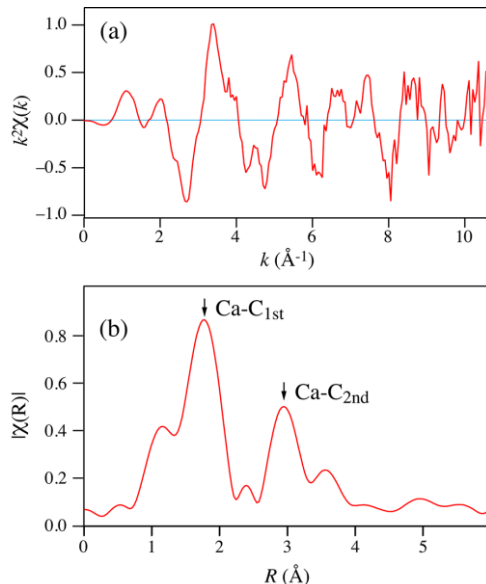


Fig.2 (a) $\text{K}_{0.6}\text{Ca}_{0.4}\text{C}_8$ の Ca の K 吸収端 EXAFS 振動と、(b) そのフーリエ変換