

# POSSIBLE INTERMOLECULAR CHARGE TRANSFER MECHANISM IN SHOCK COMPRESSED FULLERITE C<sub>60</sub>.

Plotnikov V.D., Avdonin V.V., Shakhrai D.V., Postnov V.I.\*\*

Institute of Problem of Chemical Physics RAS  
Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russia

The carbon fullerene family have opened a new paradigm in materials science. The strong covalent  $\pi$ - bonding in highly symmetric spheroid C<sub>60</sub> molecules result in extremely high stability over a wide region of pressure and temperature, and the weak intermolecular van der Waals interaction in crystal C<sub>60</sub> (fullerite) cause high compressibility and structural disorder at pressure [1,2].

Decreased intermolecular distances make possible the overlap of the molecular orbitals, that gives rise, first of all, to the change of current transport characteristics. Fullerene is an insulator at ambient conditions and under compression above 80 kbar threshold becomes a semiconductors, which resistance decreases linearly with an increase in pressure up to 200 kbar under hydrostatic compression; the resistance change spans over four orders of magnitude. However standard plotting logarithm of resistivity against the inverse of the absolute temperature  $\ln\rho\sim T^{-1}$  is linear in this case only in thermoactivative range  $T\geq 470$  K [1].

Assuming the charge carriers to be localized on individual molecules C<sub>60</sub>, well known Mott's hopping model was also used for describing of  $\rho$ -T dependence at high pressure and  $\ln\rho$  versus  $T^{-1/4}$  plot was found to give a significantly better linearity [3]. However Mott's model is developed and more fitted for variable range carriers hopping from impurity localized sites in atomic scale. For cluster materials including fullerite at high pressure more reasonable model of hopping conduction in granular disorder systems is represented [4,5], in particular, most simplified approach in this model, which considers tunnel charge transfer only between the nearest-neighboring spheroid grains with the same angstrom size and definite barrier thickness; linearity  $\ln\rho\sim T^{-1/2}$  in wide temperature range in this case should be fulfilled [6].

Our experimental study of fullerite C<sub>60</sub> resistance changes in the isentropic mode of shock compression up to 200 kbar [7,8] was supplemented by estimated definition  $\rho$  against T. the known technique of initial temperature

variation on shock experiment was applied for this purpose [2] with engaging of the static measurements data [1]. As result the dependence  $\ln\rho\sim T^{-1/2}$  was linear for fixed values of pressure in the region 100-200 kbar.

Thus, the development of conductance in fullerite under compression can occur according to the indicated model. The charge transfer starts at decrease of average intermolecular distance up to thickness of a tunnel barrier and implements tunneling and hopping of electrons between adjacent fullerene molecules.

The possibility of charge state stabilization for molecules C<sub>60</sub> in absence of an external field was surveyed in consideration of electrostatic interaction in compressed fullerite.

## References

1. Saito Y., Shinohara H. et al. Electric conductivity and band gap of solid C<sub>60</sub> under high pressure. Chem. Phys. Letters 1992; 189 (3): 236-240.
2. Yoo C.S. and Nellis W.J. Phase transition from C<sub>60</sub> molecules to strongly interacting C<sub>60</sub> agglomerates at hydrostatic high pressures. Chem. Phys. Letters 1992; 190 (3): 379-382.
3. Sundqvist B. Fullerene under high pressure. Advances in Physics 1999; 48 (1): 1-134.
4. Ping Sheng, Abeles B. and Arie Y. Hopping conductivity in granular metals. Phys. Rev. Letters 1973; 31 (1): 44-47.
5. Ping Sheng and Klafter J. Hopping conductivity in granular disordered systems. Phys. Rev. B 1983; 27(4): 2583-2586.
6. Helman J.S. and Abeles B. Tunneling of spin-polarized electrons and magnetoresistance in granular Ni films. Phys. Rev. Letters 1976; 37 (21): 1429-1432.
7. Yu.A.Osip'yan, V.E.Fortov, K.L.Kagan, V.I.Postnov et al. Conductivity of C<sub>60</sub> Fullerene Crystals under Dynamic Compression up to 200 kbar, JETP Letters. Vol. 75, No. 11, 2002, pp. 563-565
8. Postnov V.I., Kagan K.L., Plotnikov V.D., Shakhrai D.V., Fortov V.E., Issledovanie elektroprovodnosti fullerita C<sub>60</sub> v usloviyakh kvasiisentropicheskogo sgatiya. Fizika ekstremalnikh sostoyanii veschestva-2003. Chernogolovka-2003, p. 113-115

\* Fax: (095) 785-70-29

E-mail: postnov@icp.ac.ru

# ВОЗМОЖНЫЙ МЕХАНИЗМ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В УДАРНО-СЖАТОМ ФУЛЛЕРИТЕ C<sub>60</sub>

**Плотников В.Д., Авдонин В.В., Шахрай Д.В., Постнов В.И.\*\***

Институт проблем химической физики РАН

Черноголовка, Московская область, 142432, Россия

Углеродное семейство фуллеренов является новой парадигмой в материаловедении. Сильное ковалентное  $\pi$ -связывание в высокосимметричных сферических молекулах C<sub>60</sub> обеспечивает их экстремальную стабильность в широкой области температур и давлений, а слабые межмолекулярные ван-дер-ваальсовские взаимодействия в кристаллическом C<sub>60</sub> (фуллерите) проявляются в высокой сжимаемости и нарушениях упорядоченности кристаллической структуры под давлением [1,2].

Уменьшение межмолекулярных расстояний делает возможным взаимодействие молекулярных орбиталей – и это вызывает прежде всего изменение транспортных электрических свойств. Диэлектрик при обычных условиях фуллерит под действием давления свыше пороговых 80 кбар становится полупроводником, сопротивление которого линейно падает на ~4 порядка с ростом давления до 200 кбар в условиях статического эксперимента, однако стандартная для полупроводников линейная зависимость логарифма удельного сопротивления от обратной температуры  $\ln \rho \sim T^{-1}$  выполняется в этом случае только в термоактивационной области  $T \geq 470\text{K}$  [1].

Исходя из предположения о локализованности носителей заряда на индивидуальных молекулах C<sub>60</sub>, для описания зависимости  $\rho$  от  $T$  при высоком давлении была использована также известная модель прыжковой проводимости Мотта и получена близкая к линейности зависимость  $\ln \rho \sim T^{-1/4}$  [3]. Однако модель Мотта разработана и более подходит для переменных величин прыжков носителей заряда из примесных мест локализации в атомарной шкале. Для кластерных материалов, в том числе и фуллерита при высоком давлении более приемлемой представляется модель прыжковой проводимости в гранулированных разупорядоченных системах [4,5], в частности, самый упрощенный подход в этой модели, который рассматривает туннельный перенос заряда только между соседствующими гранулами сферической формы и практически одного ангстремного размера с определенной толщиной барьера туннелирования; в этом случае должна выполняться линейность  $\ln \rho \sim T^{-1/2}$  в широком интервале температур [6].

Наше экспериментальное изучение изменений сопротивления фуллерита C<sub>60</sub> в изэнтропическом режиме ударно-волнового сжатия до 200 кбар [7,8] было дополнено оценочным определением  $\rho$  от  $T$ . Для этого была применена известная методика

варьирования начальной температуры ударно-волнового эксперимента [2] с привлечением данных статических измерений [1]. В результате оказалось, что зависимость  $\ln \rho \sim T^{-1/2}$  является линейной для фиксированных значений давления в области 100 – 200 кбар.

Таким образом, развитие электропроводности в фуллерите при сжатии может происходить в соответствии с указанной моделью. Перенос заряда начинается при уменьшении среднего межмолекулярного расстояния до толщины туннельного барьера и осуществляется туннелированием и надбарьерными прыжками электронов между соседними фуллереновыми молекулами.

Рассмотрена возможность стабилизации заряженных состояний молекул в отсутствие внешнего поля за счет электростатического взаимодействия в сжатом состоянии фуллерита.

## Литература

1. Saito Y., Shinohara H. et al. Electric conductivity and band gap of solid C<sub>60</sub> under high pressure. Chem. Phys. Letters 1992; 189 (3): 236-240.
2. Yoo C.S. and Nellis W.J. Phase transition from C<sub>60</sub> molecules to strongly interacting C<sub>60</sub> agglomerates at hydrostatic high pressures. Chem. Phys. Letters 1992; 190 (3): 379-382.
3. Sundqvist B. Fullerene under high pressure. Advances in Physics 1999; 48 (1): 1-134. Ping Sheng, Abeles B. and Arie Y. Hopping conductivity in granular metals. Phys. Rev. Letters 1973; 31 (1): 44-47.
4. Ping Sheng and Klafter J. Hopping conductivity in granular disordered systems. Phys. Rev. B 1983; 27(4): 2583-2586.
5. Helman J.S. and Abeles B. Tunneling of spin-polarized electrons and magnetoresistance in granular Ni films. Phys. Rev. Letters 1976; 37 (21): 1429-1432.
6. Yu.A.Osip'yan, V.E.Fortov, K.L.Kagan, V.I.Postnov et al. Conductivity of C<sub>60</sub> Fullerene Crystals under Dynamic Compression up to 200 kbar, JETP Letters. Vol. 75, No. 11, 2002, pp. 563-565
7. Постнов В.И. Коган К.Л. Плотников В.Д. Шахрай Д.В. Фортов В.Е. Исследование электропроводности фуллерита C<sub>60</sub> в условиях квазиэнтропического сжатия. Физика экстремальных состояний вещества –2003. Черноголовка – 2003, с. 113-115.

\* Факс: (095) 785-70-29 E-mail: postnov@icp.ac.ru