

UDC 533.9.004.14; 621.039.6

M.I. Bagatskii*, M.S. Barabashko, V.V. Sumarokov

B Verkin Institute for Low Temperature Physics of the NAS
of Ukraine Lenin Ave, 47, Kharkov 61103, Ukraine

*E-mail: bagatskii@ilt.lharkov.ua

Heat capacity of fullerite C60

The heat capacity of the fullerite C60 has been investigated in the temperature interval 1–120 K using an adiabatic calorimeter. The fullerite is 99.99% pure. The sample mass is equal to about 0.6 g. Analysis of the obtained results and literature data [1-3] in the temperature range 1–300 K was carried out assuming that the translational, rotational, and intramolecular degrees of freedom make additive contributions to the heat capacity of fullerite.

Key words: fullerenes, the specific heat, the crystal lattice, libration.

М.И. Багатский, М.С. Барабашко, В.В. Сумароков

Теплоемкость фуллерита C60

Теплоемкость фуллерита C60 исследована в температурном интервале 1–120 К с использованием адиабатного калориметра. Проведен анализ полученных данных и литературных источников, предполагая, что поступательные, вращательные и внутримолекулярные степени свободы вносят дополнительный вклад в теплоемкость фуллерита. Обнаружено, что температурная зависимость теплоемкости может быть выражена как сумма линейных и кубических термов при температуре ниже 3 К. Вклад внутримолекулярных колебаний становится существенным при температуре выше 50 К.

Ключевые слова: фуллерит, теплоемкость, кристаллическая решетка, либрации.

М.И. Багатский, М.С. Барабашко, В.В. Сумароков

C60 фуллериттің жылу сыйымдылығы

C60 фуллериттің жылу сыйымдылығы 1-120К интервалында адиабатты калориметрді пайдалана отырып зерттелінді. Үдемелі, айнымалы және молекула ішіндегі еркіндік дәрежелері фуллериттің жылу сыйымдылығына қосымша үлес қосады деп болжам жасай отырып, алынған мәліметтердің және әдебиет көздерінің талдауы жүргізілді. Жылу сыйымдылықтың температуралық тәуелділігі 3К төмен температура кезінде сызықтық және кубтық термдердің қосындысы ретінде көрсетілуі мүмкін екені анықталды. Молекула ішіндегі тербелістердің үлесі 50К жоғары температурада біліне бастайды.

Түйін сөздер: фуллерит, жылу сыйымдылық, кристалдық тор, либрациялар.

The heat capacity of the fullerite C60 has been investigated in the temperature interval 1–120 K using an adiabatic calorimeter. The fullerite is 99.99% pure. The sample mass is equal to about 0.6 g. Analysis of the obtained results and literature data [1-3] in the temperature range 1 – 300 K was carried out assuming that the translational, rotational, and intramolecular degrees of freedom make additive contributions to the heat capacity of fullerite. It was found that the temperature dependence of the heat capacity can be expressed as sum of linear and cubic

terms below 3 K. The linear term can be explained by the existence of low energy tunneling levels in the fullerite orientational glass. The calculated Debye temperature is equal to 53 K. The contributions of optical translational and librational vibrations of molecules C60 are noticeable with temperature increasing above 3 K. The contributions of lattice and intramolecular vibrations to the heat capacity of fullerite were determined. The experimental heat capacity, associated to the translational and rotational vibrations, agrees well with the theory of lattice

dynamics of the orientational ordered crystal C60 [3] in the temperature range 1–25 K. The contribution of the intramolecular vibrations becomes significant above 50 K. Lattice heat capacity is close to the 5R and has weak temperature dependence on the temperature range 50–140 K. This value of heat capacity associated to contribution of translational vibrations and the orientation vibrations of molecular in the plane perpendicular to the direction of type .

The contribution of processes of orientational phase disordering to the heat capacity of C60 is increased with temperature increasing above 140 K. The peak observed in the heat capacity near the temperature of 260 K is associated with the orientational phase transition. In the high-temperature orientation-disordered phase of fullerite the heat capacity equaled to near 4.5R, it corresponds to a case in which the rotation of molecules C60 is close to free.

References

- 1 Atake T., Tanaka T., Kawaji H., Kikuchi K., Saito S., Suzuki S., Ikemoto I., and Achiba Y. Heat capacity measurements and thermodynamic studies of the new compound C60 // *Physica, C*.-1991.-185 –189.-P. 427-428.
- 2 Beyermann W.P., Hundley M.F., Thompson J.D., Diederich F.N., Grüner G. Low-Temperature Specific Heat of C60 // *Phys. Rev. Lett.*-1992.-68, N 13. -P. 2046–2049.
- 3 Lipin A. S., Mavrin B. N. Lattice dynamics of the orientationally ordered crystal C60 // *Phys. Stat. Sol. B*.-1993.-177.-P. 85–93.