

## 2. シアノアダマンタン立方相における X 線散漫散乱

竹内 隆 司

分子性結晶シアノアダマンタン ( $C_{10}H_{15}CN$ ) は室温で立方晶系、低温で単斜晶系に属す。分子の形 (図 1) は、球形に近い分子に C-N (シアノ基) が突きでた様な格好をしており、異方性が大きい。転移点は、我々の実験では、降温時で  $-40^{\circ}C$  ぐらいであった。Amoureux 等の構造解析の結果では立方相で、シアノアダマンタン分子は、分子軸が結晶軸の  $\langle 100 \rangle$  方向を向いた 6 方位をとって乱れている。我々は立方相における分子の乱れの様子を調べるために X 線散漫散乱の強度分布及び、温度変化を測定した。試料は粉末を溶融し徐冷することにより得られた単結晶を用いた。

観測の結果、逆格子点まわりの散漫散乱以外に、図 2 に示す様なかなり広い範囲に分布している散漫散乱がみられた。図 3 は (H K 0) 面での強度分布である。更に極大点での強度は温度降下と共に増大する傾向がみられた (図 4)。

分子の 6 方位モデルに基づき、散漫散乱の解釈を試みた。

- 1) 分子間の相関がないと仮定した場合には、散漫散乱の再現は出来なかった。
- 2) 分子間の相関を考慮して、分子の方位のペアのとり確率をパラメータにして最小自乗法でもとめて、散漫散乱強度を計算した。
- 3) 分子場近似を用いて散漫散乱強度を計算した。その際、相互作用エネルギーとして方位のペア間の斥力、van der Waals 力さらには、dipole 相互作用を考慮した。

図 2

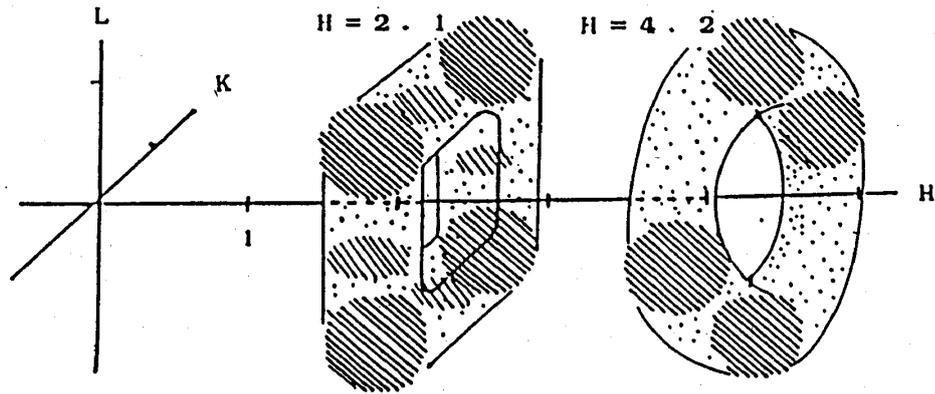


図 3

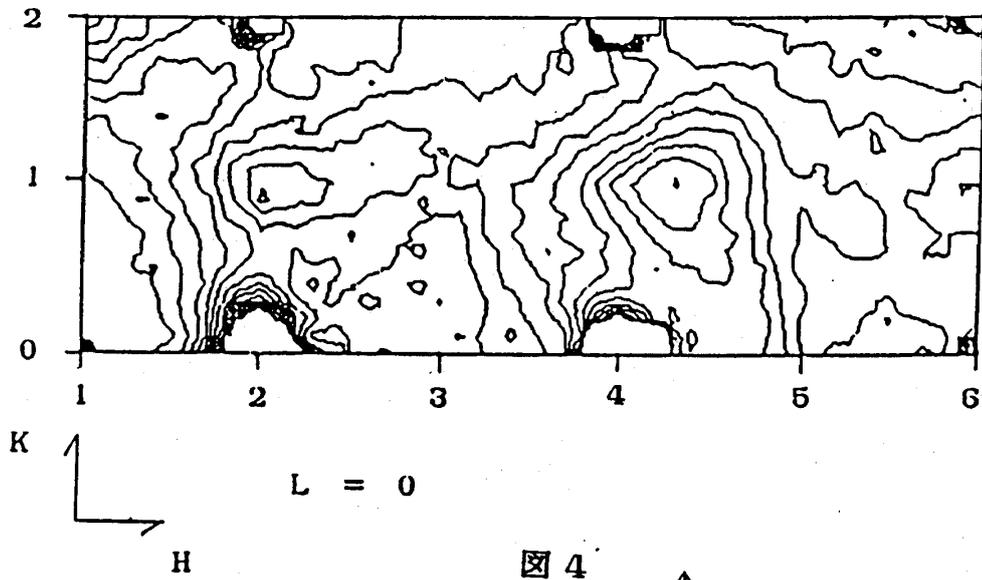


図 1

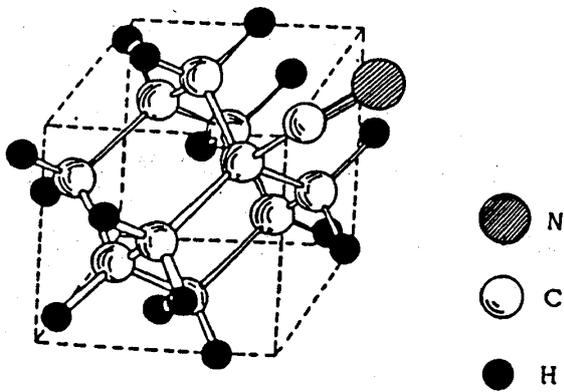


図 4

