

1P099

アルミニウムクラスターにおける化学結合の

電子ストレステンソル密度解析

(京大院・工*) ○寺嶋 亮*, 市川 和秀*, 立花 明知*

terashima@2006t8.mbox.media.kyoto-u.ac.jp

【序】古典的な物理法則ではなく量子論に基づく物理法則が現象を支配するナノ領域においては、いわば我々の世界とはまったく別の世界が広がっており、様々な新発見が期待されている。しかし、それだけに未解明な部分がまだまだ多く、ナノ領域における基礎理論の確立および充実が急務の課題となっている。本研究においては、立花により提案されている電子ストレステンソル密度を用いて、ナノ領域におけるアルミニウムに焦点を当てる。アルミニウムは、よく知られているように熱伝導性と電気伝導性に優れた軽金属であり、その加工性の良さと軽さから、我々の日常生活において幅広く使用されている。その為、ナノ領域におけるアルミニウムの性質についても注目が集まっている。過去のナノ領域におけるアルミニウムの研究としては、Jones や Chuang らの研究が挙げられる[1][2]。ここでは、アルミニウムクラスター(Al_n)の最安定構造が $n=2$ は線形構造、 $n=3\sim 5$ が平面構造、 $n=6$ 以降は立体構造となること、最安定構造にはある一定の規則性が見られることなどが示された。本研究においては、この $n=2\sim 10$ のアルミニウムクラスターの化学結合を対象として、量子論の中でも特に電子ストレステンソル密度に基づく計算を用いて詳細に解析した。

【理論・計算方法】 Jones や Chuang らにより明らかにされた $n=2\sim 10$ のアルミニウムクラスターをモデルとして採用し、B3LYP を汎関数とする密度汎関数(DFT)法を用いて第一原理計算を行い、領域密度汎関数理論(RDFT)解析を行った。基底関数は 6-311++G**である。

【結果と考察】 アルミニウムクラスターにおける電子ストレステンソル密度の最大固有値と固有ベクトルを描くことで、Al-Al 間の結合が負の最大固有値とその固有値に対する固有ベクトルの擬スピンドル構造により表されることが分かった(FIG.1)。また、アルミニウムクラスターの結合の強さにどのような特徴が見られるのかが、MRDFT 結合次数 b_ϵ によって明らかにされた(FIG.2)。更にその中において、エネルギーが低ければ安定であるという一般的な考えが電子ストレステンソル密度の固有値と結合次数により表現出来ることを見出された。なお、当日の発表においては、アルミニウムに水素が吸着したクラスターについても報告を行う予定である。

[1] R.O.Jones, Phys. Rev. Lett. **67**, 224 (1991).

[2] Feng-Chuan Chuang, C. Z. Wang, and K. H. Ho, Phys. Rev. B **73**, 125431 (2006).

[3] P.Szarek and A.Tachibana, J. Mol. Model, **13**, 651 (2007).

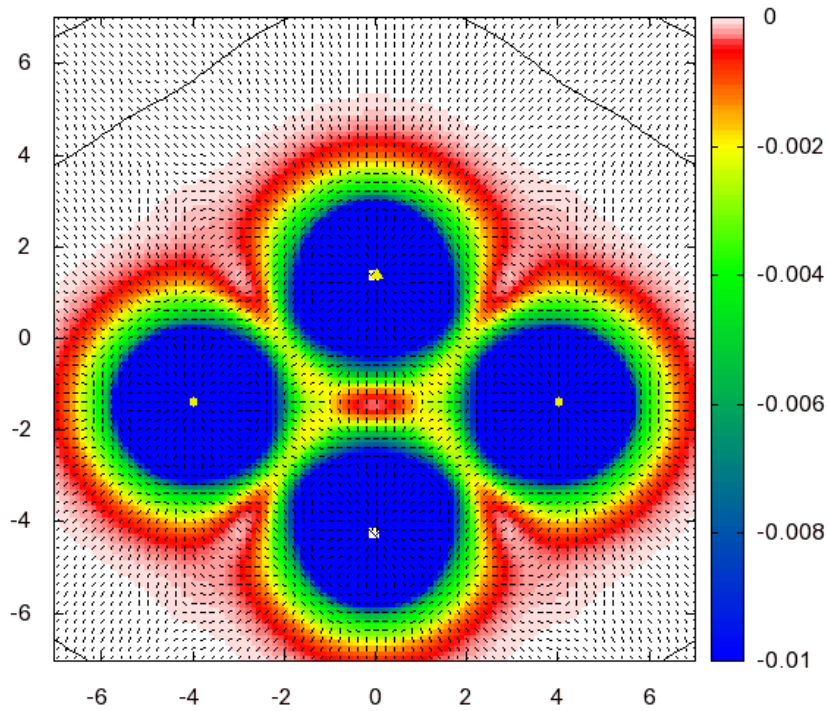


FIG.1:Al₄における電子ストレステンソル密度の最大固有値と固有ベクトル

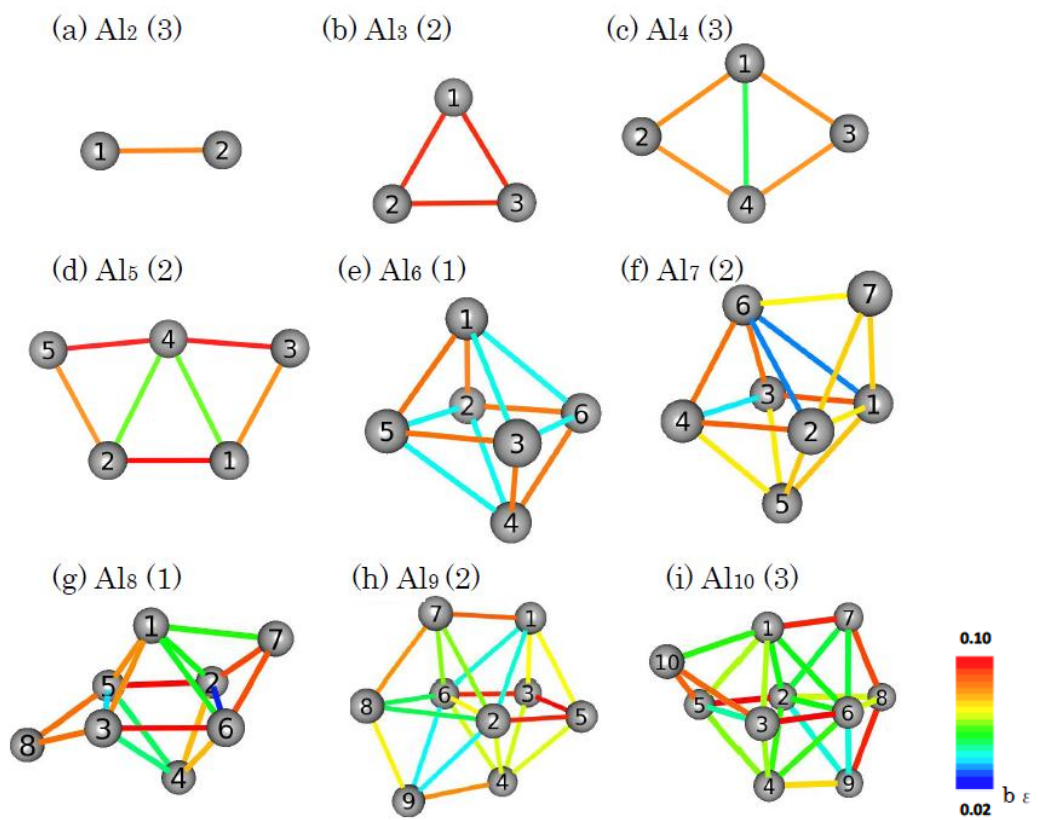


FIG.2:MRDFT 結合次数 b_ϵ