

水素化アルミニウムクラスターの電子ストレステンソル密度解析 および電流がおよぼす影響

(京大院・工*) ○寺嶋 亮*, 池田 裕治*, 市川 和秀*, 立花 明知*

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

【序】

環境破壊や枯渇といったリスクを伴う化石燃料の代替エネルギー源としてクリーンで豊富な水素が注目を集めている。本研究は、水素エネルギー社会の実現の鍵となる水素貯蔵材料の候補の一つである水素化アルミニウムに関するものである。水素化アルミニウムの中でもそのクラスターは、バルクと異なる挙動を示す為に理論的なアプローチが盛んに行われている。そこで本研究では、立花により提案された電子ストレステンソル密度による化学結合を解析する手法を用いて、アルミニウムクラスターおよび水素化アルミニウムクラスターの結合状態に関して理論的な解析を行った。また、立花により近年新たに提案されている電流存在下での電子状態を計算する手法を、いくつかの水素化アルミニウムクラスターに対して適用した。この手法は、電流により水素脱離を制御するという新たな可能性に関して、我々に重要な示唆を与えうるものである。

【理論・計算方法】

Kawamura らにより示されたアルミニウムクラスター (Al_n , $n=2\sim 8$)、水素化アルミニウムクラスター (Al_nH_m , $n=1\sim 8$ $m=1, 2$) をモデルとして採用し [1]、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 [2] を行った。また、一部の水素化アルミニウムクラスターに対しては、[3] に従って特定の方向に流れる電流存在下での電子状態計算を行った。前者の基底関数は 6-311++G**、後者の基底関数は LANL2DZ である。

【結果と考察】

水素化アルミニウムクラスターの各結合に関して、結合長と MRDFT 結合次数 b_e の値を示したものが FIG. 1 である。FIG. 1 より、MRDFT 結合次数 b_e は結合長との相関に優れている上に、Al-Al 間結合と Al-H 間結合を明確に区別出来ていることが分かる。FIG. 2 は、 Al_2H_2 (top) の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である。電流の存在を想定することにより、大きく影響を受けている様子が確認された。

[1] H. Kawamura, V. Kumar, Q. Sun and Y. Kawazoe, Phys. Rev. B **65**, 045406 (2001).

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

[3] M. Senami, Y. Ikeda, A. Fukushima, and A. Tachibana, Jpn. J. Appl. Phys. **49** (2010) 115002.

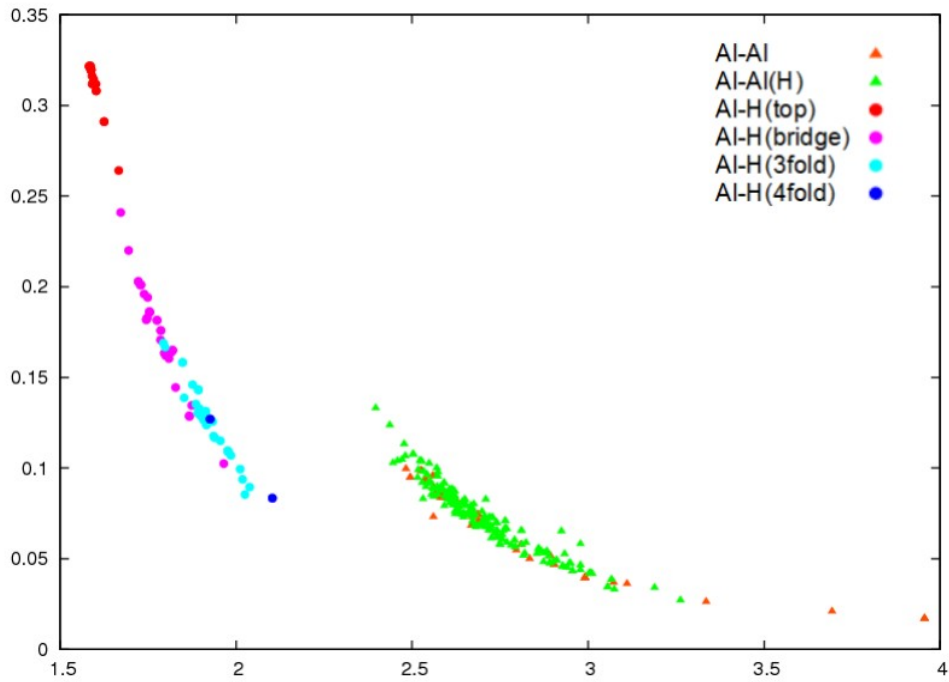


FIG.1: Al_n ($n=2\sim 8$), Al_nH_m ($n=1\sim 8$ $m=1,2$)の結合長とMRDFT結合次数 b_e の関係

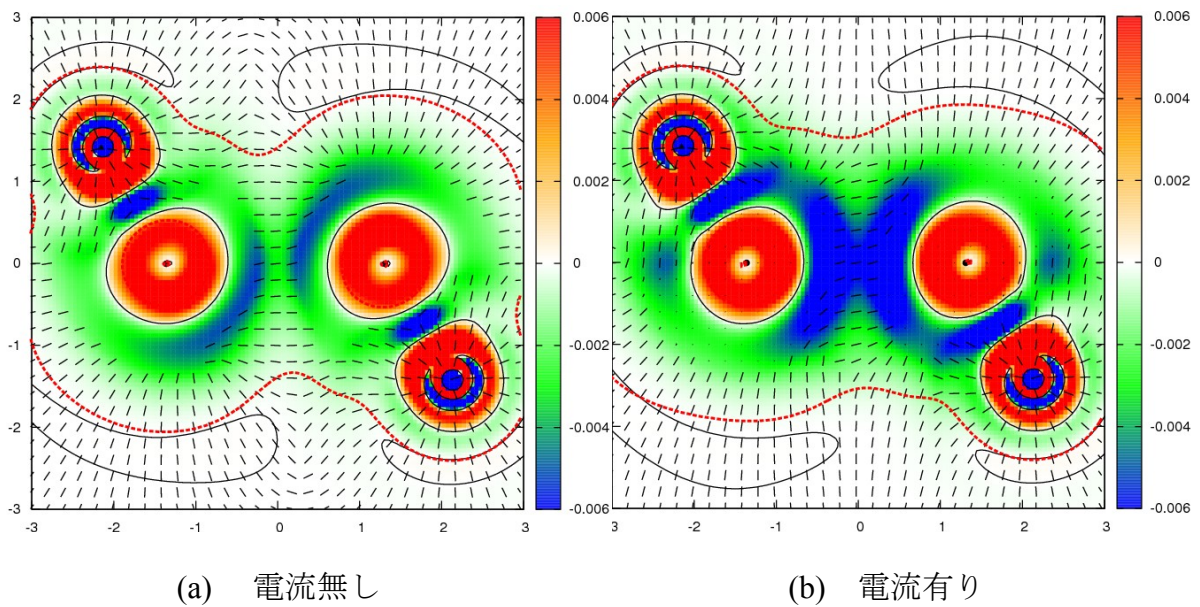


FIG.2: Al_2H_2 (top)の電子ストレステンソル密度の最大固有値と固有ベクトル