

クラスターの構造と安定性

物性若手夏の学校で 8月3日, 4日に行われた大阪大学理学部の交久瀬五雄先生の講義を要約しました。

クラスターとは、原子や簡単な分子が数個から数百個集まった系のことをいう。従って表面の原子数が内部の原子数よりも多いことがある。

研究する上での理想的な方法は、自由空間に浮かんだ自由なクラスターの性質を調べることであるが、自由空間に大量のクラスターをトラップすることが必要なので、上の方法は難しい。現在、クラスターの研究としてSTM、電子顕微鏡、質量分析法などによるものがなされている。クラスターと高分子の違いは、クラスターは、エネルギー的に準安定状態になっている、ということがあげられる。以下では、結合力の違いによってクラスターを分類してみる。

(ファンデルワールスクラスター)

He, Ne, Arなどの希ガスは、ファンデルワールス力で結合している。クラスターの構造は、表面エネルギーを得するようなものが安定である。この場合fcc(111)面で囲まれた形のクラスターが望ましいが、正四面体では表面エネルギーが大きい。そこでこの正四面体を組みあわせ、若干ひずませた五回回転対称の正二十面体形を考えると、これが安定になっていることがわかる。また正二十面体中に含まれる原子数は次式で表される。

$$N(n) = (10n^3 - 15n^2 + 11n - 3) / 3$$

(水素結合クラスター)

クラスターイオンは $(\text{H}_2\text{O})_n \text{H}^+$ の形で観測される。籠型の構造をしたものが安定で、20個のH-OとH-O 1個で1つの籠型 $[(\text{H}_2\text{O})_{21} \text{H}^+]$ を形成している。

(イオン結合クラスター)

$(\text{CsI})_n \text{I}^-$, $(\text{CsI})_n \text{Cs}^+$ のようなものがあげられる。直方体型で3辺の長さが同

程度のものが安定。正イオン ($(\text{CsI})_n \text{Cs}^+$ 等) 負イオン ($(\text{CsI})_n \text{I}^-$ 等) に含まれる原子数は必ず奇数であるので、直方体の辺の原子数は必ず奇数になる。

($(\text{CsI})_n^0$ は生成されてもすぐに壊れる。) 岩塩型構造の MgO 、 CaO のクラスターも直方体が安定となる。

(共有結合クラスター)

(C)_n は5回回転対称のサッカーボール型をしていると考えられる。

(金属結合クラスター)

前に述べた他のクラスターと異なり、valence electronがdelocalizeしている。このような状態で、金属結合によってクラスターを構成しているものである。電子からみるとクラスター内でポテンシャルが低く外では高い。従って、これは井戸型ポテンシャルと同等な議論が出来る。これがshell model (殻模型) であり、原子核と同様な粒子数と安定性の関係が成立する。以上の事から、原子核の反応に対応する様なクラスターの反応が考えられる。

文責: 高倉健
山田篤志