

ナノクラスタの構造安定性

ナノクラスター(大きさ百万分の1mm程度の原子の集まり)では、構造や物性、化学反応性などがバルクとは異なるので、ナノクラスターに固有の性質を利用することで、従来とは違った機能性材料が生まれると期待されている。他方、近年の電子デバイスの微細化は目覚ましく、もし、このままのペースが続けば、ナノのサイズ領域に達する日もそれ程遠くはない。従って、ナノクラスターの構造や物性を明らかにすることは、新材料創製や素子の微細化、高集積化の観点から重要で大変な課題である。

当研究部門では、東北大学金属材料研究所と共同で、半導体族元素クラスターの構造や安定性に関して、表面誘起解離実験および理論計算の両面から研究を進めている。表面誘起解離実験では、クラスターを低エネルギーで固体表面に衝突させ、フラグメントを観測することでクラスターの安定性を推察する。この手法では、どのサイズのクラスターが相対的に安定かが分かるが、クラスターの構造についての情報は得られない。一方、理論計算では安定構造が予測できるが、対象とする系にどのような計算手法が適しているか、また、数ある構造の中で、どれが最安定かは判断が難しい。従って、実験と計算結果を比較検討することで、より信頼性の高い知見を得

ることが出来る。これまでに、Sn(スズ)クラスターについて実験と計算との比較を行った。Snのバルクでは、常温では金属相が安定であるが、低温(<286K)では半導体相が安定となる。このような性質が、ナノクラスターにおいてどう変化するかは興味深い問題である。

図1にSnクラスター15~20量体の表面誘起解離スペクトルを示す。フラグメントは7~10量体に分布しており、衝突によりクラスターがほぼ同じサイズの二つの断片に解離することが分かる。このようなパターンは、B3PW91と呼ばれる汎関数を用いた計算から得られた解離エネルギーで説明できることが分かった。このことは、そのような手法が、Snクラスターの最安定構造を予測するのに適することを示している。図2には計算から得られたSnクラスターの最安定構造を示す。このサイズ領域では、クラスターは二つのサブユニットが融合したような形をとることが分かる。図2の構造はSi(シリコン)やGe(ゲルマニウム)クラスターに関して提案されているものと非常に近く、金属元素のクラスターがとるコンパクトな構造とは異なっていて興味深い。今後、他元素のクラスターや、より広いサイズ範囲について、研究を進めてゆく予定である。

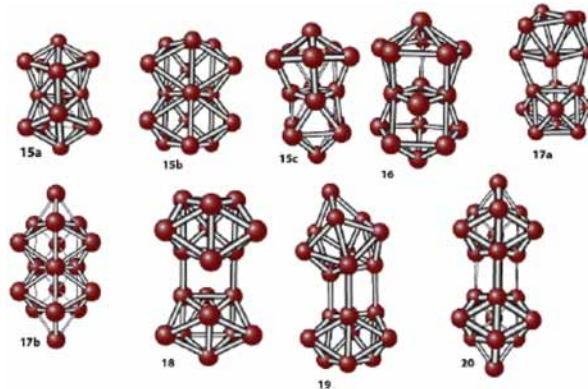
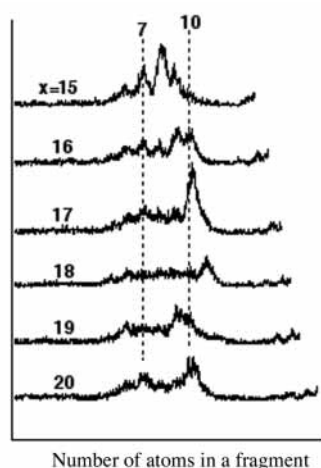


図1 Snクラスター(15-20量体)の低エネルギー表面誘起解離スペクトル

図2 理論計算から得られたSnクラスターの構造



たい ゆたか
多井 豊
tai.y@aist.go.jp
基礎素材研究部門

関連情報

- Y. Tai and J. Murakami : Chem. Phys. Lett. 339, 9 (2001).
- Y. Tai, J. Murakami, C. Majumder, V. Kumar, H. Mizuseki, Y. Kawazoe : J. Chem. Phys. 117, 4317 (2002).