

研究 成 果 報 告 書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		構造を特定した遷移金属複合クラスターの分光に基づく安定異性体の形成			
研究テーマ (欧文) AZ		Formation of stable isomers of transition metal composite clusters			
研究氏 代 表 名 者	カナ CC	姓) コヤス	名) キイチロウ	研究期間 B	2010 ~ 2011 年
	漢字 CB	小安	喜一郎	報告年度 YR	2012 年
	ローマ字 CZ	KOYASU	KIICHIROU	研究機関名	東北大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		東北大学 大学院理学研究科・助教			
<p>概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。)</p> <p>本研究では、遷移金属複合クラスターの安定異性体系列の探索、ならびに共通する安定ユニットの特定を目的とし、イオン移動度分析法を適用して安定異性体系列の探索を行った。対象として、II-VI 型半導体としてナノエレクトロニクス分野での応用が期待されている酸化亜鉛(ZnO)を選択し、ZnO クラスター、$(\text{ZnO})_n^+$の構造の特定とサイズ変化について検討した。</p> <p>レーザー蒸発法により生成した$(\text{ZnO})_n^+$をドリフトセルに高エネルギーで入射すると、$n \geq 8$ で、よりコンパクトな構造へと変化するを見出した。理論計算では $n = 7-8$ で単環構造から複環、もしくは立体構造へと変換することが提唱されており、このような構造変化を実際に観測することができた。加えて $n = 6$ の構造が、隣接する $n = 5$ および 7 の系列と異なることを明らかにしたが、この構造は従来の理論計算では最安定ではなく、本研究によって安定ユニットにつながる構造が得られたと考えている。</p> <p>このような変化は、低エネルギー入射の際には観測されなかったことから、高エネルギー入射によるクラスターの加熱(アニール)によって、より安定な構造への変化を誘起することができた。さらに、イオン移動度分析法を用いて得られた3種類の異性体系列について換算移動度のサイズ依存性を決定し、シミュレーション結果との比較から、$(\text{ZnO})_n^+$ではサイズ増加とともに(A)直線・ジグザグ構造、(B)環状構造、(C)立体構造へと変換すると決定した。</p> <p>一方、炭素およびケイ素といった共有結合を形成する元素からなるクラスターについて、分離した異性体ごとに紫外光解離実験を適用した。炭素クラスター(C_n^+)では $n = 30-40$ で環状構造とフラレーン構造の異性体が共存している。この領域で C_n^+に紫外光解離を適用したところ、フラレーン構造では中性の C_2 が連続的に脱離するのに対して、環状構造からは中性の C_{14} が脱離しやすいことを明らかにした。これは、中性の C_{14} は環状構造の場合に Hückel 則にしたがって安定であることが知られており、多環構造の C_n^+ から中性の C_{14} が脱離しやすかったためと結論付けた。</p>					
キーワード FA	クラスター	イオン移動度分析	遷移金属	炭素	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要^{EZ}

Zinc oxide, ZnO, is a promising candidate for nanoelectronics field as II–VI type semiconductors. In order to search stable isomer units, we have applied ion mobility spectrometry to zinc oxide cluster cations, $(\text{ZnO})_n^+$, and investigated structural changes with their size.

We have found that injection of $(\text{ZnO})_n^+$ with high energy into a drift cell changes their structures into more compact at $n \geq 8$. The results supported theoretical calculations which suggested structural changes from monocyclic to polycyclic or 3d structures at $n = 7-8$. Furthermore, $n = 6$ showed more compact structural series different from the neighboring size of $n = 5$ and 7, although compact structure of $(\text{ZnO})_6^+$ was not the most stable from theoretical calculations. We also observed the annealing effect on the structure of $(\text{ZnO})_n^+$. We confirmed structural changes by comparing with simulations of their reduced ion mobilities.

On the other hand, we have applied isomer-resolved photodissociation (PD) to carbon and silicon clusters. Coexisting isomers with cyclic and fullerene structures of carbon cluster cations, C_n^+ , were separated in the size range of $n = 30-40$. We have observed isomer-dependent mass distributions of fragment ions. Sequential loss of neutral C_2 was predominantly observed from PD of fullerene structure, while neutral C_{14} -loss was predominantly observed from PD of cyclic isomers. We concluded that polycyclic isomers tended to dissociate with the C_{14} -loss because of the stability of neutral cyclic C_{14} .