

有機-金属相互作用における化学結合、ファンデルワールス引力、分子歪みの効果の役割

工学研究科 精密科学・応用物理学専攻 柳澤 将

目的: 著者は以前、 Alq_3 分子が、金属表面に強く化学吸着する構造を第一原理計算シミュレーションで見いだしたが、そのような構造でも、ファンデルワールス(vdW)力による物理吸着相互作用が少なからずあることも分かった。本研究では、その化学吸着でvdW引力がどのように生じているかを明らかにした。

研究法: Alq_3 分子がMg表面に化学吸着する構造を、第一原理分子動力学シミュレータSTATEによって再現し、その構造に対して第一原理vdW密度汎関数(vdW-DF)によってvdW引力の寄与を計算した。

結果: 再現された化学吸着構造では、強い化学結合が見られる一方で、吸着に伴う分子や表面の歪みが同程度あり、化学吸着による吸着の安定化はほぼ打ち消される。しかし、vdW引力が分子内の配位子と基板間で少なからず働き、結果、化学吸着構造が安定化されることがわかった。vdW引力は、配位子-基板間に大きく広がるのも分かった。

計算詳細データ:

使用計算機: SX-9、SX-8R

CPU時間: 1回のジョブで平均4時間
(実際には、この規模のジョブを構造探索のため何度も繰り返す)

ベクトル化率: 99%

並列度: 16 コア

(いずれも、STATEプログラムの計算部)

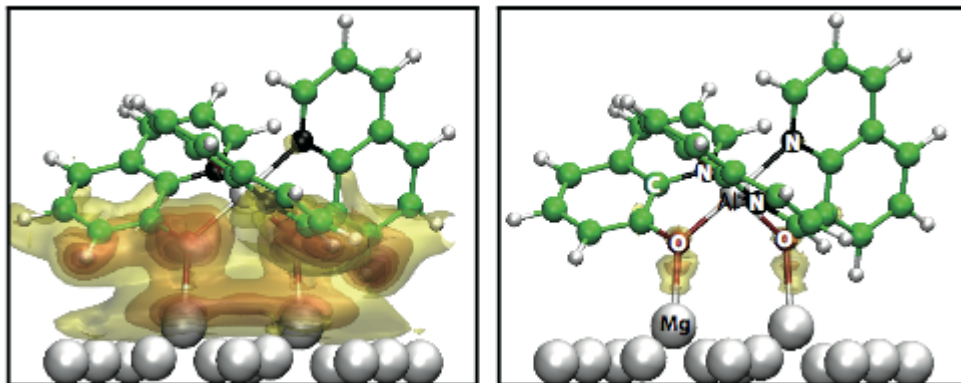


図: 化学吸着における相互作用エネルギーの等高面プロット。左がvdW引力、右が化学結合。