

## 1次元並進対称性のある SiC および C の構造探索

(和歌山大院システム工<sup>1</sup>、和歌山大システム工<sup>2</sup>、東北大院理<sup>3</sup>、量子化学探索研究所<sup>4</sup>)

○箕土路 祐希<sup>1</sup>、山門 英雄<sup>2</sup>、大野 公一<sup>3,4</sup>

【序】 化学反応経路自動探索の方法である超球面探索法(SHS 法)<sup>1</sup>が 2004 年に開発され、SHS 法を一般化した一般化超球面探索法(GSHS 法)<sup>2</sup>も考案されている。GSHS 法を用いた C および Si の低次元構造の探索が澤田らによって報告されている<sup>3</sup>。今回、SiC および C の擬 1 次元構造について、原子が直線上にあるという制約なしで GSHS 法により構造探索を行った。

【方法】 1 つの並進ベクトルに 1 変数を与えて、1 つ目の原子は原点に固定、2 原子目に 2 変数、3 原子目以降に 3 変数を与えることとした。計算は Gaussian プログラム<sup>4</sup>の周期的境界条件(PBC) オプションを使用し、計算レベルは C<sub>3</sub>/unit では RLSDA/STO-3G で、Si<sub>2</sub>C<sub>2</sub>/unit では RHF/STO-3G とした。Si<sub>2</sub>C<sub>2</sub>/unit の探索において SCF のオプションとして、maxcyc=512, conver=7 を設定した。

【結果】 擬 1 次元炭素の構造探索において、直線状のカルビン構造以外の構造も得られた(図 1)。これは、原子が直線上にあるという制限なしで探索したために得られた構造であると考えている。

擬 1 次元系 SiC の構造探索でも直線状構造以外の構造が得られた。擬 1 次元系 SiC では直線状構造よりも安定な構造が得られている。つまり Si<sub>2</sub>C<sub>2</sub>/unit の構造探索においては、原子に 3 方向の自由度を与えることが、より安定な構造を探すうえで重要であると考えている。

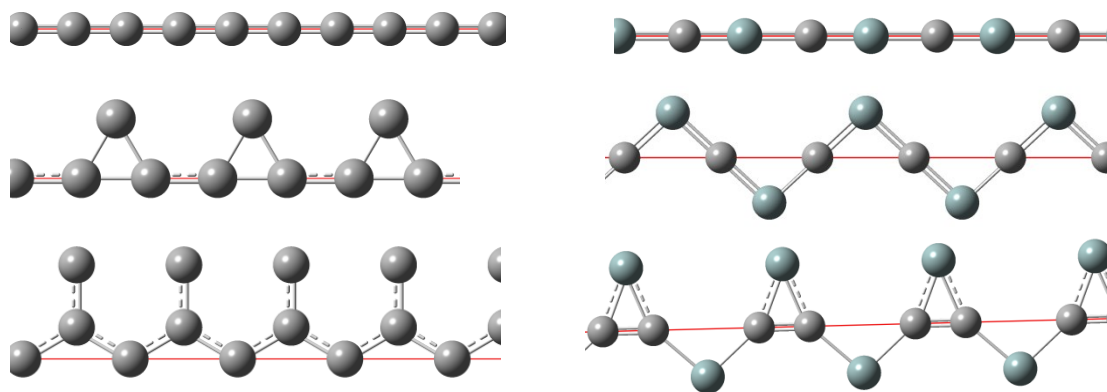


図 1 : 擬 1 次元系の C<sub>3</sub>/unit の構造 (左) と、Si<sub>2</sub>C<sub>2</sub>/unit の構造 (右)。炭素原子が灰色、ケイ素原子が紺色である。C(C<sub>1</sub>あたり)の相対エネルギーは左上が 0.0 kJ/mol, 左中段が 119.5 kJ/mol, 左下段が 152.7 kJ/mol である。SiC(Si<sub>1</sub>C<sub>1</sub>あたり)の相対エネルギーは右上が 0.0 kJ/mol, 右中段が-62.0 kJ/mol, 右下段が-267.5 kJ/mol である。

1) K. Ohno and S. Maeda, *Chem. Phys. Lett.* **2004**, *384*, 277-282. ; S. Maeda and K. Ohno, *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 5742-5753. ; K. Ohno and S. Maeda, *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 8933-8941.

2) 大野公一、長田有人、前田理、分子科学討論会 **2010**, 1E15.

3) 澤田裕、山門英雄、大野公一、分子科学討論会 **2013**, 1P116 ; 山門英雄、澤田裕、大野公一、分子科学討論会 **2013**, 1E18.

4) M. J. Frisch *et al.*, Gaussian 09, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.