

## CP および CAs ハイブリッド構造の探索

○吉川 剛史<sup>1</sup>、沖 卓人<sup>2</sup>、高田谷 吉智<sup>2</sup>、山門 英雄<sup>1</sup>、大野 公一<sup>3</sup>

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

[序] 新規 CN ハイブリッド格子構造の探索が、2018年に山門らによって行われている<sup>1,2)</sup>。この時に得られた CN ハイブリッド構造の窒素を、同族元素であるリンおよびヒ素に置き換えることによって新規なハイブリッド構造の探索を行った。計算には Gaussian09 および VASP プログラム<sup>3)</sup>を用いた。

[計算方法] CP および CAs ハイブリッド構造について、RHF/STO-3G の精度から計算をはじめ、得られた構造をさらに高い計算精度で構造最適化を行った。

[結果・考察] 今回の構造最適化から得られた CP および CAs ハイブリッド構造をそれぞれ図 1 および図 2 に示す。通常分子では、炭素-リン間およびリン-リン間、炭素-ヒ素間、ヒ素-ヒ素間の一重結合長はそれぞれ 1.82, 2.20, 1.98, 2.42 Å 程度であるが、今回計算した CP および CAs ハイブリッド構造では上記の値より長くなる傾向が見られた。炭素-リン間は 0.04-0.12 Å、リン-リン間は 0.06-0.30 Å、炭素-ヒ素間は 0.04-0.10 Å、ヒ素-ヒ素間は 0.08-0.22 Å 結合長が長くなっていった。これは、構造内のひずみを反映していると考えている。

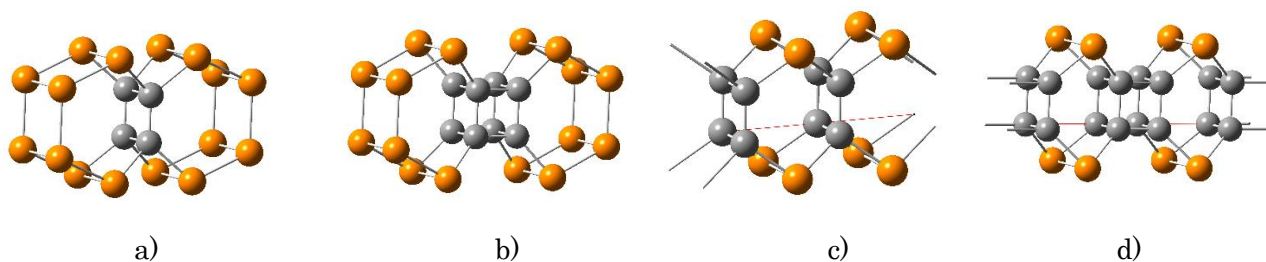


図 1 CP ハイブリッド構造 [a), b)は分子、c), d)は無限系]

a)  $(P_4C_2P_4)_2$  (B3LYP/cc-pVTZ) b)  $(P_4C_4P_4)_2$  (B3LYP/cc-pVTZ)

c)  $[(C_2P_2)_2]_n(n=\infty)$  (B3LYP/cc-pVTZ) d)  $[(C_2P_2C_2)_2]_n(n=\infty)$  (RHF/6-31G)

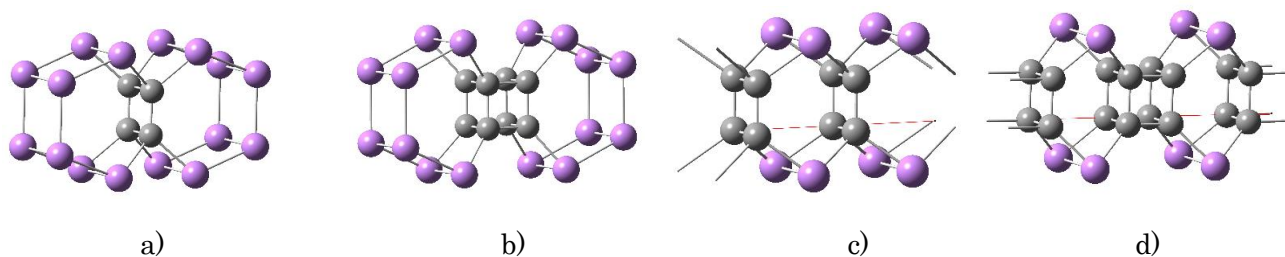


図 2 CAs ハイブリッド構造 [a), b)は分子、c), d)は無限系]

a)  $(As_4C_2As_4)_2$  (B3LYP/cc-pVTZ) b)  $(As_4C_4As_4)_2$  (B3LYP/cc-pVTZ)

c)  $[(C_2As_2)_2]_n(n=\infty)$  (B3LYP/cc-pVDZ) d)  $[(C_2As_2C_2)_2]_n(n=\infty)$  (B3LYP/cc-pVDZ)

## [参考文献]

1)山門 英雄, 大野 公一, 日本化学会 第 98 春季年会 2018, 1E2-33.

2)H. Yamakado, Y. Kodaya, T. Oki, K. Ohno, ICQC 2018 (Menton, France), B155.

3)G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B, 1996, 54, 11169.