

SMP045-01

会場:301B

時間:5月24日 14:15-14:30

シラン・水素結晶における圧力誘起分子間相互作用 Pressure-induced intermolecular interactions in crystalline silane-hydrogen

Wai-Leung Yim¹, John S. Tse², 飯高 敏晃^{3*}

Wai-Leung Yim¹, John S. Tse², Toshiaki Iitaka^{3*}

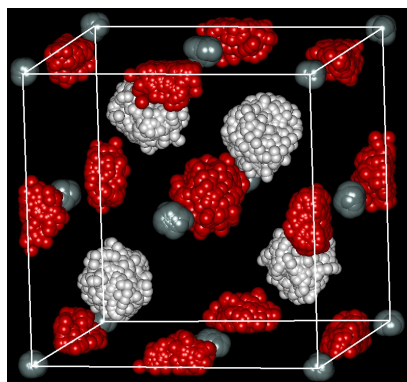
¹Institute of High Performance Computing, ²University of Saskatchewan, ³理化学研究所基幹研究所

¹Institute of High Performance Computing, ²University of Saskatchewan, ³RIKEN ASI

最近、高圧力で発見されたシラン・水素複合結晶の構造とダイナミクスを第一原理分子動力学計算を用いて調べた。シランと水素は、分子の中心が格子点に固定されているが、分子の向きがランダムである結晶構造をとることが分かった。Natural Bond Orbital 分析により、二つの分子間の donor-acceptor 相互作用が圧力により増強されることが分かった。実験で観測された vibron 振動数の負の圧力依存性は、この分子間相互作用によるものである。シラン・水素複合結晶が木星型惑星内部に存在する可能性について検討する。

<http://www.iitaka.org/~neutron/theory.html>

<http://www.rikenresearch.riken.jp/eng/research/6495>



キーワード: 水素, シラン, 高圧力, 分子間相互作用, バイブロン, 分子動力学

Keywords: hydrogen, silane, high pressure, intermolecular interaction, vibron, molecular dynamics