

パイライト型構造の電子状態

米山 瑠華* (山梨大・工)、則竹 史哉 (山梨大・院総合研究部、理研)

Electronic state of pyrite structure

Ruka YONEYAMA* (University of Yamanashi)

Fumiya NORITAKE (University of Yamanashi, RIKEN)

Pyrite structure (MX_2) has simple cubic lattice and is characterized by X-X bonding, MX_6 octahedron, and a X element making bond with 3 M elements and a X element. Hauerite is a pyrite structure mineral with composition of MnS_2 . It is known that the hauerite has a long bond distance compared with pyrite-type structure minerals composed of other transition metal elements. In this study, molecular orbital calculation was performed using MP2 method and aug-cc-pVTZ basis functions on the cluster ($\text{H}_6\text{S}_{12}\text{M}$, $\text{M} = \text{Mn, Fe, Co, Ni}$) as part of the pyrite-type structured crystal. As a result of structural optimization, the elongation of bonding distance between Mn and S comparing with other transition metal elements and high-spin state of manganese consistent with experiments were reproduced.

MX_2 (M は主として遷移金属元素、X は主としてカルコゲン元素)の化学組成を持つパイライト型構造は単純立方格子を持ち、X 元素同士の結合、1 つの M 元素に X 元素が 6 個配位した八面体、1 つの X 元素に対して 3 つの M 元素と 1 つの X 元素が結合していることで特徴づけられる (Eliot, 1960)。パイライト型構造のうち遷移金属元素の席がマンガで構成されるハウエライトは他の遷移金属元素によるパイライト型構造と比較して M-X 結合距離が長いことが知られている (Tokuda et al., 2019)。

本研究では結晶構造の一部を取り出し

Keywords: Pyrite, Molecular Orbital Calculations

*Corresponding author: t16am035@yamanashi.ac.jp

たクラスター ($\text{H}_6\text{S}_{12}\text{M}$, $\text{M} = \text{Mn, Fe, Co, Ni}$) に対して分子軌道計算を実施した。分子軌道計算は Schrödinger 方程式を数値的に解く手法で分子系の電子状態を非経験的に求めることができる。

構造最適化を行った結果、密度汎関数法である PBE 法ではすべての M-X 距離がほぼ等しくなるが MP2 法および aug-cc-pVTZ 基底関数を用いることでマンガと硫黄の結合距離が他の遷移金属元素に比べ長いことを再現した。また軌道解析の結果から他の実験と調和的であるマンガのハイスピン状態を確認した。本講演ではさらに詳細な議論を軌道解析に基づいて行う。