30p-A7-4

# スピンクラスター形成の熱力学的考察

## Thermodynamic considerations on formation of spin clusters

東工大総理工　°劉 カン，伊藤　治彦

Tokyo Institute of Technology, °Xuan Liu, Haruhiko Ito

E-mail: liu.x.ad@m.titech.ac.jp

少数個のアルカリ金属原子からなるスピンクラスターは，構成原子数 n が偶数のとき全スピン S が 0 において，n が奇数のとき S=1/2 において最も安定になる．S が大きくなると，クラスターの形状が変化し，最安定状態とは全く異なった振る舞いを示すようになる[1]．我々はこれまでに Li, Na, K, Rb, Cs の全ての安定同位体について，密度汎関数法を用いて 8 量体までの可能なスピン状態における形状，エネルギー，結合長などを系統的に調べた[2]。さらに，従来の理論では高スピン状態において実験値とのずれが目立つが，スピン偏極した Rb 及び Cs で作られる最高スピン状態 S=n/2 のクラスターに対して実験値との整合性がよい計算法を探索し, 14 量体まで調べた[3]. 今回，レーザー冷却した原子によってスピンクラスターを non-wetting 基板上で自己組織化する可能性について論じる．

図 1 に最安定状態の $Rb_n$ の自由エネルギーとクラスターサイズ(n≦14)の関係を，図 2 に最高スピン状態の場合を示す．ここで，ΔG は B3P86/Lanl2dz で計算した $Rb_{n+1}$ と $Rb_n$ の自由エネルギーの差分である．S=0 または S=1/2 のとき 2, 3, 6, 8, 12 量体の生成が可能である．一方，S=n/2 のとき 2 量体のみ生成可能である．これらより，スピンクラスターの自己組織化において，冷却原子の磁気光学トラップからの 1 回ローディングのみでは，限られたスピン状態でしかクラスターの生成が起こらないことが分かった。

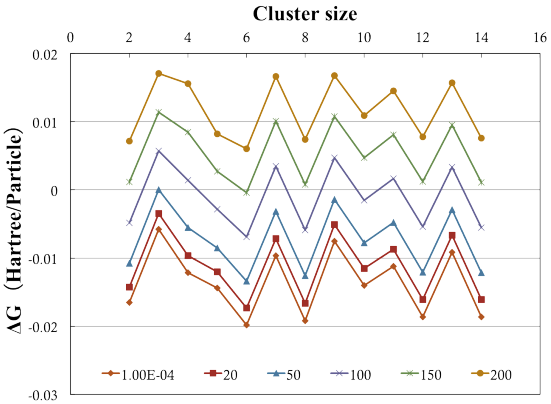


Fig1. Relation between Gibbs free energy G and cluster size for the lowest-spin Rb clusters.

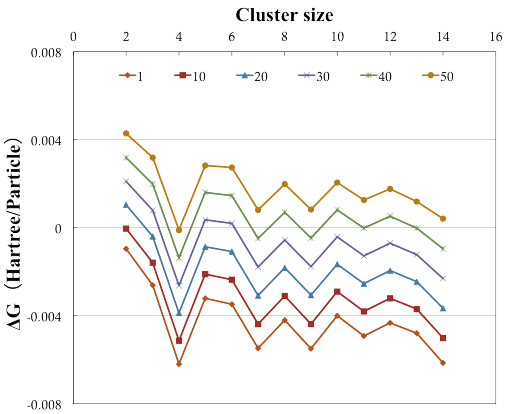


Fig2. Relation between Gibbs free energy and cluster size for the highest-spin Rb clusters.

[1] X. Liu, K. Sagawa, H. Ito, The 11th International Conference on Near-Field Optics, Nanophotonics and Related Techniques, O-93, 2010.

[2] Xuan Liu, Haruhiko Ito, Eiko Torikai, J. Nanopart. Res., 14:1050, 2012.

[3] 劉カン，伊藤治彦，第 59 回応用物理学関係連合講演会，16a-B11-7、2012.



© 2013 年　応用物理学会