

## グラファイト構造の安定性に対する簡単なアプローチ

### A Simple Approach to the Stability of the Graphitic Structure

三重大院工<sup>1</sup> ○伊藤 智徳<sup>1</sup>, 秋山 亨<sup>1</sup>, 中村 浩次<sup>1</sup>

Mie Univ.<sup>1</sup>, Tomonori Ito<sup>1</sup>, Toru Akiyama<sup>1</sup>, Kohji Nakamura<sup>1</sup>

E-mail: tom@phen.mie-u.ac.jp

1. はじめに これまで我々は  $A^{8-N}B^N$  化合物における 3 配位グラファイト構造の出現が、配位数の減少に伴う平衡原子間距離の急激な減少と 3 配位での結合次数の増大に密接に関連していることを指摘してきた [1]。本研究では、結合次数、平衡原子間距離を用いた簡単なエネルギー式を提案し、3 配位構造と 4 配位構造の相対的安定性の支配因子について検討を行う。

2. 計算方法 結合次数  $p$  とイオンの静電エネルギーを考えると 3 配位構造と 4 配位構造の凝集エネルギー  $D_e$  比は簡単に次式で与えられる。

$$\frac{D_e^{(3)}}{D_e^{(4)}} = \frac{3}{4} K p^{(3)} \frac{r_e^{(4)}}{r_e^{(3)}}, \quad (1)$$

ここで上付き数字(3), (4)は 3 配位と 4 配位を意味し,  $K (>1)$  は層間相互作用に関連する補正係数,  $r_e$  は平衡原子間距離である。 $p^{(3)}$  は Bond Order Potential [2]を用いて, 3 配位, 4 配位, 6 配位構造に関する第一原理計算結果を再現するように定める[1]。

3. 計算結果及び考察 図 1(a)は 5 つの  $A^{8-N}B^N$  化合物 (C, BN, BeO, Si, AIP) について (1) 式の関係を示したものである。 $D_e^{(3)}/D_e^{(4)}$  と  $p^{(3)} \times r_e^{(4)}/r_e^{(3)}$  の間に明確な比例関係が存在していること, さらに  $D_e^{(3)}/D_e^{(4)} > 1$  に位置する C と BN では 3 配位構造が安定,  $D_e^{(3)}/D_e^{(4)} < 1$  における BeO, Si, AIP では 4 配位構造が安定であることから, (1)式が妥当であることがわかる。図 1(b)は, これまでに指摘してきた配位数の減少に伴う平衡原子間距離の急激な減少を特徴づ

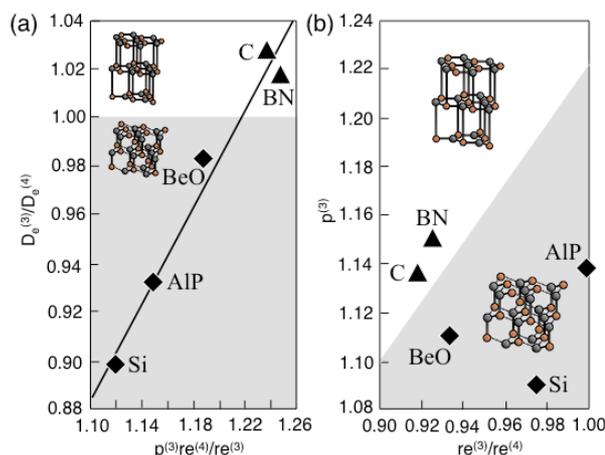


図 1: (1)式の関係(a)および構造状態図(b)

ける  $r_e^{(3)}/r_e^{(4)}$  と 3 配位での結合次数の増大を特徴づける  $p^{(3)}$  をパラメータとする構造状態図を示したものである。ここで  $D_e^{(3)}/D_e^{(4)} = 1$  により得られる相境界は図 1 に示した比例関係から見積もった値  $K=1.09$  を用いて定めた。この図から BeO については, 等電子系列である C, BN と比較して  $p^{(3)}$  が小さいことが, 3 配位構造の不安定化をもたらしていることがわかる。一方, Si, AIP のような原子番号の大きな元素から構成される  $A^{8-N}B^N$  化合物においては, 層間距離が小さくなること (配位数が増加する傾向にあること) を反映して  $r_e^{(3)}/r_e^{(4)}$  が増加して 1 に近づく傾向にあり, その結果として 3 配位構造を安定化するために必要な  $p^{(3)}$  が 1.2 程度と非常に大きくなる。このために 3 配位構造をもつことができないと考えられる。

#### 参考文献

- [1] T. Ito *et al.*, J. Cryst. Growth (submitted).  
 [2] G. C. Abell, Phys. Rev. B 31 (1985) 6184.