

無機化合物の原子間距離の統計的分布の解析

Statistical analysis of local crystal structures of inorganic materials

平野健太¹, 桂ゆかり^{1,2}, 木村薫¹

東大新領域¹, 物材機構²

¹Univ. of Tokyo, ²National Institute for Materials Science,

E-mail: 3140983647@edu.k.u-tokyo.ac.jp

【背景】無機化合物の結晶構造は複雑であり、局所結晶構造ですら予測することが困難である。無機化合物中の原子間距離を予測する古典的な手法として、元素ごとに半径を定義するというアプローチが行われてきた。しかし、半径の定義にはさまざまなものがある。原子半径、金属半径、ファンデルワールス半径のほか、さまざまな価数・配位数について異なるイオン半径が定義されている。このため、どの半径を使えば正しく原子間距離を予測できるのかの判断が困難であった。近年、材料科学にデータ科学を活用する Materials Informatics(MI)の研究が急速に発展している。Materials Project [1]は MI を支える無償データベースであり、約 13 万種類の無機結晶構造が、第一原理計算によって緩和された原子座標とともに掲載されている。そこで本研究では、ここに掲載された安定な結晶構造を横断的に解析し、原子間距離の分布を解析することで、無機化学の世界を新しい視点で理解することを試みた。

【手法】Materials Project から得られた結晶構造から、種類の安定な結晶構造のデータを抽出した。これらの結晶構造を独自開発のプログラムで解析することによって、3,084 種類の元素のペアに関する 731,202 本の原子間距離データを取得した。それぞれの元素のペアについて原子間距離のヒストグラムを作成した。これらの分布を単体中の原子間距離や、さまざまな原子半径・イオン半径の和と比較することによって、実在化合物における原子間距離の分布について考察した。

【結果と考察】得られた原子間距離の例を図 1 に示す。原子間距離のヒストグラムはいずれも大きな分布をもつものとなり、単一の半径の和としては表現できないものとなることを見て取れた。原子の組み合わせのみから一意に原子間距離を決定することは難しいと示唆されたものの、単体金属および金属間化合物の結晶構造データから、同一元素同士の原子間距離のヒストグラムを作成すると、二峰性になる元素と一峰性になる元素があり、単体内の原子間距離の分布と関連があることが示唆された。

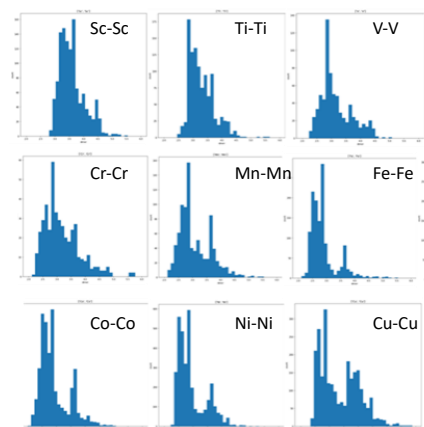


図 1. 原子間距離のヒストグラム

【結言】無機化合物の結晶構造を理解する手がかりとして、原子間距離の分布を物質横断的に解析した大規模データセットを作成することに成功した。今後は、このデータを活用した Materials Informatics 技術の開発に取り組む。

【参考文献】[1] A. Jain. *et al.*, *APL Materials*, **1(1)**, 011002 (2018). URL: <https://materialsproject.org/>