

目次

クラスターを学ぶための準備

1. 量子力学の基礎

1.1	シュレーディンガー (Schrodinger) 方程式	2	方程式7
1.1.1	シュレーディンガー方程式 の導出	3	1.1.4 波動関数の規格化と確率
1.1.2	演算子と固有値問題	5	1.1.5 物理量と期待値
1.1.3	1次元の井戸型ポテンシャル とシュレーディンガー		1.1.6 不確定性原理の簡単な確認12
			1.2 量子力学の基礎のまとめ
			..13

クラスターの基礎理論

2. 幾何構造と電子構造

2.1	希ガスクラスター	28	2.3.2 塩化物イオン-水溶媒和 クラスター	43
2.2	分子クラスター	31	2.4	イオン結合クラスター
2.2.1	水クラスター-鎖状, 環状構 造から3次元構造へ	32	2.4.1	ヨウ化セシウムクラスター イオンの構造
2.2.2	水クラスター-3次元構造	38	2.4.2	安定なクラスターの観測48
2.2.3	水クラスターイオン -安定な籠状構造	39	2.4.3	電子線回折による クラスターの構造解明
2.3	溶媒和クラスター	41	2.5	炭素クラスター
2.3.1	セシウムイオン-メタノ- ル溶媒和クラスター	41	2.6	金属クラスター
				54
				56

x	目次
2.6.1	ナトリウムクラスター56
2.6.2	電子殻模型57
2.6.3	電子構造と幾何構造の相克63
2.6.4	金クラスター65

2.6.5	遷移金属クラスター 70
2.6.6	水銀クラスターの電子構造 - サイズによる金属-非金属 転移 . . .73
	参考文献 . . . 7 6

3. 光学的性質と磁氣的性質

3.1	Na + nの光吸収スペクトル 78
3.2	遷移金属クラスターのスピ ン状態および磁性82
3.2.1	クラスターの磁性の測定8 4

3.2.2	ランジュヴァン (Langevin) の常磁性理論88
3.2.3	実験と常磁性理論との比較91
	参考文献9 4

4. 熱・統計力学

4.1	計算機シミュレーション - 分子動力学法95
4.2	アルゴンクラスターの融解と 凝固 . . .98
4.2.1	固体状態での振舞100
4.2.2	液体状態での振舞101
4.2.3	固液共存状態での振舞 . 102
4.3	相転移のクラスターサイズ 依存性 . .104
4.4	クラスターの融点・凝固点 . 107
4.5	光解離による比熱測定 - ナトリウムクラスターイオン . 109

4.5.1	融点・潜熱・エントロピー のサイズ依存性114
4.5.2	幾何構造・電子構造の サイズ依存性116
4.5.3	融点のサイズ依存性の解釈118
4.6	温度によるクラスターの構造変 化の観察 - 金クラスター . .121
4.6.1	液体殻模型125
4.6.2	構造転移のメカニズム .126
	参考文献 .128

5. ダイナミクスー振動運動と衝突反応 -

5.1	弾性球の振動129
5.2	球形クラスターの全体振動 .132
5.3	非球形クラスターの全体振動 135

5.4	クラスターの全体振動の 実験的観測138
5.4.1	実験室系と重心系 . . .139
5.4.2	衝突のニュートン力学 .140

xi	目次
5.4.3	アルゴンクラスターの 振動励起142
5.4.4	エネルギー損失スペクトル 145
5.4.5	サイズ依存性 .148
5.4.6	弾性球モデルとの比較 . 149
5.5	アルゴンクラスターイオンAr + n とアルゴン原子との衝突 . 151
5.5.1	アルゴンクラスターイオン Ar+nの安定構造 . 151
5.5.2	蒸発反応と取り込み反応 155
5.5.3	反応生成物のサイズ分布 156

5.5.4	クラスターの励起エネル ギー . . .158
5.5.5	反応断面積160
5.5.6	イオン-分子反応のニュー トン力学163
5.5.7	Ar + 1 3とArとの衝突過程165
5.6	金属クラスターと原子との衝突166
5.6.1	Na+9とNaとの衝突 167
5.6.2	Na+9とHeとの衝突 172
5.7	クラスターの固体表面との衝突 174
	参考文献180

クラスターの応用

6. エネルギー分野へ広がる応用

6.1	メタンハイドレート182	6.2.1	重水素クラスターを用いる 核融合193
6.1.1	籠状構造189	6.2.2	核融合効率をさらに高める ために . . .195
6.1.2	メタンを閉じ込める機能を 持つ籠状構造191		参考文献1 9 9
6.2	クラスターの核融合反応 . .192		

7. 触媒分野へ広がる応用

7.1	鉄クラスターと水素との反応200	7.3.1	カーボンナノチューブ生成 の実験的観測206
7.2	鉄クラスターイオンと炭化水素 との反応203	7.3.2	カーボンナノチューブ生成 の計算機シミュレシ ョン .207
7.3	金属クラスターを触媒とした カーボンナノチューブ生成 . . .205	7.4	担持された金クラスターの反応 . . .214

7.4.1 サイズ依存性 . . . 214

7.4.2 担体による反応性変化 . . . 217

7.4.3 担体と金クラスターとの
接合状態 218

7.5 金クラスターの精密大量合成

. . . 218

7.6 窒化アルミニウムクラスター
による水素吸蔵 221

参考文献 . . . 224

8. 電子工学分野へ広がる応用

8.1 有機金属クラスター 225

8.1.1 サンドイッチ型クラスター
の磁性 227

8.1.2 自己組織化単分子膜による
クラスターの固体表面

付着 231

8.2 金属クラスターの固体表面付着
によるデバイス作製 . . . 234

参考文献 237

さらに深く学びたい読者のために 238

■ 謝辞 239

■ 著者紹介 244