

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	アルカリ金属原子スピクラスタの生成に関する研究
Title(English)	Generation of alkali-metal atomic spin cluster
著者(和文)	リウカン
Author(English)	Xuan Liu
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第9316号, 授与年月日:2013年9月25日, 学位の種別:課程博士, 審査員:伊藤 治彦,宗片 比呂夫,梶川 浩太郎,渡辺 正裕,菅原 聡
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第9316号, Conferred date:2013/9/25, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	論文要旨
Type(English)	Summary

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻：物理電子システム創造 専攻	申請学位 (専攻分野)：博士 (工学)
Department of	Academic Degree Requested Doctor of
学籍番号：	指導教員 (主)：伊藤 治彦
Student ID Number	Academic Advisor(main)
学生氏名：Liu Xuan	指導教員 (副)：
Student's Name	Academic Advisor(sub)

要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

本論文は「アルカリ金属原子スピクラスタの生成に関する研究」と題し、全 6 章で構成している。

第 1 章「序論」では、少数個のアルカリ金属原子で構成されるサブナノメートルオーダーのクラスターがスピン状態に強く依存する性質を持っており、これまでに実験および理論の両面から様々な研究がなされてきた。しかし、最も安定な最低スピン状態における研究に比べ、不安定な最高スピン状態に関する研究が不十分である。後者はパウリの排他原理に反する強磁性結合において成り立っており、そのメカニズムと特性を明らかにするとともに、スピクラスタ形成実験に必要なスピン偏極冷却原子を生成することが本研究の目的である。

第 2 章「ハイブリッド汎関数法」では、本研究の基礎となる密度汎関数法および基底関数系について説明し、スピクラスタの構造解析や結合エネルギーの評価に用いるハートリー・フォック法と組み合わせたハイブリッド汎関数法を取り上げた。ハートリー・フォック法で記述される交換エネルギーと密度汎関数法で記述される相関エネルギーにより、アルカリ金属原子クラスタの結合エネルギーや結合長を高い精度で数値評価することが可能になった。

第 3 章「形状と結合エネルギー」では、Li、Na、K、Rb、Cs の 5 種類のアルカリ金属原子それぞれについて 2 量体から 8 量体までのすべてのスピン状態における安定構造を調べ、スピン密度の空間分布および結合エネルギーを算出した。クラスタサイズの増加に伴い、平面構造から立体構造に転移すること、また結合エネルギーが増加することを明らかにした。一方、実験値との比較により、標準とされる B3LYP ハイブリッド汎関数法は最高スピン状態の解析には不適切であることが分かった。

第 4 章「B3P86 法を用いた最高スピン状態の解析」では、分子軌道計算で使用頻度の高い 11 種類の汎関数と 5 種類の基底関数系を組み合わせた 55 種類の計算法を用い、最高スピン状態における Rb と Cs の 2 量体ないし 3 量体の結合エネルギーと結合長を求め、それぞれの計算値を実験値と比較することによって、B3P86/LanL2DZ が最高スピン状態の解析に適切であることが分かった。また、B3P86/LanL2DZ を用い、最高スピン状態における Rb および Cs の 2 量体から 14 量体までの安定構造と結合エネルギーを評価し、どのサイズにおいてもクラスタ形成が可能であることが分かった。次に、Li、Na、K、Rb、Cs の 2 量体から 10 量体までの結合エネルギーを交換エネルギーおよび相関エネルギーと比較することにより、最高スピン状態におけるクラスタの強磁性結合が交換エネルギーに深く依存していることが分かった。さらに、Li の 4 量体を例にとり、最高スピン状態では価電子の sp 軌道混成が強く起こることにより、分子軌道の重なりが増加して交換エネルギーが低下し、その結果、結合エネルギーが増加すると分かった。

第 5 章「実証実験に向けて」では、ギブス自由エネルギーを評価し、最低スピン状態では偶数個の原子からなるクラスタが現れ、最高スピン状態では奇数個の原子からなるクラスタが現れることが分かった。そして、原子数を 10^7 個から 10^{14} 個まで変化した時に基板温度が 0 K から 300 K までの範囲で生成可能なクラスタの種類と個数を算出した。次に、磁気光学トラップを用いて生成した平均温度 100 μ K の 10^9 個の冷却 Rb 原子を光ポンピング法によってスピン偏極すると、ゼーマン副準位間で σ 偏光照射により orientation が、 π 偏光照射により alignment の形成に成功した。前者は最高スピン状態のクラスタ形成に、後者は最低スピン状態のクラスタ形成に利用できる。さらに、ラマン分光法および赤外分光法のスペクトル解析によって、クラスタ形状およびスピン状態の同定が可能である。

第 6 章「結論と今後の展望」では、本研究で得られた成果とスピクラスタの超高密度記録媒体への応用可能性について説明した。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 2 部提出してください。

Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 2 copies of 800 Words (English).

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻 : Department of	物理電子システム創造 専攻	申請学位 (専攻分野) : Academic Degree Requested	博士 (工学)
学籍番号 : Student ID Number		指導教員 (主) : Academic Advisor(main)	伊藤 治彦
学生氏名 : Student's Name	Liu Xuan	指導教員 (副) : Academic Advisor(sub)	

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

In this study, we calculate the different geometric isomers of spin clusters composed of a small number of alkali-metal atoms using B3LYP density-functional method. The electron density distribution of clusters changes according to the value of total spin. Steric structures as well as planar structures arise when the number of atoms increases. The lowest spin state is the most stable and Li_n , Na_n , K_n , Rb_n and Cs_n with $n=2-8$ can be formed in higher spin states. In the highest spin state, the preparation of clusters depends on the kind and the number of constituent atoms. The interaction energy between alkali-metal atoms and rare-gas atoms is smaller than the binding energy of spin clusters. Consequently, it is possible to self-organize the alkali-metal-atom clusters on a non-wetting substrate coated with rare-gas atoms.

Then, we demonstrate that alkali-metal atomic clusters from Li_n to Cs_n ($n=2-10$) in the highest spin state can make ferromagnetic bonds with no-pair spin parallel electrons due to the spin exchange interaction. The structure of these clusters is optimized with B3P86 hybrid functional for the highest spin state as well as with B3LYP hybrid functional for the lowest spin state. A dramatic change from plane to solid occurs in the highest spin state when the number of constituent atoms is four. The binding, exchange, and correlation energies are evaluated for both the highest and lowest spin states. Next, we explore the dependence of the exchange and correlation energies on the binding energy and find that the highest spin clusters are most stable when the exchange energy is minimum. To see why the ferromagnetic bond among spin-aligned identical atoms arises against Pauli exclusion principle, we estimate the AO-hybridization in molecular orbitals. The s - p hybridization leads to generation of the highest spin clusters.

備考 : 論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 2 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 2 copies of 800 Words (English).