

## 二国間交流事業 共同研究報告書

平成23年4月4日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

共同研究代表者所属・部局 京都大学・福井謙一記念研究センター

職・氏名 リサーチリーダー・諸熊奎治  
(もろくまけいじ)

1. 事業名 相手国（ロシア）との共同研究 振興会対応機関（RFBR）
2. 研究課題名 ナノ量子クラスターの構造、性質、生成機構に関する量子化学・分子動力学的研究
3. 全採用期間  
平成21年4月1日～平成23年3月31日（2年0ヶ月）
4. 研究経費総額
  - (1) 本事業により交付された研究経費総額 5,000 千円  
初年度経費 2,500 千円、 2年度経費 2,500 千円、 3年度経費 0 千円
  - (2) 本事業経費以外の国内における研究経費総額 0 千円

## 5. 研究組織

### (1) 日本側参加者

氏名 <small>(ふりがな)</small>	所属・職名	研究協力テーマ
<small>(ステファン イレ)</small> <b>Stephan Irle</b> <small>(アリスター ペイジ)</small> <b>Alister Page</b> <small>(ケイアールエスチャンドラクマ)</small> <b>K R S Chandrakumar</b> <small>(マシュー アディコット)</small> <b>Matthew Addicoat</b>	名古屋大学・特任准教授  京都大学・研究員 ) 京都大学・研究員  名古屋大学・研究員	(全員同じ) ナノ量子クラスターの構造、性質、生成機構に関する量子化学・分子動力学的研究

### (2) 相手国側研究代表者

所属・職名・氏名 ロシア科学アカデミーL.V.キレンスキー物理学研究所・副所長

・ **Sergey G. Ovchinnikov**

### (3) 相手国参加者 (代表者の氏名の前に○印を付すこと)

氏名	所属・職名 (国名)	研究協力テーマ
○Pavel Avramov Alexander Kuzubov Alexander S. Fedorov Felix Tomilin Pavel Sorokin	(全員同じ) L.V. Kirensky Institute of Physics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences (SB RAS)・Researcher (Russia)	(全員同じ) Quantum-chemical and Molecular-dynamics Study of Structure, Properties and Formation Mechanisms of Nanoscale Quantum Clusters

6. 研究実績概要（研究の目的・内容・成果等の概要を簡潔に記載してください。）

本研究の目的は、異なる性質を持ついくつかの部分構造から構成される複雑なナノ構造の原子および電子状態を理論計算によって明らかにすることである。

実施計画に基づき、次の共同研究を実行した。

1. ゴールドバーグ型シリコンナノドットとその Er 内蔵錯体の電子状態の解明を日露共同でおこない、論文を発表した (J. Phys. Chem. C 113, 15964–15968 (2009)).
2. キラルな複雑な構造をしたシリコンナノワイヤーの電子状態の解明を日露共同でおこない、論文を発表した (J. Phys. Chem. C, 114, 16692-14696 (2010)).
3. DFTB 法の計算に必要な Fe-Si および Al-Si 相互作用のパラメタを日本側が決定した。
4.  $Al_m$  ならびに  $Fe_m$  ( $m=3-100$ ) クラスターの原子構造および電子状態を DFT および DFTB 法を用いて日露両方で計算した。
5. Al/Si<111>および Fe/Si<111> ナノスケール量子ドットの原子構造および電子状態の計算を日露両方で行った。
6. 新しいシリコンナノワイヤーの分子設計を日露両方で行った。

日本側のロシア訪問に関しては、代表者諸熊奎治および Stephan Irle ならびに Alister Page の 3 人が平成 21 年 9 月初旬にクラスノヤルスクの L.V.キレンスキー物理学研究所を訪問し、ロシア側共同研究者とワークショップを開催した他、共同研究の打ち合わせを行い、また研究所並びにクラスノヤルスク国立大学にて 4 つのセミナーをおこなった。ロシア訪問に引き続き、共同研究の成果の発表のため、諸熊奎治はスロバキア国ブラチスラバで開催のチェコ・スロバキア・日本理論化学シンポジウムに出席し発表をおこなった、また K R S Chandrakumar を平成 22 年 2 月米国フロリダ州 St. Simons Island における第 50 回 Sanibel Symposium に派遣しポスター発表を行わせた。平成 22 年 6 月には Stephan Irle および K R S Chandrakumar を、また平成 23 年 3 月には Stephan Irle および Matthew Addicoat をクラスノヤルスクの L.V.キレンスキー物理学研究所に派遣し、ロシア側共同研究者とワークショップを開催した他、共同研究の打ち合わせを行った。又共同研究の成果発表のため、Alister page を平成 22 年 7 月 11th International Conference on the Science and Application of Nanotube, Montreal, Canada に派遣し発表を行わせた。

ロシア側の日本訪問は、先方の予算の都合上平成 21 年度は 1 名に限られたが、L.V.キレンスキー物理学研究所 Pavel Avramov が京都大学福井謙一記念研究センターに 35 日間滞在し、セミナーをした他、数回にわたるワークショップや討論を行った。平成 22 年度には 11 月に L.V.キレンスキー物理学研究所から Pavel Avamov, Alexander Kuzubov, Alexander S. Fedorov, Felix Tomilin の 4 名が来日し、京都大学福井センターにおいて、セミナーおよびワークショップと行ったほか、筑波の産業総合研究所を訪問した。また、平成 23 年 3 月には Pavel Avramov が京都大学福井センターを訪問し、討論を行った。