

球磁石原子の化学

2013SE043 星崎 将人

指導教員：杉浦洋

同一半径の金属球を均一に磁化した球磁石を原子とみなし、それらを複数くっつけたものを分子とみなす。原子は1種類なので、分子は構成する原子の配置と極性で決まる。分子は原子間の反発・吸引力による相互ポテンシャルエネルギー (MPE, Mutual Potential Energy) を持つ。MPE は構成原子の配置と極性の関数である。分子は MPE の極小点にあるとき安定である。すなわち、極小点から少し配置と極性をずらすと、元の配置と極性にもどろうとする。本論文では、分子の安定条件について研究する。

正多面体 (プラトンの立体) の頂点に原子を配置した分子は安定か? アルキメデスの立体の頂点に原子を配置した分子は安定か? 最密充填した原子は安定か? 極性をそろえて直線に並べた分子は安定だと思われる。その他に安定な無限構造は存在するか? など、様々な疑問がある。これらについて、研究を進める。

1 原子と分子

この論文では、中心 \mathbf{x} 半径 a の球磁石を原子とする。原子は、中心 \mathbf{x} にあるモーメント \mathbf{p} の双極子と等価である。この様な原子を $\alpha = (\mathbf{p}, \mathbf{x}, a)$ と書く。空間に複数の原子が存在する世界 (系) を考える。原子同士は空間的に重ならないものとする。原子の半径 a と磁価 $\|\mathbf{p}\|$ は原子の個性として時間変化しないものとする。一つの原子はモーメントの方向 $\mathbf{p}/\|\mathbf{p}\|$ と位置 \mathbf{x} が自由に変化し得る。

2つの原子 $\alpha = \alpha(\mathbf{p}, \mathbf{x}, a)$ と $\beta = \alpha(\mathbf{q}, \mathbf{y}, a)$ が存在するとき、原子同士は重ならないので $\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| \geq 2a$ である。また、系 $S = \{\alpha, \beta\}$ の MPE は

$$U(\{\alpha, \beta\}) = \frac{\mathbf{p}^T \mathbf{q}}{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^3} - 3 \frac{\mathbf{p}^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \mathbf{q}^T (\mathbf{y} - \mathbf{x})}{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^5} \quad (1-1)$$

である。

n 個の原子 $\alpha_i = \alpha(\mathbf{p}_i, \mathbf{x}_i, a)$ ($1 \leq i \leq n$) からなる系 $S = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$ においては、原子同士が重ならないので

$$\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\| \geq 2a \quad (1 \leq i < j \leq n) \quad (1-2)$$

を満たす。また、それぞれの原子の磁価を p とすると、モーメントは

$$\|\mathbf{p}_i\| = p \quad (1 \leq i \leq n) \quad (1-3)$$

を満たす。そして、系 S の MPE は

$$U(S) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} U(\{\alpha_i, \alpha_j\}) \quad (1-4)$$

である。

n 個の原子からなる系 S の MPE: $U(S)$ が制約条件 (1-2), (1-3) の下で極小であるとき、その S を n 原子分子、あるいは分子という。

この研究の目的は、分子の性質を明らかにし、分子を作ることである。

2 分子の性質

2.1 原子団が作る磁場

原子 $\alpha = \alpha(\mathbf{p}, \mathbf{x}, a)$ の $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$ に作る磁場は、

$$F(\alpha, \mathbf{y}) = \frac{3q(\mathbf{y} - \mathbf{x})^T \mathbf{p}}{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^5} (\mathbf{y} - \mathbf{x}) - \frac{q}{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^3} \mathbf{p}$$

である。これは α が \mathbf{y} の位置にある磁価 1 の単極子に及ぼす力である。原子団 $A = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$ が点 \mathbf{y} に作る磁場は

$$F(A, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n F(\alpha_i, \mathbf{y})$$

である。

2.2 分子を構成する原子のモーメント

分子を構成する一つの原子 $\alpha_k = \alpha(\mathbf{p}_k, \mathbf{x}_k, a_k)$ のモーメント \mathbf{p}_k について、次の定理が成り立つ。

[定理] 分子 S から原子 α_k を除いた系を $S_k = S \setminus \{\alpha_k\}$ とする。そのとき、 $U(S)$ は \mathbf{p}_k と $F(S_k, \mathbf{x}_k)^T$ の向きが同じとき、最小値をとる。

3 分子の構成

3.1 分子の構成手順

n 個の原子からなる分子をどのように構成するかを解説する。

1. 想定する位置 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ に原子を配置する。
2. その原子配置における最小ポテンシャルの磁気モーメント $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n$ を決定する。
3. その状態で原子に働く力が分子を破壊しないかどうかどうか検討する。

2番について詳しく説明する。定理によって1個のモーメント \mathbf{p}_k は最適化できる。このことによりポテンシャルは小さくなる。同じ動作を \mathbf{p}_2 から \mathbf{p}_n まで行くとポテンシャルは徐々に小さくなる。その後 \mathbf{p}_1 を見ると、他の原子のモーメントが変わったために、 \mathbf{p}_1 の最適なモーメントがずれている。これを修正するために、先ほどの操作をもう一度繰り返す。この操作でポテンシャルは単調に下がり続けるので、いつか極小値に収束する。これを無限回繰り返すと極小値である。実際には1000回でポテンシャルが変化しなくなるので操作を打ち切った。

3.2 分子構成例

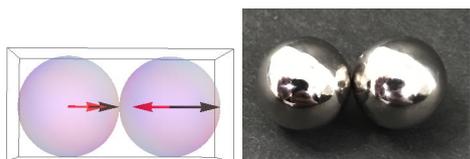


図 1 2原子分子

図 1 は 2 つの原子が接している配置で MPE を極小化した状態である。図の黒い矢印は原子の磁気モーメント、赤い矢印はその原子が他の原子から受ける力の合力を表す。2 つの原子はお互いに引き合っており安定し、分子を構成している。MPE は -0.25 である。

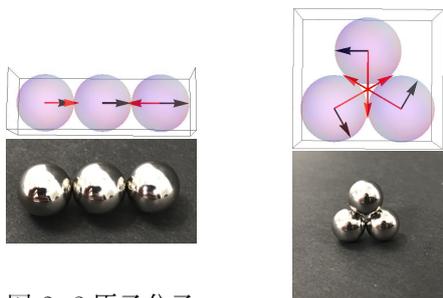


図 2 3原子分子

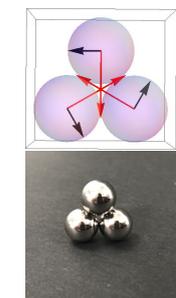


図 3 3原子分子

2 種類の 3 原子分子が見つかった。1 つは図 2 の直列型で、1 つは図 3 の正三角形型である。直列型の MPE は、 -0.53 、正三角形型は -0.48 である。直列型の方がより安定である。

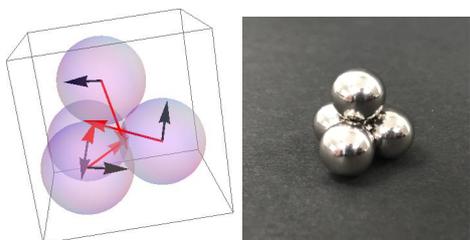


図 4 4原子分子

4 原子分子で四面体が構成できた。図 4 より 4 つの原子はお互いに引き合っている。MPE は -0.625 であり、安定している。

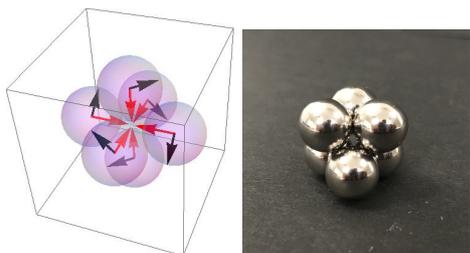


図 5 6原子分子

6 原子分子で 8 面体分子が構成できた。図 5 より 6 つの原子はお互いに引き合っている。MPE は -1.25 であり、安定している。

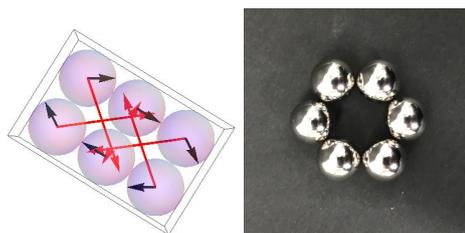


図 6 6原子分子

6 原子分子の候補として、図 6 のように平面状に 2×3 の長形状に並べると、真ん中の 2 つの原子が他の原子から外側に反発した力を受けるので、安定しない。よってこの形状は分子と呼べない。

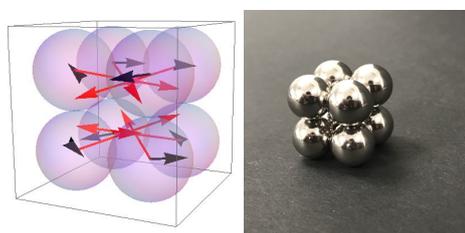


図 7 8原子分子

8 原子分子で立方体が構成できた。図 8 より 8 つの原子はお互いに引き合っている。MPE は -1.81 であり、安定している。

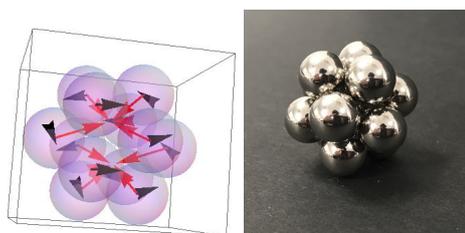


図 8 12原子分子

12 原子分子で正二十面体分子が構成できた。図 9 より 12 つの原子はお互いに引き合っている。MPE は -3.16 であり、安定している。

4 終わりに

MPE の最小化と安定性の検討により、いくつかの単純な分子を特定した。複雑な分子の構成と解析はこれからの課題である。

5 参考文献

[1] 深谷賢治:電磁場とベクトル解析, 岩波書店 (2004).