

1P14

## イオン結晶中での $\text{BH}_4^-$ イオンの 回転トンネル運動

○尾崎芳昭（名工大）

[序] Hartman ら<sup>1)</sup>によって、 $\text{LiBH}_4$ での結晶構造が中性子回折により調べられている。ここでは、アニオンの配向無秩序性が指摘されている。どのような運動状態にあるかを知るために、まわりからの相互作用により、イオンがどのような束縛を受けているかを計算した。さらに、強い束縛での回転状態への移行を明らかにした。

[計算法] 配向ポテンシャルは、イオン自身の1体で決まる部分を次のような展開2項で記述することにする。立方対称中にある正四面体を表現する関数  $V_4(\omega)$ ,  $V_6(\omega)$  を使って示す。

$$V(\omega) = \beta_4 V_4(\omega) + \beta_6 V_6(\omega) \quad (1)$$

( $\omega$ : イオンの配向を示すオイラー角)。係数  $\beta_4$ ,  $\beta_6$  の組合せにより、配向状態は  $T_d$ ,  $D_{2d}$ ,  $C_{3v}$  の配向のいずれかが安定となる領域にはいる。それぞれ、2, 6, 8 個の等価な配向をとりうる。イオン自身より高い対称性をもつポテンシャル中にあり、強い束縛の下で回転トンネル運動へ次第に移ることが考えられる。このシステムでは  $T_d$  のタイプが実現される可能性が高く、エネルギー準位の構造との関連を調べた。

1) M.R. Hartman, J.J. Rush, T.J. Udovic, R.V. Bowman Jr., and S.-J. Hwang, J. Solid State Chem. **180**, 1298 (2007).