

102番元素ノーベリウムの水和構造と電子状態

○平田勝¹、田中久美子¹、永目諭一郎¹Josef Anton², Burkhard Fricke²¹日本原子力研究開発機構、²Kassel University

緒言

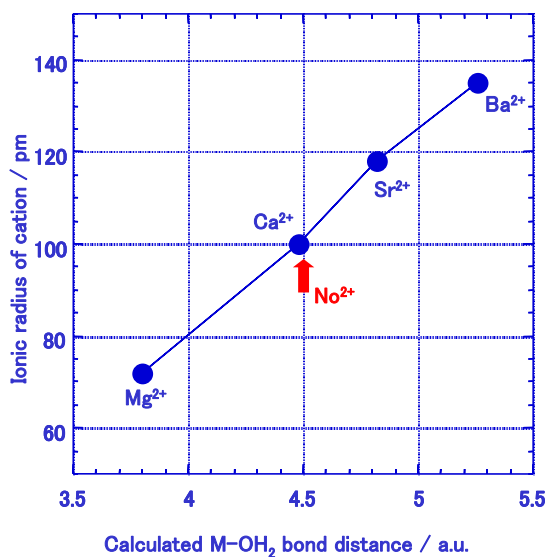
アメリシウム (Am) 以降の重アクチノイド元素は水溶液中で3価状態が安定である。しかしながら、102番目の元素であるノーベリウム (No) は水溶液中で2価状態が最安定であることが知られており、重アクチノイド元素の中では特異な存在である。No原子の基底状態における電子配置は[Rn] 5f¹⁴7s²であり、2価イオンでは[Rn] 5f¹⁴の閉殻構造となるために極めて安定な状態をとることになる。日本原子力研究開発機構では、タンデム加速器を用いたNo合成とオンライン分離装置によってNoイオンの化学的性質を明らかにする研究を進めている。本報告では、これらの実験データを解釈する際に不可欠であるNoイオンのイオン半径予測に関する研究を発表する。

計算方法

計算方法として、SCM社の開発したADFプログラムを用いた。相対論計算にはZORAハミルトニアンを、基底関数としてQZ4Pを用いた。また、厳密な4成分相対論電子状態計算には、カッセル大学のフリッケ教授のグループで開発されたプログラムを用いた。

結果

一例として4成分相対論電子状態計算の結果として得られた真空中での金属イオンと水分子間の原子間距離とイオン半径との相関関係を示す。計算結果として得られた最安定原子間距離と2



価イオンのイオン半径とは良好な相関関係がある。No²⁺イオンと水分子酸素間の原子間距離はCa²⁺イオンのそれと類似しており、イオン半径はCa²⁺と同程度のおよそ100pmであることが分かった。これまでのイオン交換法による実験の結果からCa²⁺とSr²⁺の中間程度のイオン半径であると推定されていたが、今回の解析結果からよりCa²⁺イオンに近い挙動をとることが推察できた。