

マイクロクラスターの構造における マッカイ多面体の静的性質

上西 恵*, 鈴木 昭弘

信州大学繊維学部精密素材工学科

§1 はじめに

数個から高々数百個の原子が集まってできた集合体をマイクロクラスターという。 A_r などから希ガスクラスターから、 A_n など金属クラスターまで生成されるようになり、その単体の性質と大きく異なる点が注目されている。二、三、四個とクラスターが大きくなるにつれ、エネルギー的に最も安定な原子配位を取りながら、その形が変化していく。もちろん、無限に大きくなれば結晶構造となるわけであるが、小さな系では、結晶の単位胞とは異なる安定な幾何学的配位が存在している。その代表的な例が、プラトン多面体の一つである、正十二面体、正二十面体をあげることができる。どちらも五回対称軸を有するので結晶の単位胞とはなり得ない。正二十面体は中心から見て、隣接の原子は12個であり、最密立方、最密六方晶の隣接原子の数と一致する。しかも、13個の原子からなる系は、正二十面体構造がエネルギー的には最も安定となる。原子の数が高々、数百個のマイクロクラスターでは、最密立方、最密六方構造より、正二十面体を基礎とした構造が基本となると思われる。

正二十面体の中心を頂点として各面をピラミッド状に延ばして、殻状に正二十面体を作る構造をマッカイ多面体という¹⁾。各面は平面最密構造をとるが、立体として見る場合、5回対称軸が六本存在するため、大きくなるにつれ不安定性が増し、最密構造がよりエネルギー的に安定になると思われる。しかし、1984年、D. Shechtman の報告は、5回対称軸を示す物質の存在を示唆している²⁾。この物質は A_i と M_n の合金を液体状態から急冷して得られる固体粒子でありシェヒトマナイトと名づけられた。その後、数多くの5回対称軸の存在を示す物質が発見されており、準結晶として知られるようになった。準結晶は三次元空間のペンローズスタイルの立場から、解析が行われている³⁾。その幾何学的構造の興味から、準結晶の発見の前から、予測的に研究が進められていたものである。ペンローズスタイルは完全な周期性を示さないが、長い範囲の周期性を近似的に持っている。そのため電子線解析では美しい5回対称軸を示すものと考えられる。

ペンローズスタイルのように準周期性を持つ五回対称性の性質を見る前に、周期性を持たないが、五回対称性を示すマッカイ多面体の性質を静的側面から検討を加えることは意味のあることと思われる。何故なら、ペンローズスタイルのエネルギー的に安定を示す配位は、非常に密度は薄く、マッカイ多面体のように充分安定となるとは思えないから

* 現在の所属はクラボウ株式会社。

である。本論文ではマッカイ多面体と、最密六方構造をエネルギー的側面からその安定性の様子を探ることを目的としている。まず次の節では、マッカイ多面体の幾何学的側面と、エネルギー計算の処方について簡単に述べる。第3節では計算結果と議論を載せる。最後の節で簡単なまとめについて述べる。

§2 マッカイ多面体の構造と計算の処方

§2-1 マッカイ多面体の幾何学的構造

最密立方構造の単位胞を考えれば、中心の原子の周りの12個の隣接原子同士が互いに隣りあっている個数は、原子ごとに四つである。一方正二十面体の場合、中心と十二個の頂点に原子を置いて作った、十三原子のクラスターの場合隣接原子同士が隣りあっている数は原子ごとに五つである。ただ、正二十面体の中心から各頂点への長さを1とすると、その稜の長さは1.051となり、最密立方構造と異なる。

正二十面体構造をその外側に原子を逆ピラミッド状に追加して太らせていくと、順に殻構造を取りながら正二十面体が大きくなる。(図1参照)これは *A. L. Mackay* によって提案されたもので、マッカイ多面体と呼ばれている²⁾。このマッカイ多面体を構成する原子の数を表1に示す。ここで n は殻の数を示し、全ての原子の数は

$$N(n) = \frac{1}{3}(10n^3 + 15n^2 + 11n + 3) \quad (1)$$

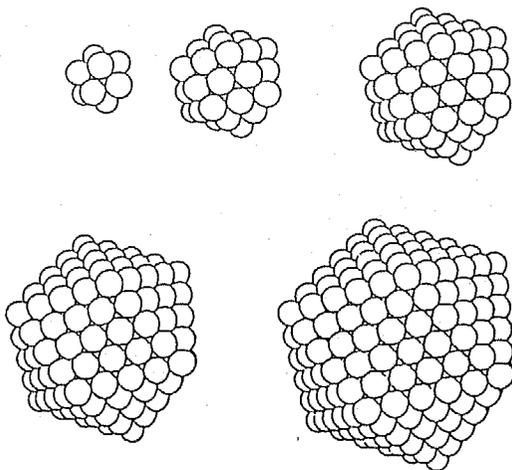


図1 マッカイ多面体の幾何学的構造

表1 マッカイ多面体の原子の数

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$N(n)$	1	13	55	147	309	561	923	1415	2057	2869
$Ns(n)$	1	12	42	92	162	252	362	492	642	812

また、最外殻の原子の数、つまり表面の原子の数は

$$N_s(n) = 10n^2 + 2 \quad (2)$$

によって与えられる。 $n \rightarrow \infty$ で表面の原子の数は $3/n$ の割合で減少する。

§2-2 エネルギー計算の処方

二原子間力として、現象論的ポテンシャル、レナード-ジョーンズ型（以下LJ型と記す）

$$V(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6} \quad (3)$$

及び、モース型

$$V(r) = [1 - \exp\{\alpha(1-r)\}]^2 - 1 \quad (4)$$

を仮定する。二つのポテンシャルとも二原子間の距離 r とすれば $r=1$ で $V(1) = -1$, $V'(1) = 0$ に規格化されている。またモース型に含まれているパラメータ α は、ポテンシャルの極値附近の堅さを表すもので原子間振動数から求められるが、LJ型に対応するには $\alpha=6$ が採用され、また通常の二原子分子問題では $\alpha=3$ が仮定される。これらのモース型ポテンシャルを以後、M6, M3と略記する。

これらの現象論的二原子間力が導入されれば三原子間力など非中心力が無視できるくらい小さいと仮定し、 N 原子からなる系の静的エネルギーを求めることができる。すなわち

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(|r_i - r_j|), \quad (5)$$

また一原子あたりのエネルギー、これは結合エネルギーに相当するものであるが

$$BE = E/N(n) \quad (6)$$

である。

結晶構造において、原子間にクーロン力から生ずる引力が働き、結晶を収縮させようとする。しかし、原子間隔が小さくなるとパウリ原理による斥力が働く。格子間隔は、これらの効果の釣り合いによって決まる。しかし、マッカイ多面体の場合は、殻間距離が等しくなる必然性はない。中心から第一殻の頂点までの距離を d_1 , 第二殻の頂点までの距離を d_2 などとすればエネルギー E (または BE) は距離パラメータ $d_1, d_2, d_3, \dots, d_n$ の関数となる。パラメータ d_1, d_2, d_3, \dots は全系のエネルギー E が最低となるように決定されねばならない。すなわち

$$dE = \frac{\partial E}{\partial d_1} dd_1 + \frac{\partial E}{\partial d_2} dd_2 + \dots + \frac{\partial E}{\partial d_n} dd_n = 0 \quad (7)$$

を満足するよう d_1, d_2, \dots, d_n を求める：必要十分要件は

$$\frac{\partial E}{\partial d_k} = 0 \quad (k=1, 2, \dots, n) \quad (8)$$

である。もちろん d_1, d_2, \dots, d_n のセットは採用される原子間力に依存するが、定性的には、殻の数が大きくなるにつれ、内部の殻が圧縮され距離が小さくなり、一定値に近づく。また内殻部分と外殻部分を分ければ外殻ほど次の殻との距離が大きくなると思わ

れる。何故なら正二十面体構造は中心からの距離より、稜の長さが5%程度大きく、原子密度の高まりとともに斥力が働くからである。この性質は、最密立方構造の単位胞を基礎に、原子の数を増やした時には、現われない。

また、各殻ごとのエネルギーの特徴を探るため、次の量

$$E_s(k) = \frac{1}{2} \sum_{i \in k} \sum_{j \neq i} V(|r_i - r_j|) \quad (9)$$

を求める。ここで k 番目の殻を示す。この式は k 番目に存在するすべての原子に対する、エネルギーを与える。定義から明らかのように、

$$E = \sum_{k=0}^N E_k \quad (10)$$

を満足する。式(9)で求めたエネルギーを各殻に含まれる原子の数で割った量、

$$E_k = E_s(k) / N_s(k) \quad (11)$$

が、各殻の原子の平均結合エネルギーとなる。この値の振舞を、最密立方構造に対しても同じ量を求め、互いに比較することにより調べれば、マックイ多面体の性質が浮かび上がってくるものと思われる。

次に、各殻の振動安定性を見るために、系のエネルギーが最低となる d_1, d_2, \dots, d_n で、エネルギー E に関する二階微分を見ればよい。 E は、多変数関数なので

$$\begin{aligned} d^2 E &= \left(\frac{dd_1}{d_1}, \frac{dd_2}{d_2}, \dots, \frac{dd_n}{d_n} \right) \\ &\times \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial d_1^2} d_1^2, & \frac{\partial^2 E}{\partial d_1 \partial d_2} d_1 d_2, & \dots, & \frac{\partial^2 E}{\partial d_1 \partial d_n} d_1 d_n \\ \frac{\partial^2 E}{\partial d_2 \partial d_1} d_2 d_1, & \frac{\partial^2 E}{\partial d_2^2} d_2^2, & \dots, & \frac{\partial^2 E}{\partial d_2 \partial d_n} d_2 d_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 E}{\partial d_n \partial d_1} d_n d_1, & \frac{\partial^2 E}{\partial d_n \partial d_2} d_n d_2, & \dots, & \frac{\partial^2 E}{\partial d_n^2} d_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dd_1}{d_1} \\ \frac{dd_2}{d_2} \\ \vdots \\ \frac{dd_n}{d_n} \end{pmatrix} \\ &= d^{-1} H d \end{aligned} \quad (12)$$

を考慮すればよい。行列 H はエッシアン行列といわれ、対称行列である。行列 H が、もし対角行列であれば、その対角要素は各殻のブリージング振動特性を表す。また最外殻の振動特性はマックイ多面体の表面の性質と関係するが、一般に各殻の振動特性は強く結合していると考えられ、行列の非対角要素の大きさも調べる必要がある。本論文では、まず第一歩として各行列要素が、どのように振舞うのか、最外殻を含めて、外から三つの殻について、その特徴を見ることにしよう。

§3 結果と考察

まず、式(7), (8)を満たす、 d_1, d_2, \dots, d_n のセットを表2に示そう。長さは無次元化された量である。ここでは $n=1$ から6までのマックイ多面体について載せてある。また比較のため最密立方構造 (fcc) についても表3に載せる。特徴をまとめれば、

- (1) n を大きくするにつれ、 d_1, d_2 とも小さくなることが読みとれる。M3力が一番激

表 2-1 LJポテンシャルを用いたときの距離パラメータ d_n (マッカイ多面体)

n	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6
1	0.9638					
2	0.9360	1.916				
3	0.9228	1.881	2.867			
4	0.9141	1.862	2.829	3.817		
5	0.9076	1.848	2.807	3.778	4.768	
6	0.9024	1.837	2.790	3.753	4.728	5.719

表 2-2 M3を用いたときの距離パラメータ d_n (マッカイ多面体)

n	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6
1	0.9153					
2	0.7799	1.662				
3	0.7160	1.479	2.348			
4	0.6794	1.388	2.144	3.005		
5	0.6562	1.334	2.039	2.791	3.648	
6	0.6407	1.298	1.975	2.679	3.428	4.283

表 2-3 M6を用いたときの距離パラメータ d_n (マッカイ多面体)

n	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6
1	0.9647					
2	0.9405	1.923				
3	0.9288	1.894	2.883			
4	0.9207	1.877	2.851	3.844		
5	0.9145	1.864	2.831	3.811	4.805	
6	0.9093	1.853	2.814	3.787	4.770	5.765

表 3-1 LJポテンシャルを用いたときの距離パラメータ d_n (最密立方多面体)

n	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6
1	0.9900					
2	0.9754	1.966				
3	0.9730	1.949	2.939			
4	0.9723	1.945	2.921	3.911		
5	0.9721	1.944	2.917	3.893	4.883	
6	0.9719	1.944	2.916	3.889	4.865	5.855

表3-2 M3ポテンシャルを用いたときの距離パラメータ d_n (最密立方多面体)

n	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6
1	0.9295					
2	0.8018	1.700				
3	0.7419	1.521	2.406			
4	0.7076	1.434	2.203	3.084		
5	0.6865	1.383	2.103	2.868	3.746	
6	0.6730	1.352	2.044	2.760	3.522	4.399

表3-3 M6ポテンシャルを用いたときの距離パラメータ d_n (最密立方多面体)

n	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6
1	0.9916					
2	0.9817	1.975				
3	0.9819	1.965	2.958			
4	0.9823	1.965	2.948	3.940		
5	0.9824	1.965	2.947	3.930	4.923	
6	0.9828	1.966	2.948	3.931	4.915	5.907

表4-1 LJポテンシャルを用いたときのエネルギー (マッカイ多面体)

n	E	$E/N(n)$	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
1	-44.33	-3.410	-5.632	-3.225					
2	-279.1	-5.074	-6.376	-7.198	-4.436				
3	-875.0	-5.953	-6.108	-7.794	-7.667	-4.928			
4	-2003	-6.481	-5.652	-7.810	-8.160	-7.838	-5.182		
5	-3832	-6.830	-5.147	-7.683	-8.227	-8.279	-7.919	-5.335	
6	-6533	-7.078	-4.671	-7.516	-8.186	-8.360	-8.330	-7.966	-5.437

表4-2 M3を用いたときのエネルギー (マッカイ多面体)

n	E	$E/N(n)$	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
1	-51.74	-3.980	-5.498	-3.853					
2	-416.3	-7.570	-9.697	-10.24	-6.754				
3	-1505	-10.24	-12.55	-14.12	-13.02	-8.436			
4	-3770	-12.20	-14.36	-16.53	-16.40	-14.59	-9.427		
5	-7674	-13.68	-15.51	-18.04	-18.41	-17.65	-15.53	-10.04	
6	-13670	-14.81	-16.21	-18.97	-19.63	-19.40	-18.39	-16.13	-10.43

表4-3 M6を用いたときのエネルギー (マッカイ多面体)

n	E	$E/N(n)$	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
1	-42.44	-3.265	-5.666	-3.065					
2	-250.1	-4.548	-5.591	-6.508	-3.963				
3	-759.4	-5.166	-5.125	-6.563	-6.678	-4.294			
4	-1706	-5.521	-4.674	-6.418	-6.756	-6.721	-4.459		
5	-3226	-5.751	-4.267	-6.264	-6.699	-6.806	-6.736	-4.557	
6	-5456	-5.912	-3.888	-6.103	-6.622	-6.779	-6.823	-6.743	-4.622

表5-1 LJポテンシャルを用いたときのエネルギー (最密立方多面体)

n	E	$E/N(n)$	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
1	-40.88	-3.145	-5.977	-2.909					
2	-268.1	-4.875	-7.790	-7.205	-4.140				
3	-853.9	-5.809	-8.290	-8.157	-7.600	-4.658			
4	-1971	-6.377	-8.458	-8.420	-8.286	-7.764	-4.931		
5	-3790	-6.756	-8.528	-8.514	-8.472	-8.343	-7.850	-5.098	
6	-6486	-7.027	-8.560	-8.555	-8.539	-8.497	-8.374	-7.903	-5.210

表5-2 M3ポテンシャルを用いたときのエネルギー (最密立方多面体)

n	E	$E/N(n)$	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
1	-49.49	-3.807	-5.667	-3.652					
2	-404.5	-7.355	-10.92	-9.998	-6.515				
3	-1470	-10.00	-14.76	-14.25	-12.60	-8.209			
4	-3695	-11.96	-17.40	-17.10	-16.16	-14.11	-9.231		
5	-7537	-13.43	-19.18	-19.00	-18.44	-17.27	-15.05	-9.877	
6	-13450	-14.58	-20.38	-20.27	-19.92	-19.22	-17.96	-15.66	-10.30

表5-3 M6ポテンシャルを用いたときのエネルギー (最密立方多面体)

n	E	$E/N(n)$	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
1	-38.63	-2.972	-5.984	-2.721					
2	-239.1	-4.346	-6.819	-6.536	-3.662				
3	-739.1	-5.028	-6.887	-6.867	-6.655	-4.026			
4	-1677	-5.426	-6.892	-6.891	-6.877	-6.696	-4.212		
5	-3190	-5.686	-6.892	-6.892	-6.891	-6.880	-6.716	-4.324	
6	-4060	-5.868	-6.892	-6.892	-6.892	-6.892	-6.892	-6.729	-4.399

しく縮み、次いでL J, M6の順である。L JとM6は、力が極値を示す点での振舞は等しいが、全体としてM6の方が斥力が強いということを示している。またM3は $n=6$ としてもまだ縮みは減少の傾向にあり、 $n \rightarrow$ 大の極値が読みとれない。

(2) また各力とも $d_1 > d_2 - d_1 > d_3 - d_2 \dots$ の傾向が見える。それは各二十面体の面上で最密構造をとるよう、マッカイ多面体が作られているため、各面が縮みうる限界を持つからである。

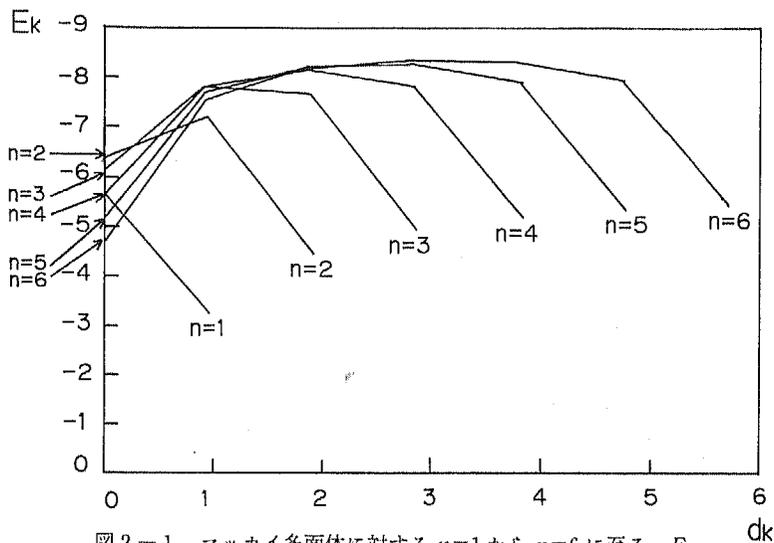


図2-1 マッカイ多面体に対する $n=1$ から $n=6$ に至る、 E_k の特徴。L J ポテンシャルに対応する。

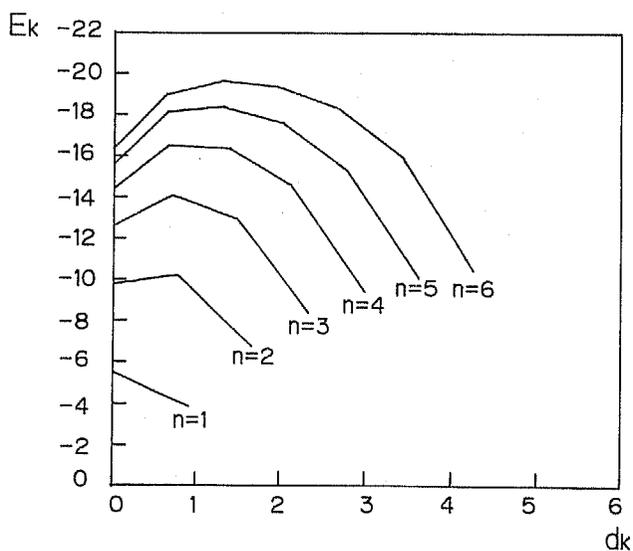


図2-2 マッカイ多面体に対する $n=1$ から $n=6$ に至る、 E_k の特徴。M3ポテンシャルに対応する。

(3) 最密立方構造は、 n が大きくなるにつれほぼ $d_1 = d_2 = d_1 = \dots$ が満たされている。
 マッカイ多面体では殻依存性が強く現われるが、最密立方構造では当然のことながら、 $n \rightarrow \infty$ で殻依存性が小さくなっていく様子が見える。

次に式(7), (8)を満たす d_1, d_2, \dots, d_n を用いて E_1, \dots, E_n 及び $E, E/N(n)$ の値を、マッカイ多面体、最密立方構造について、表4, 5及び図2, 図3に載せる。表及び図からその定性的性質をまとめれば、次のようになる。

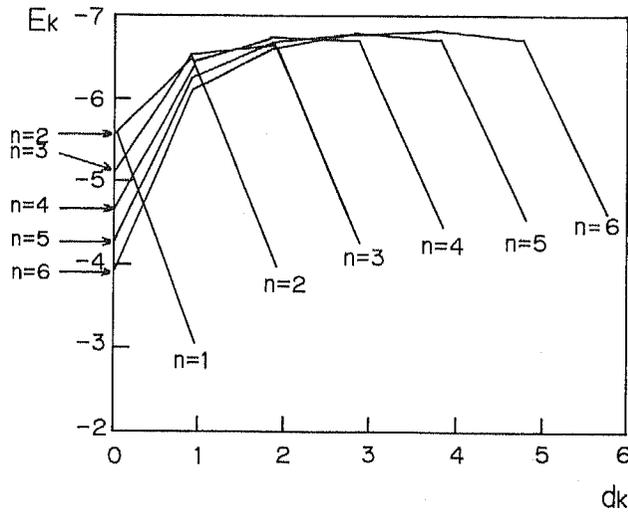


図2-3 マッカイ多面体に対する $n=1$ から $n=6$ に至る、 E_k の特徴。M6 ポテンシャルに対応する。

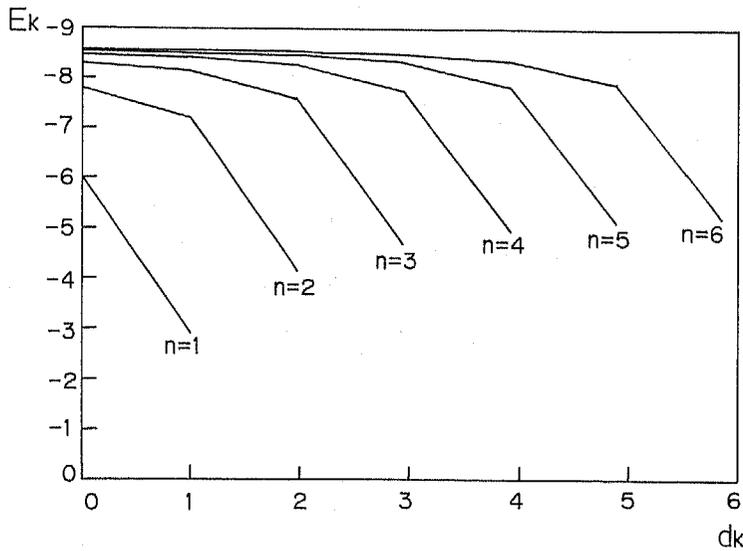


図3-1 最密立方多面体に対する $n=1$ から $n=6$ に至る、 E_k の特徴。LJ ポテンシャルに対応する。

- (1) n が増えるにつれ、マッカイ多面体の結合エネルギーは $|E_0| < |E_1| < |E_2|$ の性質を示し適当な $|E_k|$ で極大値となる。 k の値は原子間力の性質に強く依存する。柔らかい力M3は内部結合エネルギー $|E_0|$ の減少のしかたが弱いことがわかる。これは外殻から圧縮されても、斥力効果が急激には現われてこないからである。
- (2) 最密立方構造では、その安定性から常に、 $|E_0|$ が最も大きくなる。 $n=6$ での E_0 は、結晶の結合にはほぼ等しくなることがわかる。マッカイ多面体の $|E_k|$ が、最密立方構造

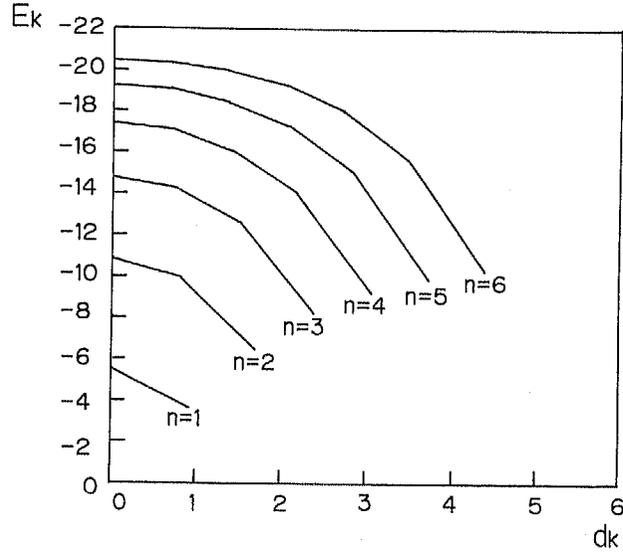


図3-2 最密立方多面体に対する $n=1$ から $n=6$ に至る、 E_k の特徴。M3ポテンシャルに対応する。

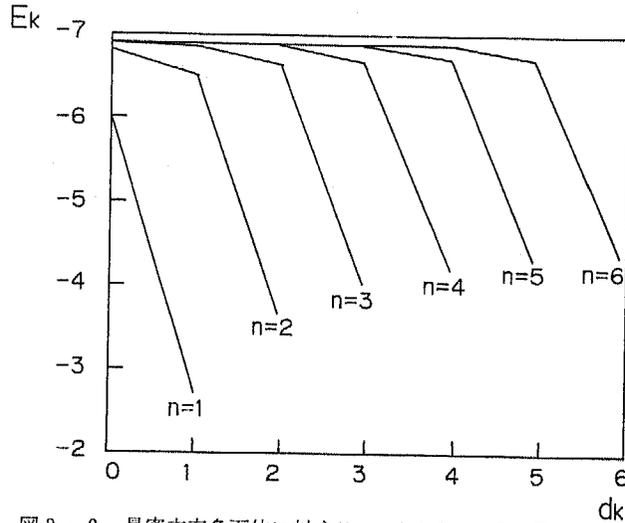


図3-3 最密立方多面体に対する $n=1$ から $n=6$ に至る、 E_k の特徴。M6ポテンシャルに対応する。

の $|E_0|$ を超えることはない。

- (3) 他方、表面と表面附近の原子の結合エネルギーは、マッカイ多面体の方が、常に最密立方構造のそれよりも常に大きい。この点が、そう大きくないマイクロクラスターでは最密構造よりも、マッカイ多面体の方が安定となる理由である。 $N(6)=923$ の原子数では、まだマッカイ多面体の方が安定である。ここでは表面原子の割合が38%程度存在し、表面効果が消えるに至っていないのである。
- (4) E_n は表面原子の結合エネルギーに関する量で $|E_n - E_{n-1}|$ の微分量が表面張力である。しかし表面効果は、マッカイ多面体では最外殻だけではなく全体としてとらえる必要がある。

表6 エンシェン行列要素

n	Hessian	matrix	elements	固有値
3	386	-278	2.79	120
	-278	530	-167	352
	2.79	-167	342	787
4	316	-244	3.31	73.7
	-244	441	-173	311
	3.31	-173	312	685
5	214	-197	3.08	51.4
	-197	403	-177	274
	3.08	-177	320	611
6	216	-194	3.18	16.2
	-194	376	-170	265
	3.18	-170	303	583

最後にエンシェン行列の行列要素を $n-2, n-1, n$ の3行3列に亘って示したのが表6である。非対角要素の強さを見るため、固有値も求めて見た。 n が大になるにつれ、対角要素は少しずつ小さくなるが、定性的には、最外殻より次の殻の振動定数が一番強いことがわかる。また最外殻の振動定数よりも、 n が大きくなるにつれ、より内側の振動定数が小さくなる。言葉を換えれば、表面附近の原子よりも、内側の原子の方が、原子配位の変化をよりたやすく行なうことを示している。表面附近の原子からの圧縮効果により、内側の原子が、正二十面体構造を保つよりも、他の最密構造に変化することが容易になることを示している。具体的には変化の様子は動的解析を必要とするが、エネルギー的側面とエンシェン行列の特徴から上記のように結論づけることができる。

また、固有値は、第二が主として表面原子の結合エネルギーに対応するものであり、第三の固有値が、表面から数えて第二番目の殻のエネルギーを主成分とした物である。内側と二番目の殻との関係を示す非対角要素の方が、表面と二番目の殻とのそれより強いことが表より読み取れる。特に $n=3$ の例は、すべての殻の様子を示しており、最内殻の振動特性が、非対角要素が大きいことにより、表面の振動特性よりも小さくなっていることが見える。この点は、対角要素の性質から結論したことをさらに補強している。

§4 まとめ

マイクロクラスターの幾何学的構造の基礎となると考えられるマッカイ多面体の、エネルギー的特徴を静的側面から検討を加えた。最密立方配位のそれと比較することにより、際だって、異なる特徴をとらえることができた。例えば、

- (1) マッカイ多面体は、表面附近の原子の結合エネルギーにより、小さい系では、最密立方構造を基本とした物に比べて安定性を増す。
- (2) しかし、表面附近の原子の結合エネルギーは、最密立方構造の内部のそれを超える

ことはない。この点は系が大きくなり、すなわち表面効果が無視できれば、その構造は、マッカイ多面体よりも、最密立方構造に移行するものと考えられる。

(3) また、その移行の容易さは、各殻の振動定数の分析からも理解できる。

正二十面体構造は、十三個の原子からなる系の中では際だつ特徴をもっている。十三個の系では、エネルギー極値は、様々な幾何学的配位を示す。しかし、その中でも正二十面体構造は特異的に安定な系となる。このような系の特徴を探ることは意義深いことといえる。これまで、その5回対称軸の存在という。通常の結晶の概念とは相入れない性質の故、深く検討されてきたとは言えない。今後の、マッカイ多面体の動的性質を見ることが必要となろう。最近、超伝導現象とともに、話題を集めている準結晶も、その5回対称軸の存在が、その興味を中心である。幾何学的構造の興味とともに、そのエネルギー的性質、また電子配位についても深く検討が加えられる必要がある。はたしてLJ, M3, M6など現象論的ポテンシャルを用いることが適切かどうかにも疑問が残る。この点についても量子力学的検討が待たれるのである。

本研究にあたり、有益な議論をして頂いた松瀬丈浩助教授に感謝します。また、森川尚、花見雅幸、望月渉君に計算の援助を得たことを感謝します。

引用文献

- 1) A. L. Mackay, Acta. Cryst. 15, 916 (1962) M. R. Hoare, Adv. Chem. Phys. 40, 49, (1979)
- 2) D. Shechtman et al. Phys. Rev. Lett. 53 1951, (1984)
- 3) A. L. Mackay, Physica 114A, 600 (1982)

Summary

On the Static Properties of Mackay Icosahedra in Microcluster Structure

Megumi UENISHI* and Akihiro SUZUKI

Department of Fine Materials Engineering, Shinshu University, Ueda 386.

The qualitative properties of Mackay icosahedra are investigated in terms of binding energies of particles with each shell.

The face centered cubic type polyhedra are employed for comparison.

In order to see the stability of each shell, the Hessian matrix is introduced. Particles in surface region play a main role in binding the Mackay icosahedra, while the innermost particles do in binding the face centered cubic polyhedron.

* Kurabo Ltd. Anjo, Aichi