

東北大学 金属材料研究所 教授 川添 良幸 氏（写真1中央）ら川添研究室は、Mn, Fe, Co, Niなど3d遷移金属を内包したシリコン・ナノチューブの構造とその磁気作用について第一原理計算を使って明らかにした。それによると、Feを内包したシリコン・ナノチューブ“Si<sub>24</sub>Fe<sub>4</sub>”がバルク金属と同じ強磁性体になる。また、Mnを内包したシリコン・ナノチューブが0.03eVのバンドギャップを持った反強磁性体になり、Siベースのスピントロニクス・デバイス材料として有望であることも分かった。研究内容は、2003年9月30日発行のPhysical Review Lettersに論文「Magnetism in Transition-Metal-Doped Silicon Nanotubes」として掲載した。

川添研究室では、シリコン・ベースの新ナノ材料の可能性を提唱しており、すでに客員教授のVijay Kumar 氏（写真1左）が、金属を内包するとシリコン・フラーレンが安定的に存在することを明らかにしている。また、2002年10月には、東北大学 工学研究科 材料物性工学専攻 博士課程に在籍し同研究室 で研究しているAbhishek Kummamar Singh 氏（写真1右）が、アルカリ土類金属のBeを内包したナノチューブ“Si<sub>12</sub>Be”の構造を解析するとともに、金属的な性質を持つことを解明し、電子デバイスの配線材料に有望であることを明らかにしてきた。

金属を内包しないSiの有限原子個数ナノ構造、例えばSi<sub>24</sub>は、写真2左に示すような立体構造になっており、チューブ構造ではない。しかし、Be原子1個を内包したSi<sub>12</sub>は、SiがSP<sub>3</sub>混成軌道共有結合によって写真2中央に示したような立体構造となる。そして、二つのSi<sub>12</sub>Beユニットを組み合わせたSi<sub>24</sub>Be<sub>2</sub>は、SiがSP<sub>2</sub>混成軌道による共有結合によってチューブ構造となる。これはちょうどCがSP<sub>3</sub>結合でダイヤモンドに、SP<sub>2</sub>結合で平面のグラファイト構造となることに相当している。Si<sub>12</sub>Beユニットを任意の個数結合することで、チューブの長さも調節できる（写真2右）。

今回Singh 氏は、まず、Si<sub>12</sub>Mn, Si<sub>12</sub>Fe, Si<sub>12</sub>Co, Si<sub>12</sub>Niが1ユニットのみでもSP<sub>2</sub>結合であることを解析するとともにBe内包と同様に、Mn, Fe, Co, Niを内包しても任意の長さのシリコン・ナノチューブを形成できることを明らかにした。

そして、磁気作用に関しては、Mn, Fe, Co, NiのうちFeが高い磁気モーメントも持つことを明らかにした。磁気モーメントはチューブの中央で高く、端が低い。その範囲は1.0μB~2.6μB。

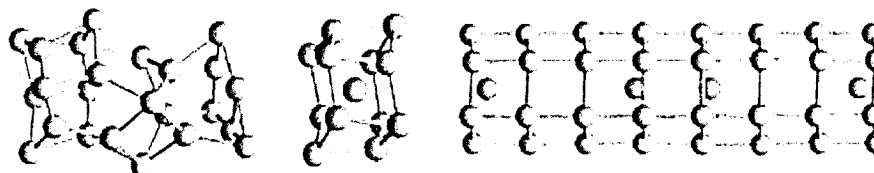
また、Mnを内包したSi<sub>24</sub>Mn<sub>4</sub>は反強磁性体であるが、フェルミ準位より0.03eV高いレベルで強磁性体を示す。電子のスピンがアップの場合バンドギャップが生じ、ダウンの場合伝導するという性質を示した（写真3）。量子コンピュータなどに使うスピントロニクス・デバイスへの応用に期待できる。

川添氏は「従来から電子デバイスで経験が豊富な材料であるSiをベースに、新しいナノ

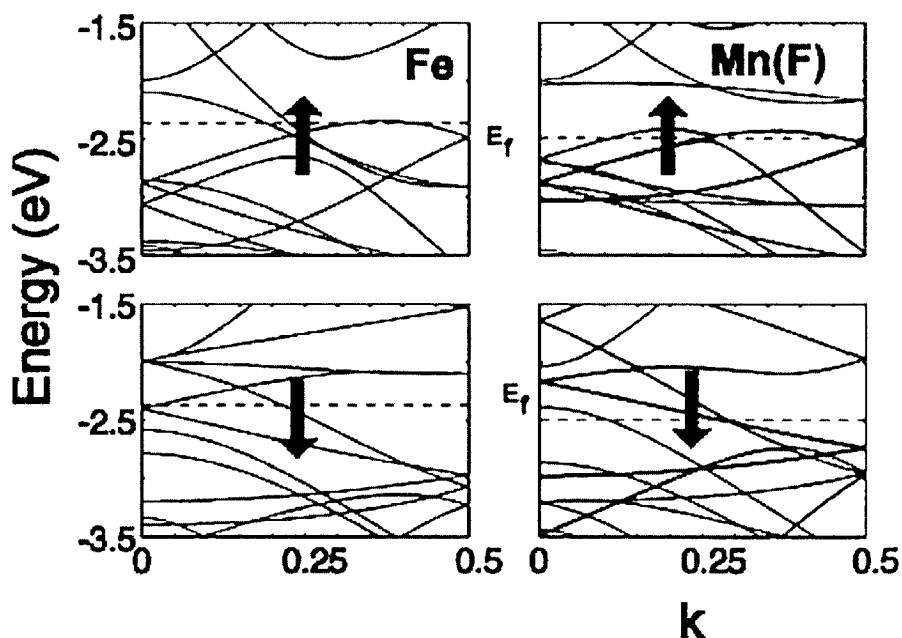
材料の性質を明らかにしていきたい」として、今後もシリコン・フラーレンやシリコン・ナノチューブの新材料としてんも性質を明らかにしていく予定だ。(神保 進一)



【写真1】 東北大学 金属材料研究所 川添研究室。左から、客員教授 Vijay Kumar氏，教授 川添 良幸氏，博士課程在籍のAbhishek Kummmar Singh 氏



【写真2】 Siクラスターの原子構造。左はSi<sub>24</sub>，中央はSi<sub>12</sub>Be，右はSi<sub>48</sub>Be<sub>4</sub>。出典：川添研



【写真3】 Si<sub>24</sub>Fe<sub>4</sub>，Si<sub>24</sub>Mn<sub>4</sub>のバンドギャップ構造。出典：川添研