

ダイヤに似た構造の新結晶

「K4」金属結晶を確認

東北大が スパコン計算 生成法見通しも

【仙台】東北大学の学際研究チームは、スーパーコンピュータ（スパコン）を活用した大規模計算により、ダイヤモンドに似た結晶構造を持つ炭素の「K4」結晶が金属結晶であることを確認した。計算手法は実験値を使わずに新物質などを予測する第一原理計算を用いた。新結晶の結合の強さや電子状態を求めた結果、導電性を持つことが分かった。今後の材料設計への指針として注目される。

スパコンを使った新結晶の物性研究は、科学技術振興機構（JST）の戦略的創造研究推進事業（CREST）の一環として行った。東北大の原子分子材料科学高等研究機構（阿房研究室・特殊合成場）、金属材料研究所（川添研究室・計算材料学）、理学研究科（小谷研究室・数学）の学際研究チームで取り組んだ。実際の計算は多元物質科学研究所の伊藤正寛博士が担った。

計算結果からK4結晶は、炭素系の準安定構造として存在し、グラファイト（すず）結晶にあ
る特定の方向から圧力をかけると生成できる見通しも得た。将来はダイヤモンドを基板に「炭

素だけの集積回路が構築できる可能性もある（金研）としている。成果は、14日付の米国物理学会レター誌に掲載される。K4は炭素の新しい結晶としてその存在がある。08年に明治大学理工学部
の砂田利一教授が数
学の理論上で証明した。その結晶構造は、10角形が集積した形であることが示した。自然界での存在が確認されていないというK4はまだ未知の物質。新物質の創成に向けてその物性の予測が期待されていた。