

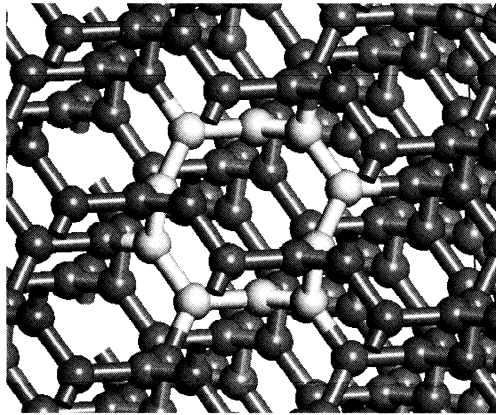
第3の炭素結晶を計算で証明

本学教授らの 研究グループ 合成実験に着手

ダイヤモンドと黒鉛(グラファイト)の他にも炭素原子だけで作られる構造の新物質が存在することを、本学の川添良幸教授(金属材料研究所・計算材料学)、阿尻雅文教授(多元物質科学研究所・化学工学)、小谷元子教授(理学研究所・幾何学)、伊藤正寛博士(多元物質研究所・計算材料学)らがスーパーコンピュータのシミュレーション計算で証明した。合成実験を本学の阿尻雅文教授

らが始めている。この物質はK4といい、計算によればダイヤモンドより柔らかいが黒鉛よりは硬い。加えて電気を通す金属の性質があるため、集積回路などへの応用が期待される。一つ一つの炭素原子は2次元構造の黒鉛と同じ結びつき方をしているが、3次元の立体構造を持つ。振動解析の結果、完全なK4に近い複雑な原子構造で安定になることが予想される。現実にもきれいな構造で安定するダイヤモンドは特別。新結晶の合成に成功した暁には、様々な原子を

注入することで新機能の発現が期待される。K4は本学名誉教授の砂田利一明治



▲炭素10個が環状構造になっているK4のCG画像(色の薄い部分)

大教授が2008年、数学的な手法で存在を示していたが、今回計算上で様々な性質を明らかにした。科学技術振興機構(JST)が進める戦略的創造研究推進事業(CREST)の成果。

研究成果は、米国物理学会誌「フィジカル・レビュー・レターズ」に掲載された。