

MgB₂ ナノチューブの電子状態とフォノン Electronic states and phonons in MgB₂ nanotube

櫻井誠大、高田康民

Masahiro Sakurai and Yasutami Takada

東京大学 物性研究所

The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, Kashiwa Chiba 277-8581

グラファイトや窒化ホウ素 (h-BN)、二硫化タングステン (WS₂) は、層状構造をとる物質である。近年、これらの層状物質において 2 次元単原子層シートおよびナノチューブが安定に単離・合成される事が相次いで報告されている[1]。超伝導転移温度 (T_c) 39K を示す二ホウ化マグネシウム (MgB₂) も同様の層状の結晶構造をとるので、MgB₂ はナノチューブ構造をとるのではないかと期待される。そこで本研究では、より高い T_c を示す可能性のある結晶構造として MgB₂ ナノチューブを考えた。

まず、密度汎関数法による全エネルギー計算を行い MgB₂ ナノチューブの構造安定性を系統的に調べた。その結果、すでに理論予測されている構造[2]の他にも単層シートよりも安定なナノチューブ構造が存在する事が分かった。興味深い事に、これらのチューブ構造は広い直径領域にわたって安定と予測され、同数の価電子を持つ炭素物質系及び BN 物質系とは大きく異なる事が分かった。次に、バンド計算の結果からフェルミ面近傍の電子状態について議論する。さらに、フォノン構造および電子格子相互作用の計算結果についても報告を行う。MgB₂ バルク結晶において超伝導出現の鍵となった E_{2g} モードに着目して超伝導出現の可能性について議論する。

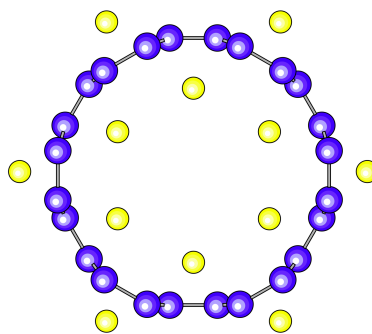


図 : MgB₂ ナノチューブの断面図。

[1] 例えば、炭素物質系ではグラフェンとカーボンナノチューブが合成されている。

[2] S. Saito, S. G. Louie, and M. L. Cohen: J. Phys. Soc. Jpn. 76 (2007) 043707.