

新規ホウ素、ホウ化物の理論的探索

Keyword : ホウ素、ホウ化物、理論計算

研究の背景

ホウ素は多様な原子構造を取る性質があります。そのため多種の金属、非金属原子を取り込んで様々な化合物を作ります。ホウ化物には有用な性質を持つ未知の物質がたくさん存在すると考えられます。

研究の狙い

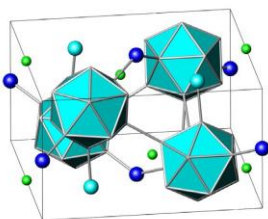
ホウ素単体でも未知の構造が存在すると考えられます。ホウ化物は、ホウ素の量に応じて半導体的または金属的な性質を示し、超伝導材料、熱電変換材料などの探索が行われています。新たな構造や機能をもつホウ素、ホウ化物の発見を目指しています。

最先端研究ピックアップ

理論的に予測された α 正方晶型と β 正方晶型のホウ素の構造と電子状態密度。[1,2]
従来はa軸とb軸の長さが等しいと考えられていましたが、
我々の計算によると厳密には少し異なる(斜方晶)と予想されます。
最近我々の予測に基づいた α 正方晶型のホウ素が実験的に発見されました。[3]

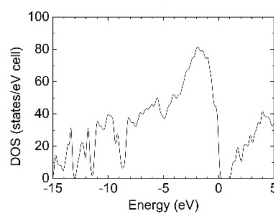
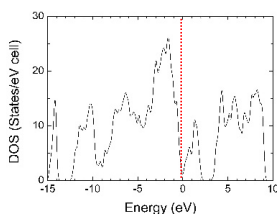
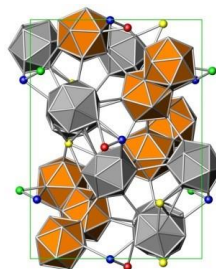
α 正方晶型ホウ素

20面体の頂点と格子間サイト(青、水色、緑)にホウ素原子が存在します。
バンドギャップの狭い半導体的性質を示します。(下図)



β 正方晶型ホウ素

2種類の20面体の頂点と、格子間サイト(赤、青、緑、黄)にホウ素原子が存在します。
半導体的性質を示します。(下図)



文献

- [1] W.Hayami et al. Journal of Solid State Chemistry 183, 1521 (2010)
- [2] W.Hayami et al. Journal of Solid State Chemistry 221, 378 (2015)
- [3] E.Ekimov et al. J. Mater. Res., 2016, 1 (2016)

まとめ

- α 正方晶型、 β 正方晶型のホウ素の構造を予測しました。
- 同物質の電子的な性質を明らかにしました。

実用化の目標

- ホウ素、ホウ化物は一般に高融点で、半導体になるものが多く、高温下での各種デバイス、特に熱電変換素子への応用を期待しています。



ナノセオリー分野 材料特性理論グループ

速水 渉

E-mail: HAYAMI.Wataru@nims.go.jp