

新しい3次元炭素同素体の物質設計と物性解明

Design of novel three-dimensional carbon allotropes

筑波大学, °(D) 藤井 康丸, 丸山 実那, グエン タン クン, 岡田 晋

Univ. of Tsukuba, °(D) Yasumaru Fujii, Mina Maruyama, Nguyen Thanh Cuong, Susumu Okada

E-mail: yfujii@comas.frsc.tsukuba.ac.jp

炭素原子の結合形態の多様性により、炭素同素体は非常に多くの幾何構造を取り得ることが知られている。とりわけ、5員環を構成単位としたネットワーク構造は特異な電子物性や、5員環の結合角が sp^3 炭素の結合角と近いことに起因する高い構造安定性の点から注目を集めている。例えば、我々は極めて高い力学特性を有する5員環のみから構築された3次元炭素同素体の物質設計をおこなった[1]。

本研究では、さらなる新規3次元炭素同素体の探索を目的として、6個の5員環が縮環した構造を有するセントロヘキサクイナンと、8員環炭化水素分子であるシクロオクタテトラエンに着目し、両者を共重合させることにより新しい3次元炭素同素体の物質設計をおこなった。さらに、密度汎関数理論を用いて、その構造安定性と力学特性の解明をおこなった。共重合により構築される3次元の炭素同素体は $Fm\bar{3}m$ と $P\bar{4}3m$ の空間群を有する2種類の構造異性体が存在し、いずれも負のポアソン比を有する特異な炭素同素体であることを明らかにした。 $Fm\bar{3}m$ 対称性を有する共重合構造は、適度な体積弾性率と負のポアソン比からダイヤモンドをはるかに凌駕する高いヤング率 (1692 GPa) と剪断弾性率 (1218 GPa) を有する。

[1] Y. Fujii, M. Maruyama, N. T. Cuong, S. Okada, Phys. Rev. Lett. Inpress (2020).

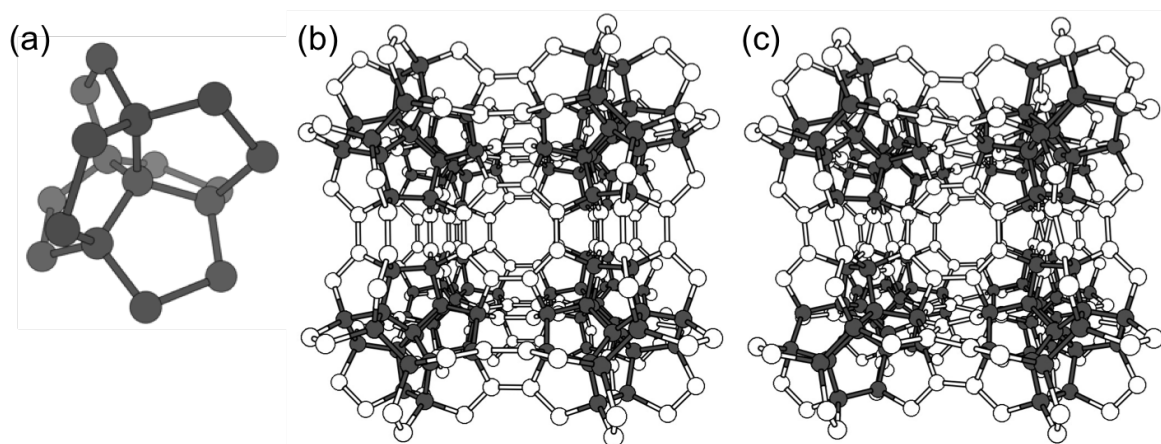


Fig.1 (a) A geometric structures of centrohexaquinane. Optimized structures of copolymers with (b) $Fm\bar{3}m$ and (c) $P\bar{4}3m$ symmetry. Gray and white circles denote sp^3 and sp^2 C atoms, respectively.