

五員環からなる 3 次元炭素同素体の物質設計

Design of a three-dimensional carbon allotrope comprising fused pentagons

筑波大学, [○](M2) 藤井 康丸, 丸山 実那, 岡田 晋

Univ. of Tsukuba, [○](M2) Yasumaru Fujii, Mina Maruyama, Susumu Okada

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

炭素同素体は、炭素原子の 3 種類の軌道混成形態に起因する多様な同素体構造を取ることが知られている。この構造の多様性は、同時に、個々の同素体の物性の多様性を誘起する。とりわけ、炭素原子間の非常に強い共有結合が生み出す高い力学特性は、これらの同素体の複合材料への応用のみならず、近年では熱応用の観点からも注目を集めている。近年、アモルファスカーボンへの急速焼き入れにより、Qカーボンと呼ばれる sp^2 炭素と sp^3 炭素からなる新しい炭素同素体が合成され、ダイヤモンドを超える体積弾性率、磁性を示すことが報告されている。

本研究では特異な力学特性を有する炭素同素体構造の探索と物性解明を目的として、量子論に立脚した計算物質科学の手法を用いて、2 種類の炭化水素分子（スピロ [4.4] ノナ-2,7-ジエンと [5.5.5.5] フェネストラテトラエン）の共重合により構築される 3 次元の炭素同素体の物質設計を行った (Fig. 1)。ここでは、 sp^2 と sp^3 炭素からなる辺を共有した五員環ネットワーク（ペンタダイヤモンド）を考えた。計算の結果、ペンタダイヤモンドは比較的高い 381 GPa の体積弾性率と -0.24 の負のポアソン比を有する硬い炭素同素体であることが明らかになった。さらに、適度な体積弾性率と負のポアソン比から、この物質はダイヤモンドをはるかに凌駕する高いヤング率 (1691 GPa) を有することも明らかになった。また、この同素体は比較的軽い電子／正孔を有する間接ギャップ (2.52 eV) 半導体である。

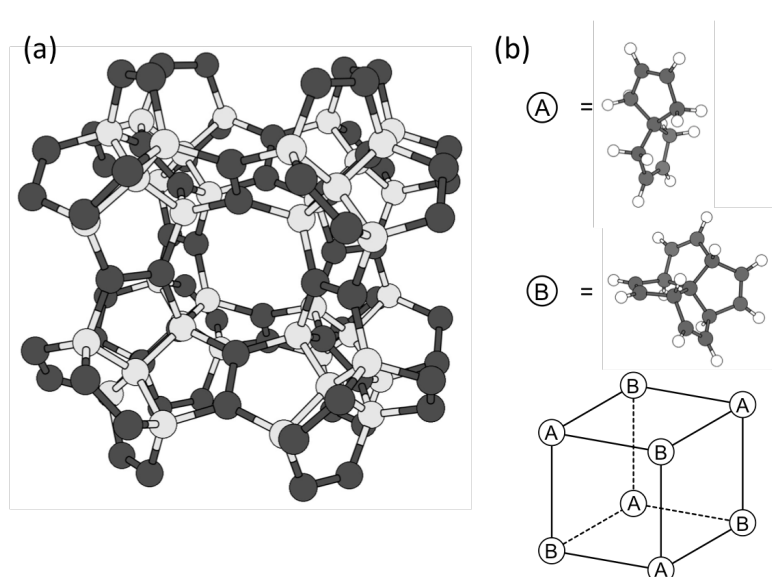


Fig.1 (a) An optimized structure of the pentadiamond. Dark and light gray spheres denote sp^2 and sp^3 C atoms, respectively. (b) Constituent hydrocarbon molecules of the pentadiamond, where A and B correspond with spiro[4.4]nona-2,7-diene and [5.5.5.5]fenestratetraene, respectively. Gray and white spheres denote C and H atoms, respectively.