

ダイヤモンドより軽く強靱な炭素結晶の存在を予言

～「ペンタダイヤモンド」が物質科学の新たな展開を促す～

筑波大学数理物質系の丸山実那助教、岡田晋教授、筑波大学大学院理工情報生命
学術院の藤井康丸・博士後期課程 1 年らの研究グループは、五つの炭素原子が
環状に結合した五員環を組み合わせることで、新しい 3 次元炭素結晶の可能性
を理論的に予言しました。また、量子力学に基づいた物性シミュレーションから、
この物質がダイヤモンドより軽くて強靱であることを示しました。

黒鉛やダイヤモンドなど炭素の結晶は、古くから基礎科学ならびに応用科学の
対象となってきました。これらの結晶は炭素原子間の化学結合が極めて強く、高
い力学的強靱性と安定性を兼ね備えた機能性材料として、多くの注目を集めて
います。

今回、研究グループは、炭素原子からなる五角形(五員環)の辺を共有させること
により、極めて対称性の高い 3 次元の炭素共有結合ネットワークが構築可能で
あることを幾何学的な考察から予言し、ペンタダイヤモンドと命名しました。ペ
ンタダイヤモンドは極めて強靱な炭素結晶で、ヤング率と剪断弾性係数は、ダイ
ヤモンドのそれを遥かに凌駕する極めて強靱な炭素同素体であることを明らか
にしました。また、ペンタダイヤモンドは負のポアソン比を有し、外力に対して
通常物質とは反対の構造応答特性を示す可能性があることを明らかにしました。

この結果は、ペンタダイヤモンドが高硬度構造材料や圧電材料など極めて広範
な領域において、機能性材料としての応用を秘めた物質であることを示唆して
います。

研究の背景

黒鉛やダイヤモンド等の炭素結晶は、炭素の取り得る結合形態の多様性から極
めて多くの構造が存在し、その形状に強く依存した物性を有することが知られ
ています。また、多くの結晶は、炭素原子間の共有結合が極めて強いことから、

軽量で高硬度な材料として注目を集めています。

これまで、異なった結晶構造の炭素が実験的に数多く合成され、かつ理論的に予言されてきました。それらの多くは、ある特定の変形に対して、ダイヤモンドを凌駕する高い弾性率を有することが知られていますが、トータルで高い弾性率を示す炭素結晶の存在はほとんど知られておらず、その合成ならびに予言が期待されていました。

研究内容と成果

本研究グループは、炭素原子からなる五角形の辺を全て共有させることにより（図1）、極めて対称性の高い3次元の炭素共有結合ネットワークが構築可能であることを幾何学的な考察から予言し、ペンタダイヤモンドと命名しました（図2）。ペンタダイヤモンドは、ダイヤモンドの6割程度の質量密度（2.26g/cm³）しか持たない極めて軽い3次元炭素結晶で、4配位と3配位の炭素原子で構成されま

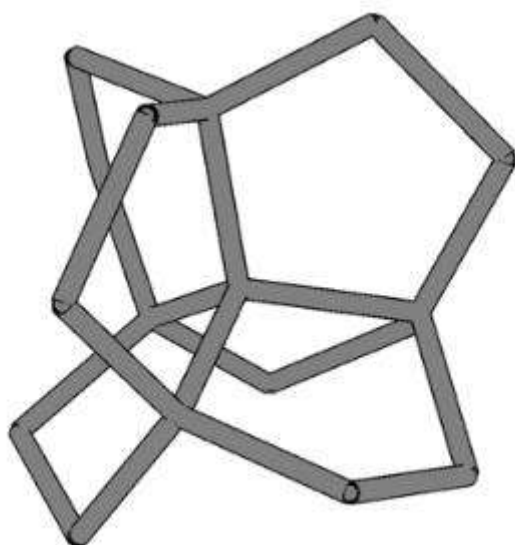


図1 ペンタダイヤモンドの構成要素となる辺を共有した五角形構造



図2 ペンタダイヤモンドの構造。

白丸が近接する四つの炭素原子と結合を有する炭素原子、黒丸が近接する三つの炭素原子と結合を有する炭素原子を表す。

さらに、このペンタダイヤモンドに対して量子力学に基づく物性シミュレーションを行い、ペンタダイヤモンドが安定した炭素結晶の候補であることを明らかにしました。さらに、弾性率の解析から、ペンタダイヤモンドはダイヤモンドの8割の体積弾性率、1.3倍のヤング率、1.8倍の剪断弾性率を有し、伸長やねじれなどの異方的な構造変形に対してダイヤモンドを遥かに凌駕する強靭性を有することを明らかにしました。

また、ペンタダイヤモンドは負のポアソン比を有し、伸長/圧縮に対して、その鉛直方向における断面の増加/減少という奇妙な力学応答性を示しことを明ら

かにしました。更に、この負のポアソン比から、既存の物質の中でも最速クラスとなる物質中の音速を有することも明らかにしました。

今後の展開

エネルギー的に安定な構造の予言により、今後、合成を目指すべき新しい炭素結晶の可能性を示しました。これは、炭素物質科学の更なる展開を促すものであります。

また、ペンタダイヤモンドの軽くて高い強靭性は、新しい高硬度材料への応用を示唆しており、ペンタダイヤモンドを用いた耐衝撃材料の開発が期待されます。更に、負のポアソン比から、圧電材料など構造変形を用いた新たな機能性材料への応用も期待されます。

論文情報

タイトル Pentadiamond: A Hard Carbon Allotrope of a Pentagonal Network of sp^2 and sp^3 C Atoms

雑誌 Physical Review Letters

URL <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.125.016001>

日本語原文

<http://www.tsukuba.ac.jp/attention-research/p202007011400.html>