

高温高圧下におけるナノ多結晶ダイヤモンドの ideal strength に関する分子動力学シミュレーションによる研究 Ideal Strength of Nano-polycrystalline diamond under High Temperature and High Pressure using MD Simulation

打田 和香^{1*}, 中村 振一郎², 飯高 敏晃³
Waka Uchida^{1*}, Shinichiro Nakamura², Toshiaki Iitaka³

¹ 東京工業大学大学院 生命理工学研究科 生体分子機能工学専攻, ² 独立行政法人 理化学研究所 社会知創成事業 イノベーション推進センター, ³ 独立行政法人 理化学研究所 基幹研究所

¹Tokyo Institute of Technology, Graduate School of Bioscience and Biotechnology, ²RIKEN, Research Cluster for Innovation,

³RIKEN, Advanced Science Institute

ナノ多結晶ダイヤモンドは、ナノサイズのダイヤモンド結晶構造を持った人工ダイヤモンドであり、天然のダイヤモンドと同様な物性を持っている [1]。すなわち、硬度が高く、高い熱伝導性、絶縁性を持つ。また、多数の結晶面が重なり合った構造であるため、天然のダイヤモンドより硬い。そのことより、高圧実験で用いられているダイヤモンドアンビルセル (DAC) への応用が考えられている。このため、ナノ多結晶ダイヤモンドの作製及び物理的性質を観察することは非常に重要な課題となっている。そこで本研究では、ナノ多結晶ダイヤモンドの硬さを調べることを目的とした。

準備計算として、ダイヤモンドの結晶構造を用いて ideal shear strength を求めた。ソフトウェアは LAMMPS [2] を用い、Tersoff potential [3] (SiC.tersoff) を用いた。温度は 300 K、Time step は 0.001 ps に設定した。構造最適化を NPT 条件下で 1 ps 行った後、210 ps の MD シミュレーションを NVT 条件下で行った。この際、1 ps 経過する度に、各結晶面の各方向に strain を増加させた。その結果、すべり面が {010} ですべり方向が <100> の時、ideal share strength は 202.0 (GPa) でその時の critical strain は 0.39 であった。すべり面が {110} ですべり方向が <-110> の時は、ideal share strength は 93.4 (GPa) でその時の critical strain は 0.33 であった。また、すべり面が {111} ですべり方向が <11-2> の時、ideal share strength は 87.9 (GPa) でその時の critical strain は 0.16 であった。

今後、ナノ多結晶ダイヤモンドに Hall-Petch [5,6] の関係があるか否かを詳しく調べる。Branicio らによって報告されている [4]、grain size 4.1 nm より大きな grain size の計算を行い、ナノ多結晶ダイヤモンドの硬さを調べる。その際、そのナノ多結晶ダイヤモンドの、あるすべり面におけるあるすべり方向の ideal strength を求める。ideal strength とは、無限に欠陥のない固体に徐々に負担をかける際、その固体が弾性限界を超え、形が完全に化する直前の弾性の限界の値をいう [7,8]。この計算も、準備計算と同様に分子動力学シミュレーションを行う。

[1] T. Irifune, A. Kurio, S. Sakamoto, T. Inoue, H. Sumiya, Nature 421, 6923 (2003).

[2] S. Plimpton, J. Comp. Phys. 117, 1 (1995).

[3] J. Tersoff, Phys. Rev. B 39, 5566 (1989).

[4] Z.D. Sha, P.S. Branicio, V. Sorkin, Q.X. Pei, Y.W. Zhang, Diamond & Related Materials. 20, 1303 (2011).

[5] Hall, E. O. The deformation and ageing of mild steel: III Discussion of results. Proc. Phys. Soc. Lond. B 64, 747 (1951).

[6] Petch, N. J. The cleavage of polycrystals. J. Iron Steel Inst. 174, 25 (1953).

[7] A. Kelly and N. H. Macmillan, Strong Solids (Clarendon, Oxford, 1986).

[8] J. W. Morris, Jr., C. R. Krenn, D. Roundy, and M. L. Cohen, in Phase Transformations and Evolution in Materials, edited by P. E. A. Turchi and A. Gonis (The Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale, PA, 2000), p. 187.

キーワード: ナノ多結晶ダイヤモンド, ideal strength

Keywords: nano-polycrystalline diamond, ideal strength