НОВАЯ СТРУКТУРА И ТВЕРДОСТЬ КУБИЧЕСКОГО ГРАФИТА

Покропивный А.В., Солонин Ю.М.
Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины,
03142 Киев, Кржижановского, 3, e-mail: apokr@ipms.kiev.ua

В последнее десятилетие новые фазы углерода притягивают интерес в не меньшей степени, чем фуллерены и нанотрубки. Среди этих новых фаз можно отметить С8, карбины, кубический графит. Структура последнего предложена только недавно, хотя сама фаза синтезирована около пятидесяти лет назад. Подобная проблема определения структур новых фаз является обычной для новых форм углерода из-за их малого массового выхода, в отличие от, например, нанотрубок, выход которых относительно велик.

Ауст и Дрикамер [1] наблюдали новую фазу в 1963 году при трансформации графита при высоком давлении. В 2004 году нами предложена структура этой фазы на основе доступных данных. Фаза были индексирована в кубической системе с периодом решетки ~5.55 Å со структурой LTA цеолита [2].

В данной работе нами предложена новая структура кубического графита, а именно цеолит KFI, с помощью моделирования и анализа пиков дифракционных картин. Релаксированная ячейка KFI цеолита изображена на рис.1, вычисленная методом квантовой химии на уровне теории rhf/6-31g. Нанокластер представляет собой элементарную ячейку этой фазы с sp^3-связями. Вычисленный период решетки равен ~9.1 Å , плотность – 2.3 г/см^3. Дифракционный спектр структуры KFI хорошо согласуется с экспериментальным [1], если заменить рефлексы 111 на 220, 200 на 310, 210 на 320, 211 на 400, 220 на 421, 221 на 422, 222 на 440, и 321 на 600. Таким образом, новый период кубического графита равен ~9 Å. Длины связей равны 1.54 и 1.58 Å в соединительных квадратах, 1.53, 1.56, и 1.57 Å в призмах, углы - 90 и 135 градусов.

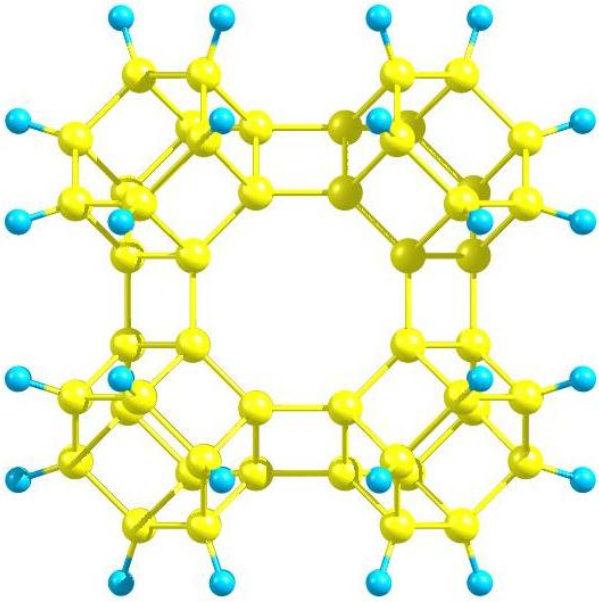

Рис.1 Нанокластер цеолита KFI в качестве элементарной ячейки кубического графита. Атомы водорода, имитирующие периодические граничные условия, показаны кружками меньших размеров

Твердость вычислена по формуле $120*\rho^{2/3}/d^{5/2}$, где ρ – плотность, а d – средняя длина связи, и равняется около 70 ГПа, что несколько меньше, чем у алмаза (93 Гпа).

Таким образом, структура кубического графита остается дискуссионной и требует дальнейшего систематического исследования.

[1] R. B. Aust, H. G. Drickamer, Science, 140, 817 (1963).
[2] В. В. Покропивный, А. В. Покропивный, Физика твердого тела, 46, 380 (2004).

.