

河北工业大学在石墨—金刚石相变机制理论研究方面取得重大进展

日期：2014年08月27日 河北省科技厅

近日，河北工业大学在石墨—金刚石相变机制理论研究方面取得重大进展。8月4日，Nature出版集团的《Scientific Reports》杂志刊发该校谢红献博士为第一作者的论文《Mechanism for direct graphite-to-diamond phase transition》（石墨—金刚石相变机制研究）。该研究为人工合成金刚石提供了一个全新的思路：可按人意愿控制人造多晶金刚石晶粒的大小，以及单晶金刚石的合成。

金刚石是立方晶体结构，石墨是“ABABA”层状晶体结构。石墨要转变成立方晶体结构的金刚石，一般认为首先要转变成“ABCABCA”结构的石墨，然后通过原子面的弯曲才能转变成立方金刚石。该研究通过系统的分子动力学模拟计算提出了一个崭新的转变机制：波状弯曲滑移机制。该研究表明：如果首先把石墨的层间距压缩到0.24nm左右，再沿[210]方向压缩就可得到单晶立方金刚石；如果石墨层的间距过大或过小，沿[210]方向压缩将会得到多晶立方金刚石或六角结构金刚石，且晶粒的大小决定于石墨层间距的大小。

打印本页 ▶

关闭窗口 ▶