
碳家族再添新成员！学者发现次晶态金刚石

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/16705.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

碳家族再添新成员！学者发现次晶态金刚石。 近日，北京高压科学研究中心研究员缙慧阳等在高温高压条件下合成了一种新形态的金刚石——次晶金刚石(Paracrystalline diamond)，填补了非晶结构和晶体结构之间原子排列尺度上的缺失环节，为深层次理解非晶材料的复杂结构提供了密钥。该成果于11月25日在线发表于《自然》杂志。

一般来说，根据是否存在长程周期性，将固体分为结晶态和非结晶态。然而，当晶体中的长程有序度显著降低时，区分这两种状态就变得异常困难，特别是对于强共价和类共价固体。

为了探索这一结构之谜，理论科学家们提出了次晶态结构模型，其本质上是在非晶基体中引入纳米尺寸的中程有序(MRO)结构，即完全由中程有序的次晶组成，不具有长程有序性。此前，一直未能在自然界或实验中发现这种物质状态。

缙慧阳与合作者通过其在大腔体压机中发展的最新极端高压技术，在30GPa、1500-1600K的温压条件下对富勒烯(C60)前驱体进行高温高压处理发现，压缩的富勒烯聚合转变成为一种高密度无序的sp³键合的碳。高分辨透射电子显微镜显示，样品中存在高密度且均匀分布的类晶体团簇（尺寸为0.5-1.0nm），其原子构型接近于立方和六方金刚石，且具有很高的晶格畸变，即次晶金刚石。

由亚纳米尺寸次晶为主要构成次晶金刚石 图由作者提供

为了探索次晶金刚石的形成过程，研究人员对C60在高温高压条件下结构演变进行了大尺度的分子动力学模拟，建立了与实验结果高度匹配的次晶金刚石模型。模拟结果显示，其合成主要归功于两个因素：一是由于金刚石具有最大的四面体序参量。与非晶硅相比，非晶金刚石在两个原子配位壳层内存在超强的类金刚石短程有序性，这一特征有利于中程有序结构的形成；二是依赖于C60的结构特点，C60向次晶金刚石转变经历了三个主要阶段。

模拟结果显示，次晶金刚石和非晶金刚石具有显著的结构差异。二者都不具有长程有序性，且在第一个配位原子层，次晶金刚石和非晶金刚石同时具有相似的有序性。然而，在中程尺度范围（2-5原子层），次晶金刚石的有序性虽然在逐步降低，但是有序性远高于非晶金刚石。该论文的共同通讯作者、美国乔治梅森大学教授生红卫说。

这种次晶态的发现，在结构拓扑上链接了非晶态和晶态，对于揭示非晶材料复杂的结构本质具有深远意义，该论文的第一作者、北京高压科学研究中心博士唐虎告诉《中国科学报》，次晶金刚石的发现为碳材料家族增加了一种新的结构形态，它兼具优异的机械性能、热稳定性以及独特的光学特性，在高端技术领域和极端环境下具有重要的应用前景。有利于进一步开发新型类金刚石材料。（来源：中国科学报刘如楠）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-021-04122-w>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：缙慧阳等 来源：《自然》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发