

## Трехмерная полимеризация фуллерита C<sub>60</sub> при сверхвысоких давлениях

*Бразжкин В.В.*<sup>1</sup>

*brazhkin@hppi.troitsk.ru*

<sup>1</sup> ИФВД РАН, Троицк, Москва, Россия

Методом энергодисперсионной рентгеновской дифракции исследована структура высокополимеризованного трехмерного (3D) фуллерита C<sub>60</sub> до давления 11 ГПа. Показано, что эта фаза сочетает в себе черты аморфной ковалентной сетки  $sp^2$ - $sp^3$  и кристаллографически упорядоченной фазы с дальним трансляционным порядком, связанным с модуляцией атомной плотности, унаследованной от исходных молекул C<sub>60</sub>. Кристаллические рефлексы можно описать в рамках ГЦК-структуры с начальным параметром нормального давления 11,718 Å, хотя, вероятно, это является эффектом усреднения рентгеновского рассеяния. Модуль объемного сжатия высокополимеризованного 3D C<sub>60</sub>, 280 ГПа, определенный по изменению параметра решетки под давлением, согласуется с измеренной плотностью и кристаллографической плотностью, а также с первым координационным числом  $Z=3,6$ , определенным из функция радиального распределения согласно теоретическим расчетам. Значение  $Z$  указывает на то, что ~60% атомов углерода находятся в  $sp^3$ -гибридизированных состояниях и высокая степень полимеризации достигается за счет [3+3]-циклоприсоединения. Обсуждается корреляция между плотностью и модулем объемного сжатия для широкого круга углеродных фаз.