

Трехмерная полимеризация фуллерита C₆₀ при сверхвысоких давлениях

*Бразжкин В.В.*¹

brazhkin@hppi.troitsk.ru

¹ ИФВД РАН, Троицк, Москва, Россия

Методом энергодисперсионной рентгеновской дифракции исследована структура высокополимеризованного трехмерного (3D) фуллерита C₆₀ 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 C₆₀. 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 C₆₀, 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.