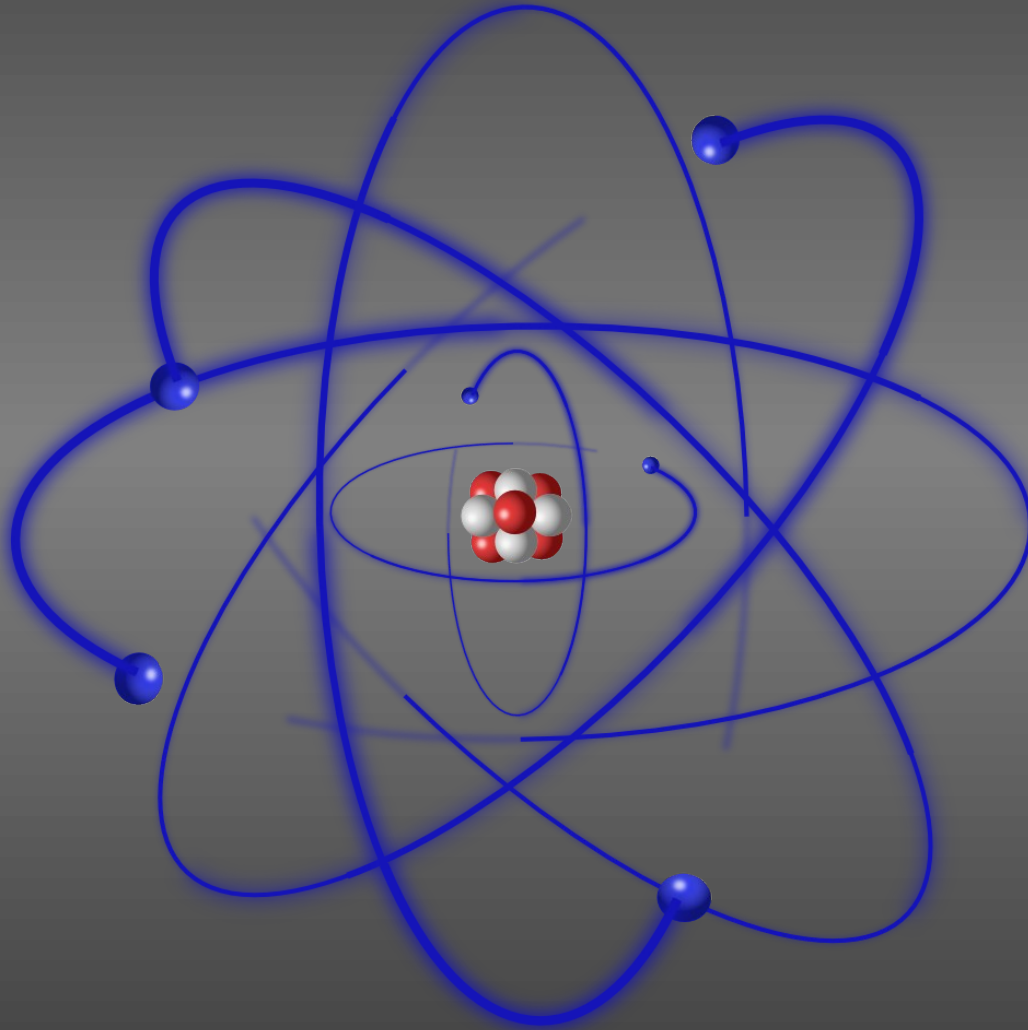


Углерод – элемент более равный чем другие

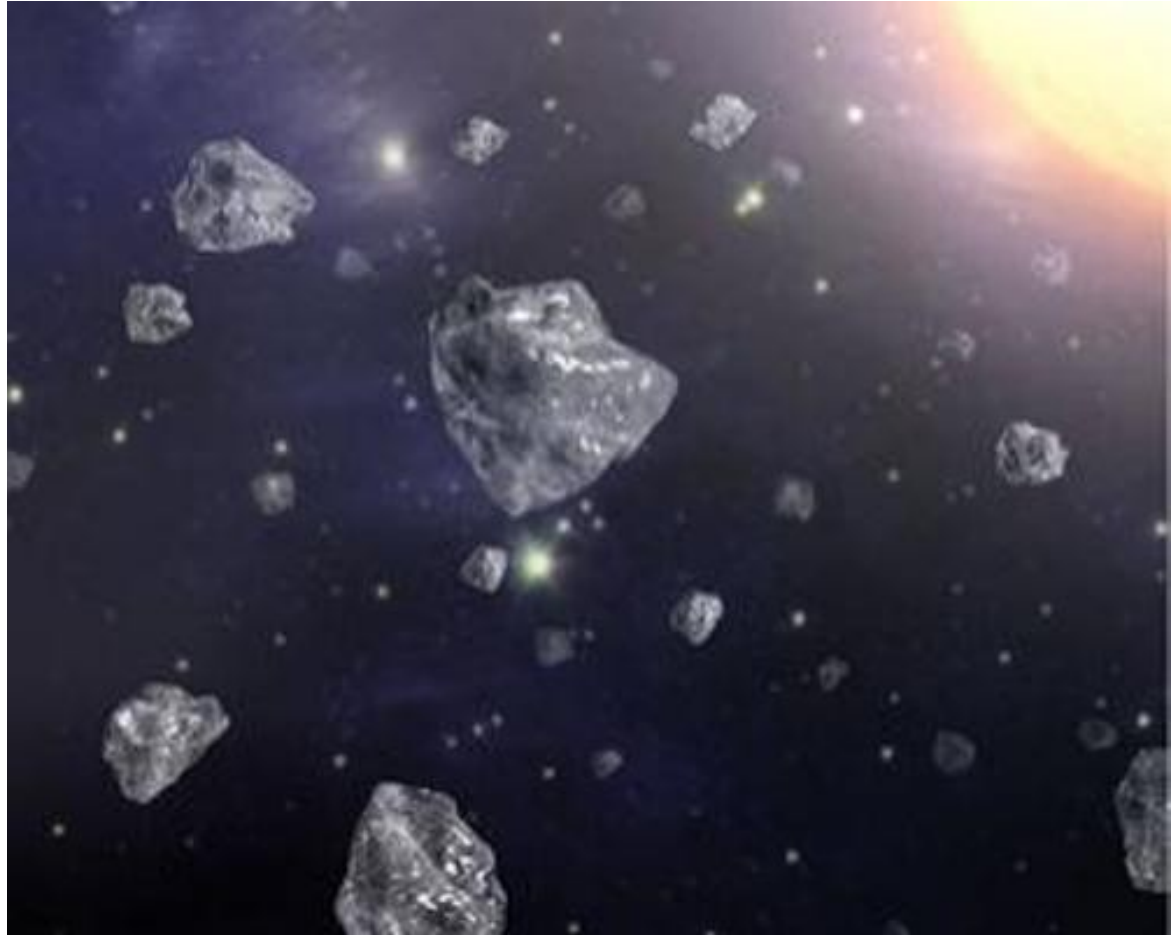


- 1. Углерод во вселенной
- 2. Углерод в Земле
- 3. Материалы на основе углерода
- 4. Применение углерода
- 5. Исследование углерода в ИФВД РАН

Углерод во вселенной

Углерод имеет два стабильных изотопа — ^{12}C и ^{13}C .

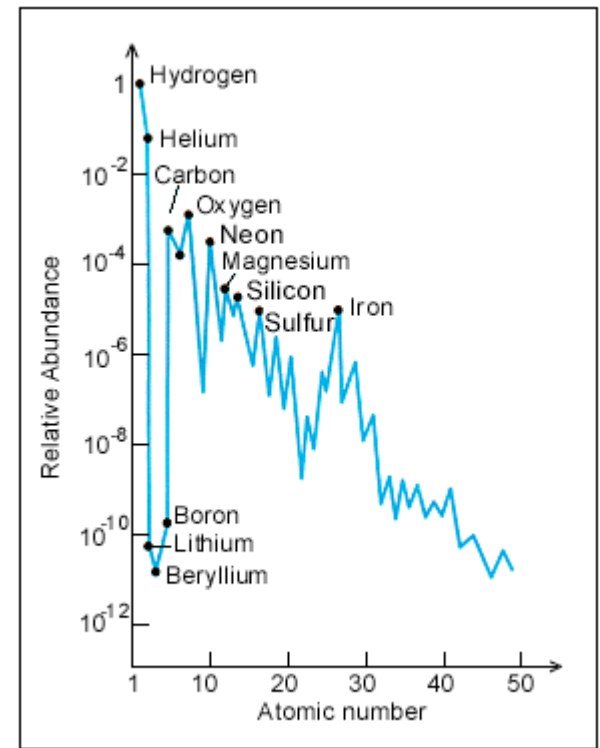
Содержание этих изотопов в природном углероде равно соответственно 98,93 % и 1,07 %. Известны также 13 радиоактивных изотопов углерода (от ^8C до ^{22}C), из которых один — ^{14}C — встречается в природе



IVA	
12.011 A2 hex 4492 ^{MP} 3825 ^{SP} 2.25 2.55 [He]2s ² p ² Carbon	6 2,±4 C
28.0855 A1/B1 fcc 1414 3265 2.33 1.90 [Ne]3s ² p ² Silicon	14 4 Si
72.61 A1/B1 fcc 938.25 2833 5.35 2.01 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² p ² Germanium	32 4 Ge
118.710 A1/B1 fcc 231.93 2602 7.28 1.96 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² p ² Tin	50 2,4 Sn
207.2 A1/B1 fcc 327.46 1749 11.34 2.33 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² p ² Lead	82 2,4 Pb

Углерод формируется в недрах звезд главной последовательности в результате тройных столкновений

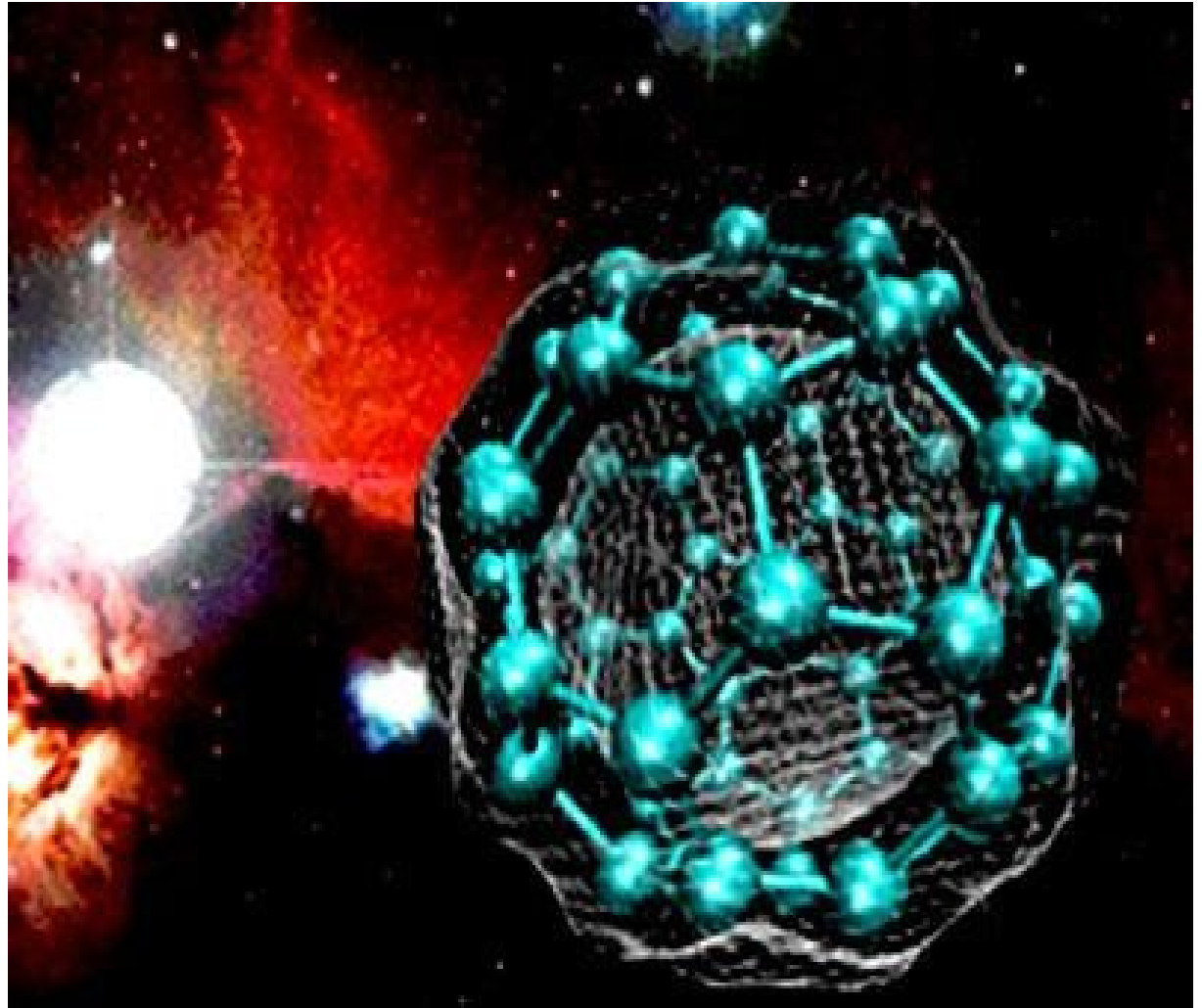
$3 \times {}^4\text{He} \rightarrow {}^{12}\text{C}$ (Изотопы: ${}^{13}\text{C}$, ${}^{14}\text{C}$...)



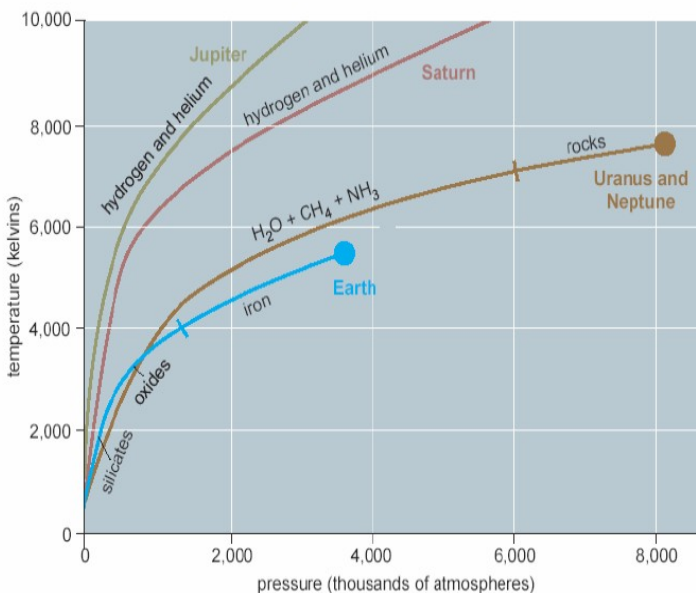
Космическая распространенность : 1- Водород, 2-Гелий, 3-Кислород, 4-**Углерод**
 Нахождение в космосе: межзвездная пыль, метеориты, кометы, углеродные звезды и планеты (графит, алмаз, органические и неорганические соединения).

Углеродная межзвездная пыль

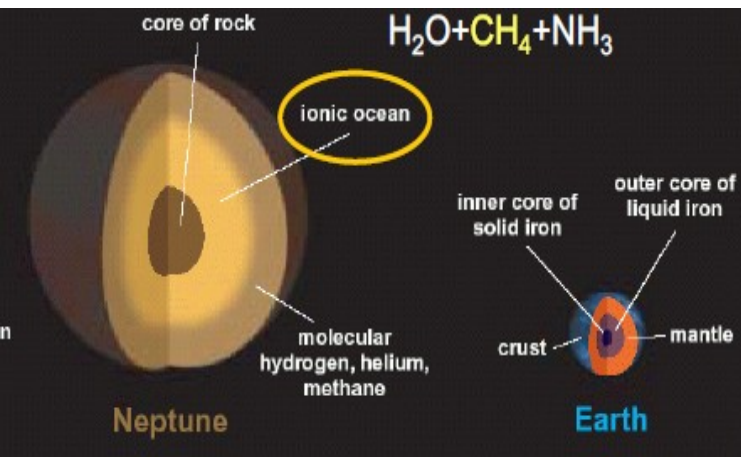
Космическая
пыль
насыщена
наноалмазами,
«спрятанными
внутри
углеродных
«луковиц»



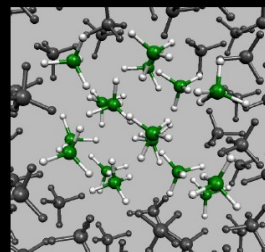
Алмазы в недрах Нептуна



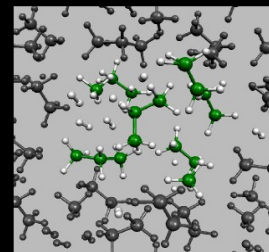
Значительная часть Нептуна состоит из метана. Эксперименты в алмазных наковальнях и компьютерное моделирование показывают, что при условиях, соответствующих недрам Нептуна, метан распадается на водород и алмаз



Dissociation of methane at extreme (planetary) conditions



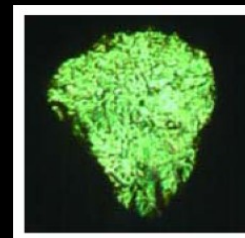
Compressed methane



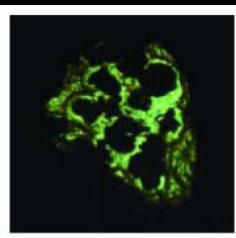
Compressed methane after heating to 4000 K

F. Ancilotto et al., Science 275, 1288 (1997)

Dissociation of methane in a diamond anvil cell

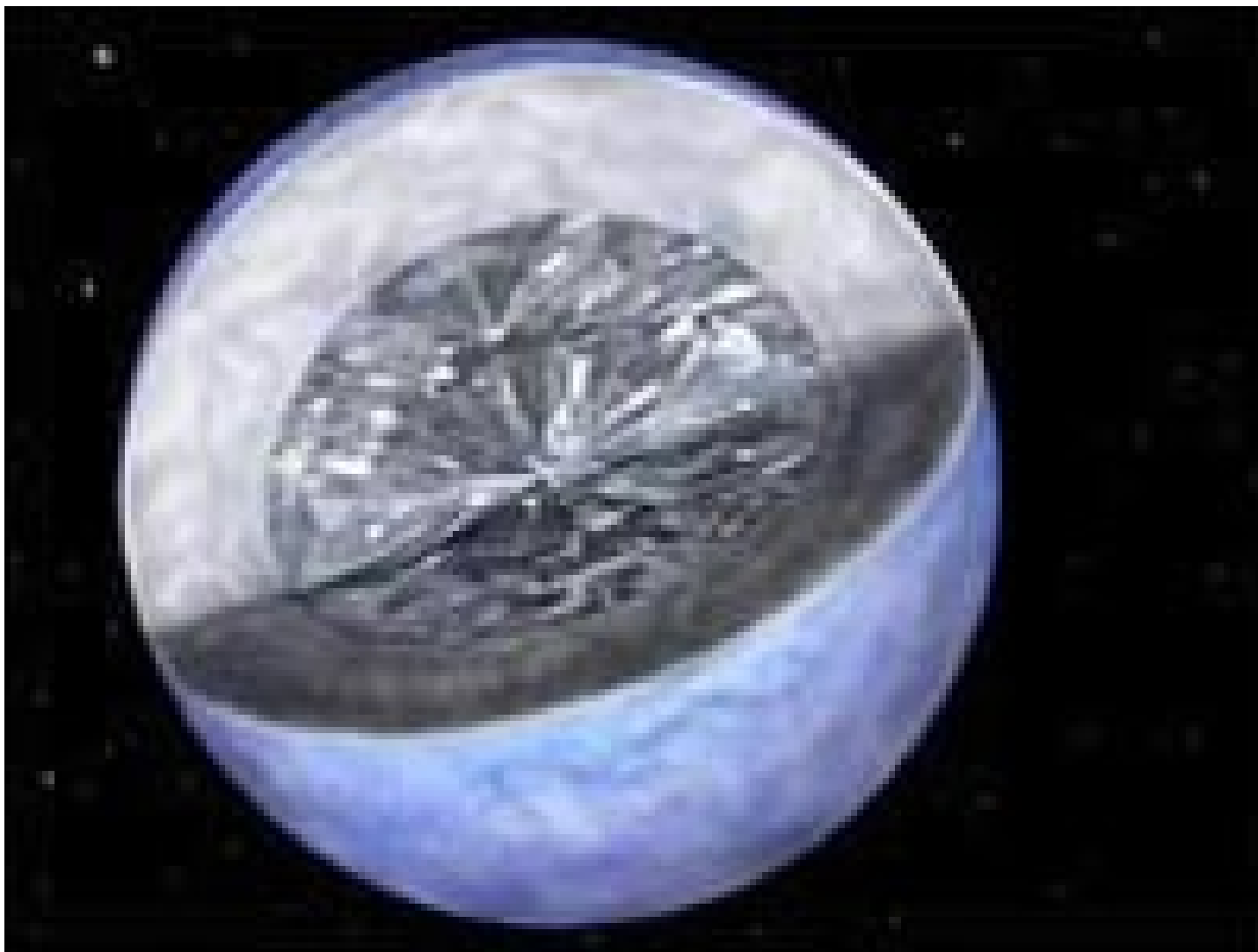


before squeezing



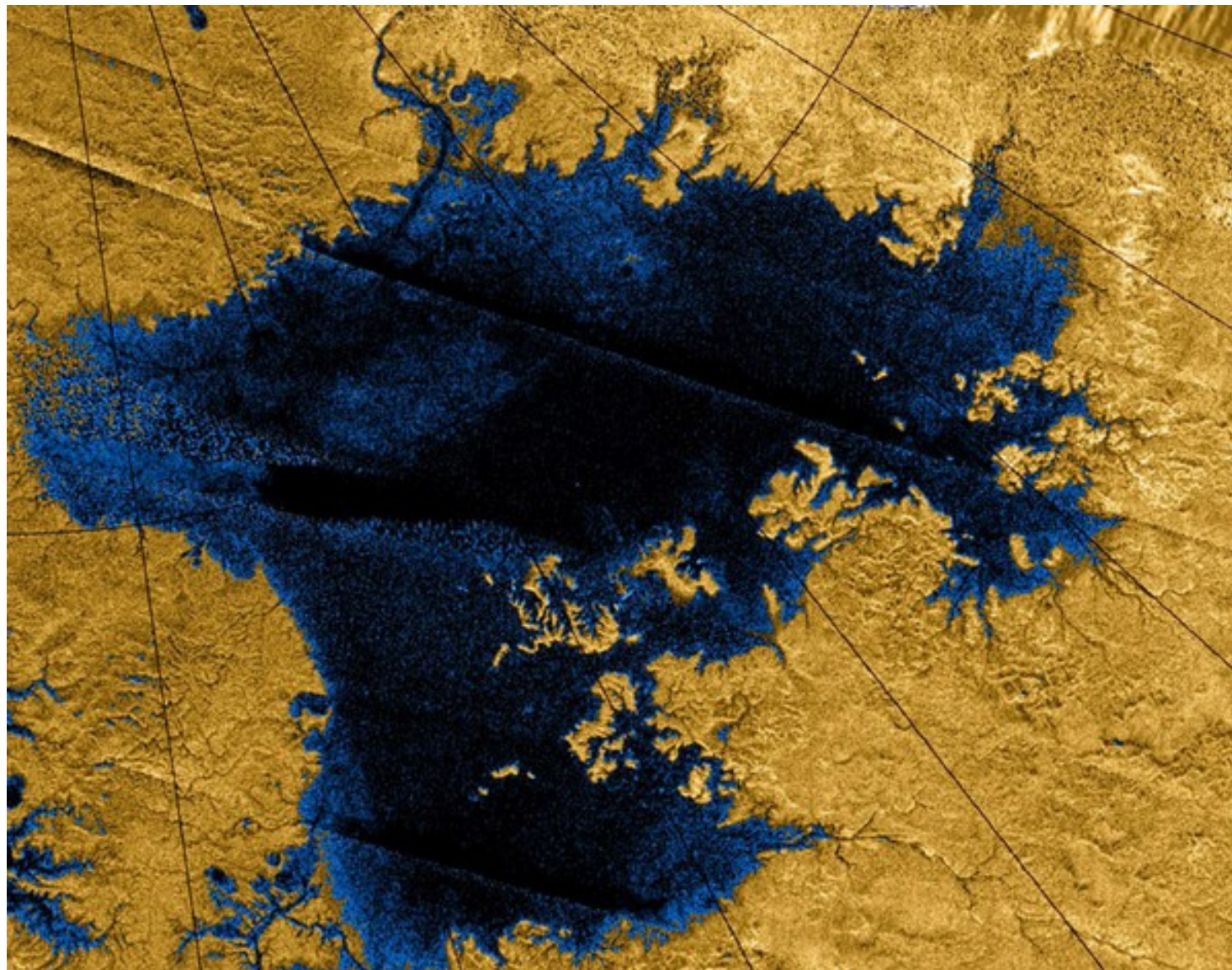
after squeezing

L.R. Benedetti et al., Science 283, 100 (1999)



Белый карлик (Lacy) в созвездии Центавра имеет ядро диаметром 3000 км, состоящее из кристаллического углерода (алмаза)

Метаново-этановые озера на титане



Углерод в Земле

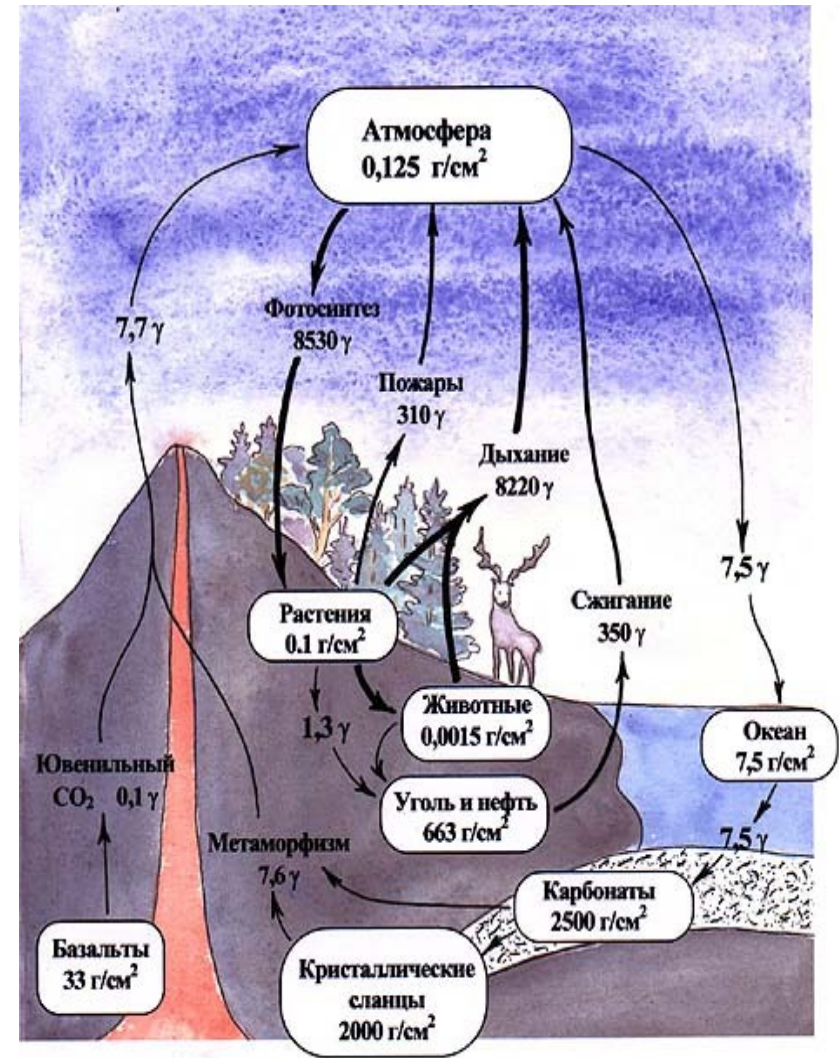
Содержание углерода в хондритах $\approx 3\%$, в Земле от 0.1% до 1.5% (до сих пор не известно!)

Алмаз, графит, шунгит, уголь, торф, нефть Карбонаты $(\text{Ca}, \text{Mg}, \text{Fe})\text{CO}_3$, мергель
Углекислый газ CO_2

Метан CH_4
Клатраты метана $[\text{H}_2\text{O} + \text{CH}_4]$

Углеводороды $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$

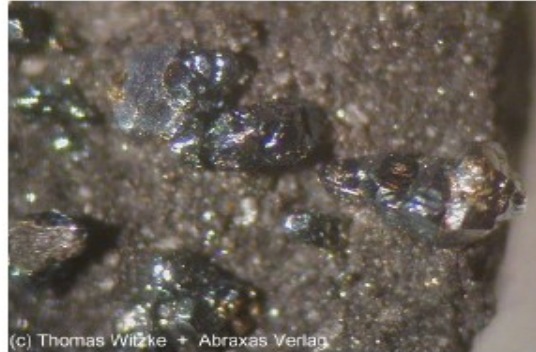
Органические вещества C-H-
O-N



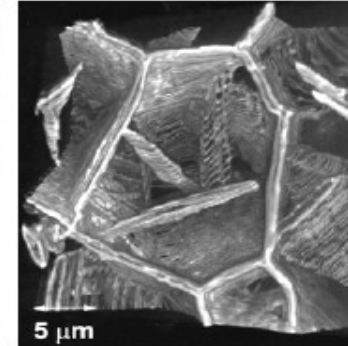
Known carbon species



Diamond (C)



Cementite (Fe_3C)



MgCO_3 or CaCO_3 ... or CO_2

Обнажение известняка в речной долине

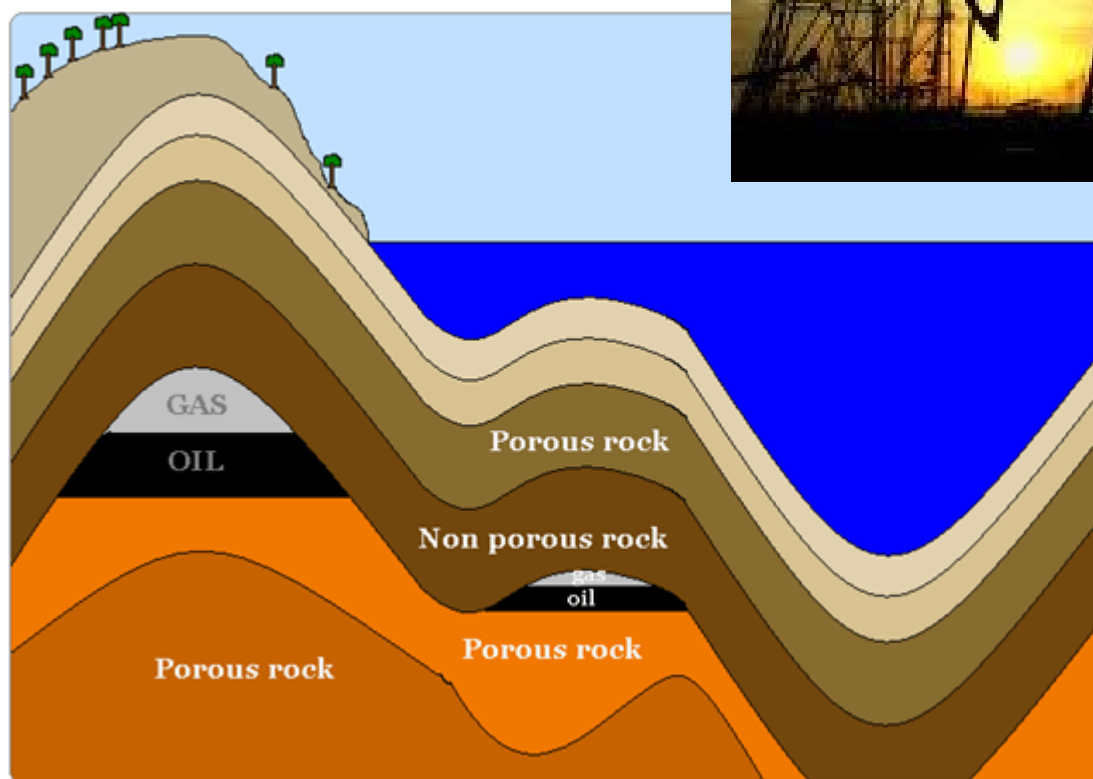


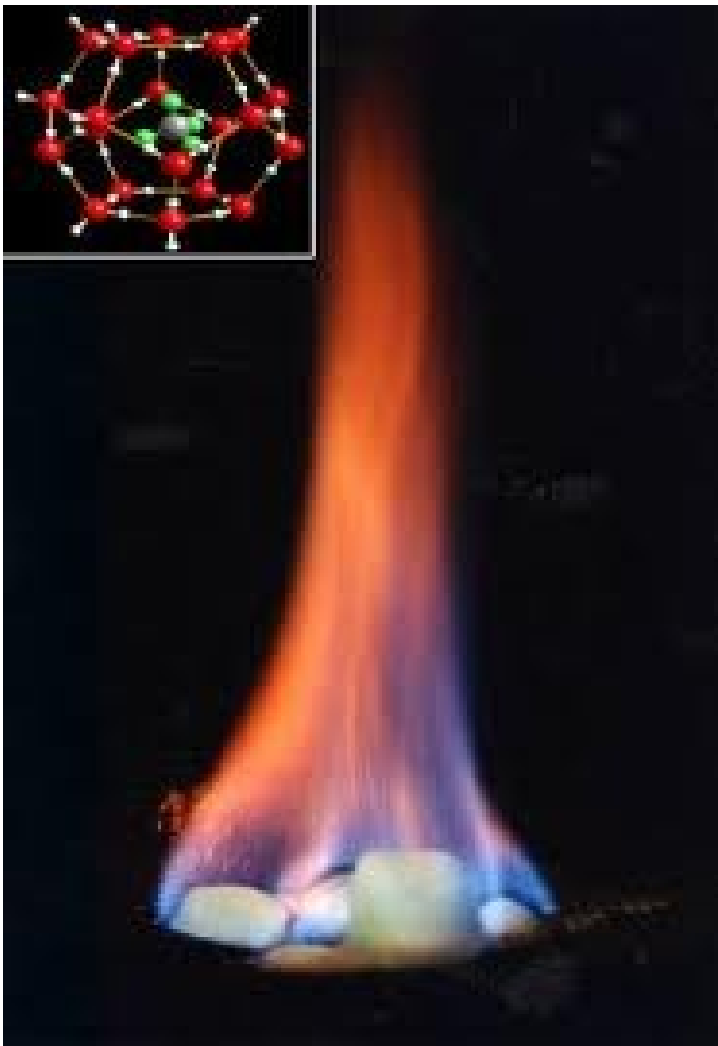
Известняковый карьер

Угольный карьер



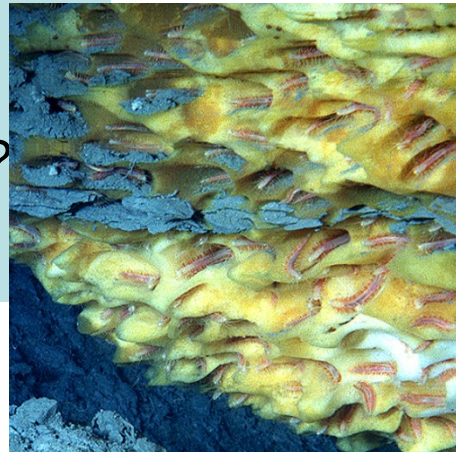
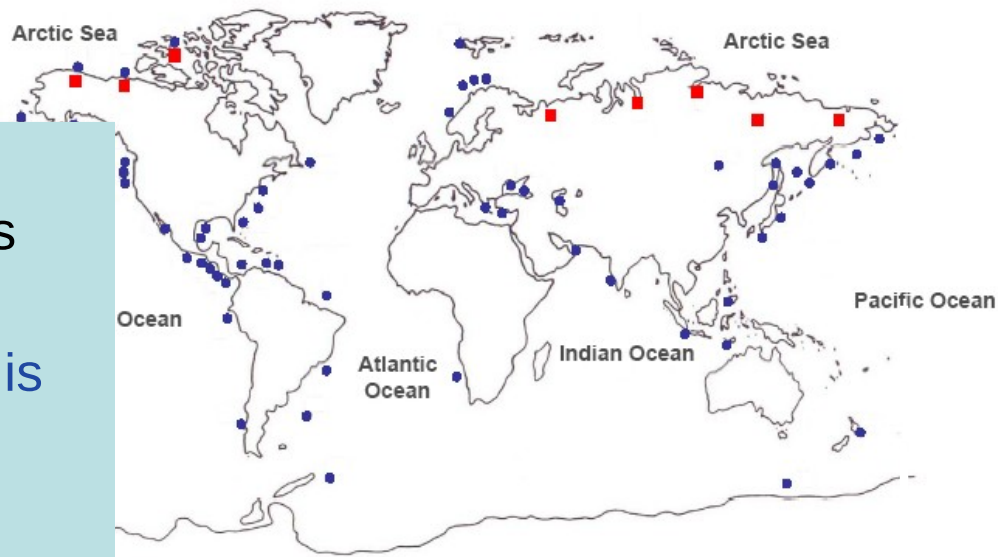
Нефтяное месторождение





Клатраты метана

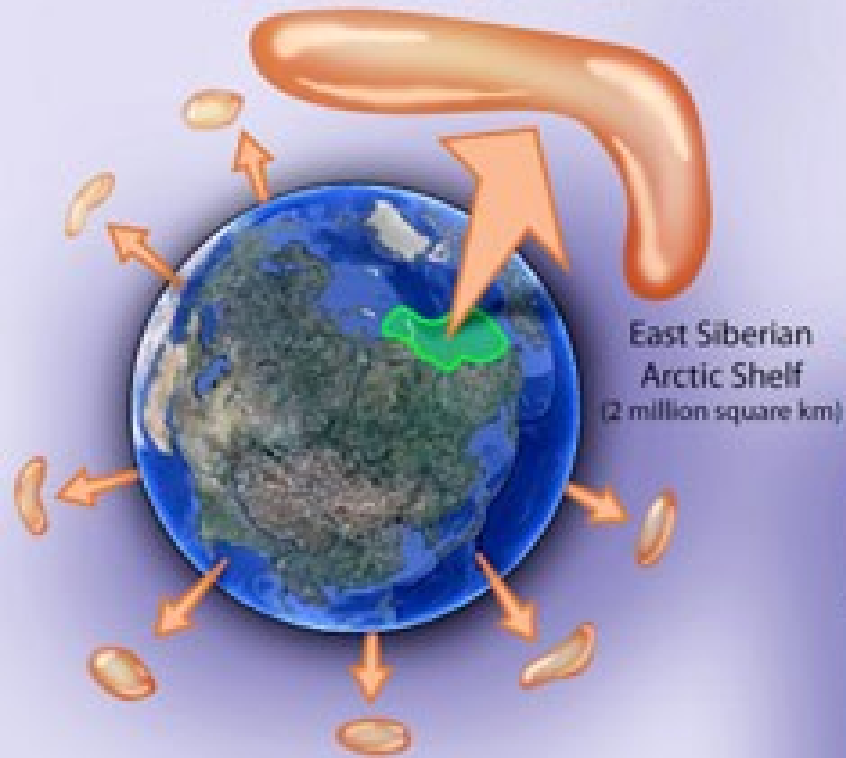
- Clathrates represent major flow assurance problem in natural gas and oil pipelines
- Methane clathrate in sl structure is the most abundant form of hydrocarbon on Earth (> 60%)
- Found in terrestrial marine sediments and permafrost
- Source of global climate change?
- Potential energy resource?



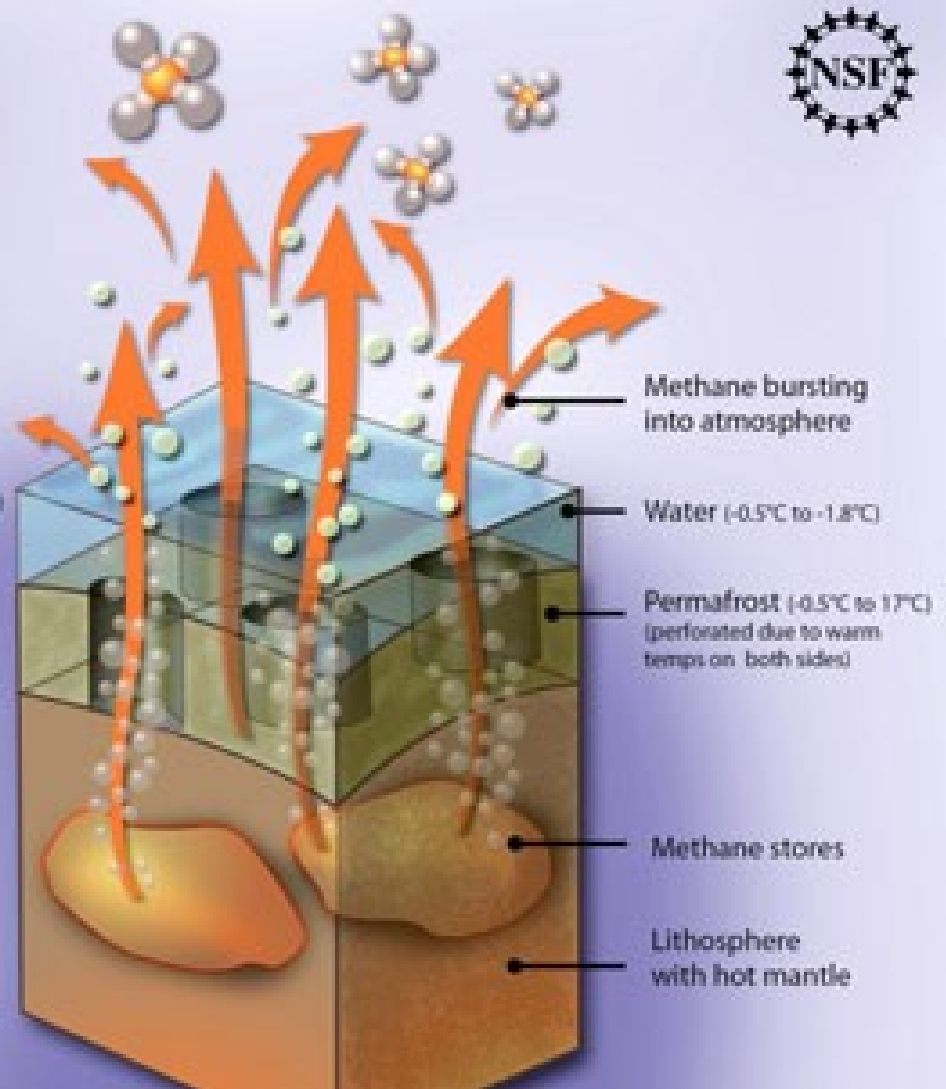
Methane ice worm



Similar amount of methane generated here as from the rest of the World Ocean



East Siberian Arctic Shelf
(2 million square km)



Methane bursting into atmosphere

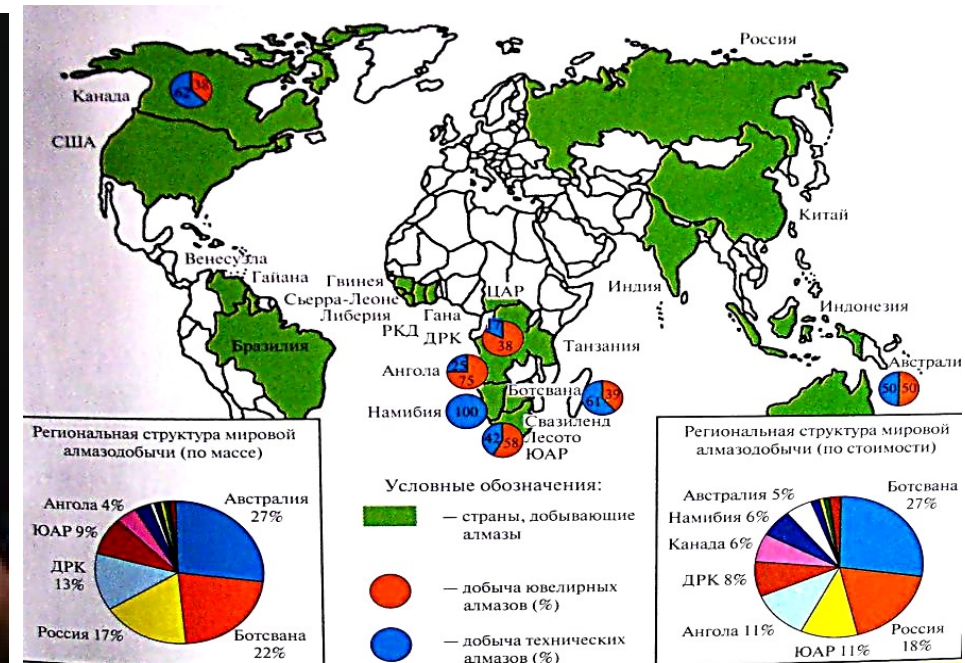
Water (-0.5°C to -1.8°C)

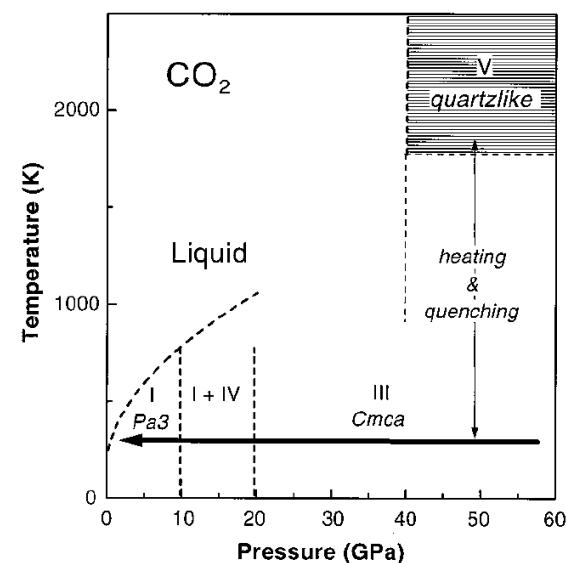
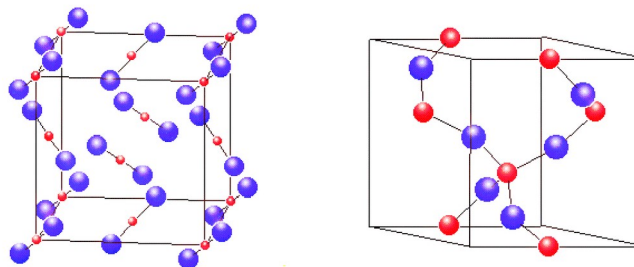
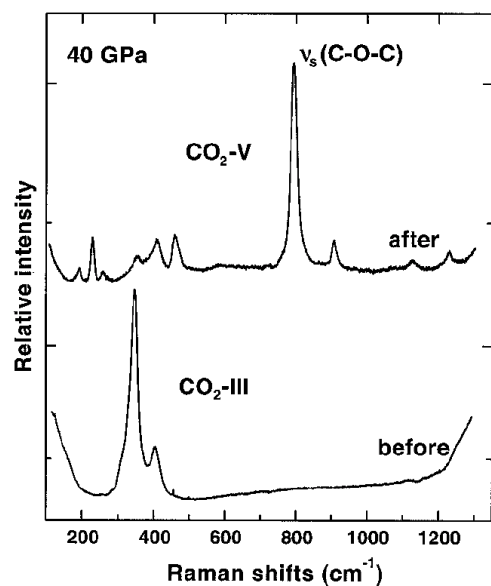
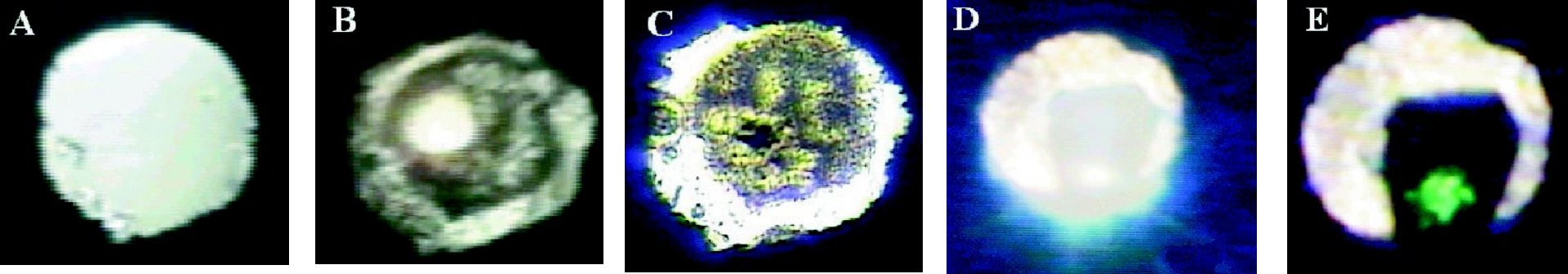
Permafrost (-0.5°C to 17°C)
(perforated due to warm temps on both sides)

Methane stores

Lithosphere with hot mantle

Месторождения алмазов

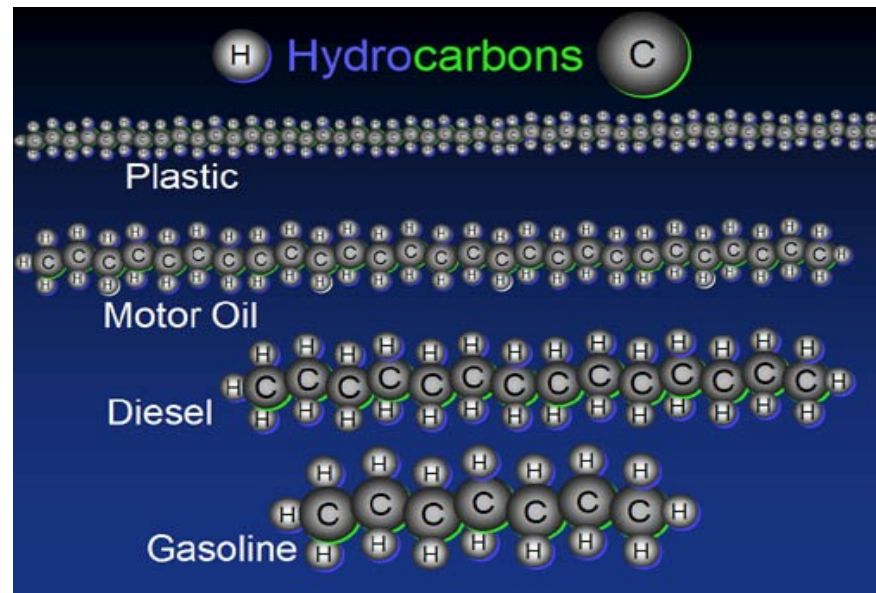




Углерод в силикатах?

Quartz-like CO₂ (Iota, Yoo, Cynn, 1999)

Материалы на основе углерода



Гибридизация электронных состояний углерода

IVA	
12.011	6
A2 hex	2,±4
4492 ^{TP}	C
3825 ^{SP}	
2.25	
2.55	
[He]2s ² p ²	
Carbon	

sp^3 - алмаз, с(гексагональный алмаз).

sp^2 - графит, графен, фуллерены нанотрубки.

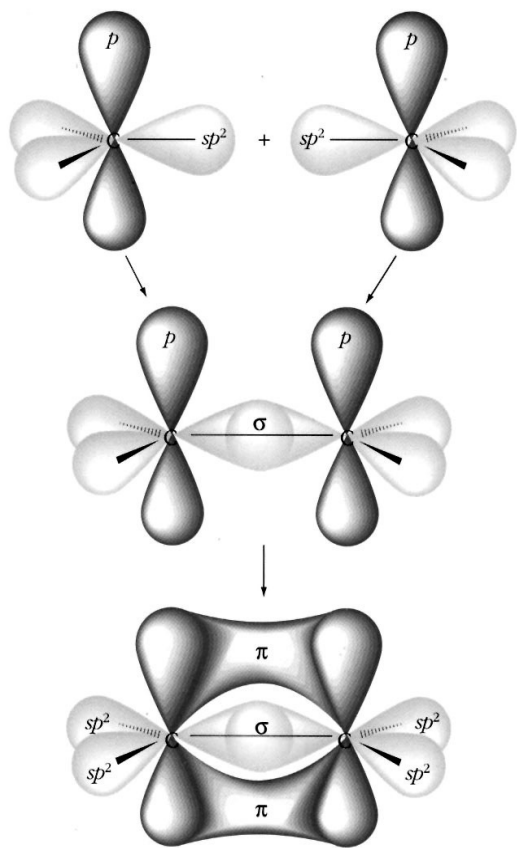
sp - линейные структуры (карбины).

sp^3/sp^2 полимеризованные фуллерены, аморфный углерод.

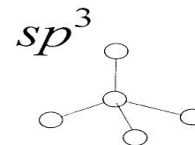
Уникальное положение в таблице: середина первого заполненного периода

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА																		VIII		№					
Период п д г	Символ	Название	Оболочки				Ряд	I		II		III		IV		V		VI			VII				
			s	p	d	f		a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b				
1	2		K	1	s ²			1	ВОДОРОД 1,00797	2											2	Гелий 4,0026	3, 4		
2	8		L	2	s ²	p ⁶		2	ЛИТИЙ 6,939	3	БЕРИЛЛИЙ 9,0122	4	БОР 10,81	5	УГЛЕРОД 12,01115	6	АЗОТ 14,0067	7	КИСЛОРОД 15,9994	8	ФТОР 18,9984	9	НЕОН 20,183	10-22	
3	8		M	3	s ²	p ⁶		3	НАТРИЙ 22,98976	11	МАГНИЙ 24,312	12	АЛЮМИНИЙ 26,981538	13	СИЛИЦИЙ 28,0855	14	ФOSFOP 30,973762	15	СЕРА 32,06	16	ХЛОР 35,453	17	АРГОН 39,948	36	
4	18		N	4	s ²	p ⁶	d ¹⁰	4	КАЛИЙ 39,102	19	КАЛЬЦИЙ 40,08	20	СКАНДИЙ 44,955912	21	ТИТАН 47,88	22	ВАНАДИЙ 50,9415	23	ХРОМ 51,9961	24	МАРГАНЕЦ 54,938044	25	ЖЕЛЕЗО 55,845	26-36	
5	18		O	5	s ²	p ⁶	d ¹⁰	5	РУБИДИЙ 85,47	37	СТРОНЦИЙ 87,62	38	ЙОД	126,90547	39	ТЕЛУРИЙ 127,6	40	ВОЛЬФРАМ 183,84	41	ТАНТАЛ 180,94788	42	ТАНТАЛ 180,94788	43	ТАНТАЛ 180,94788	76
6	32		P	6	s ²	p ⁶	d ¹⁰	6	ЦЕЗИЙ 132,905	55	БАРИЙ 137,34	56	ЛАНТАНОИДЫ	57-71	72	ГАДОЛИНИЙ 157,25	73	ТЕРБИЙ 158,92534	74	ДИСПРОСИЙ 162,5001	75	ГЕОЛИЙ 162,5001	76	ГЕОЛИЙ 162,5001	77
7	32		Q	7	s ²	p ⁶	d ¹⁰	7	ФРАНЦИЙ 223,0219	87	РАДИЙ 226,0254	88	АКТИНИИДЫ	89-103	104	ЭКАТАНТАЛ 261,101	105	ЭКАТАНТАЛ 261,101	106	ЭКАТАНТАЛ 261,101	107	ЭКАТАНТАЛ 261,101	108	ЭКАТАНТАЛ 261,101	109
8	50		R	8	s ²	p ⁶	d ¹⁰	8	ЭКАЦЕЗИЙ 287,10	113	ЭКАБАРИЙ 287,10	114	ЭКАЛАНТАНОИДЫ	115-118	119	ЭКАТАНТАЛ 287,10	120	ЭКАТАНТАЛ 287,10	121	ЭКАТАНТАЛ 287,10	122	ЭКАТАНТАЛ 287,10	123	ЭКАТАНТАЛ 287,10	124
9	118		S	9	s ²	p ⁶	d ¹⁰	9	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
10	118		T	10	s ²	p ⁶	d ¹⁰	10	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
11	118		U	11	s ²	p ⁶	d ¹⁰	11	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
12	118		V	12	s ²	p ⁶	d ¹⁰	12	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
13	118		W	13	s ²	p ⁶	d ¹⁰	13	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
14	118		X	14	s ²	p ⁶	d ¹⁰	14	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
15	118		Y	15	s ²	p ⁶	d ¹⁰	15	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
16	118		Z	16	s ²	p ⁶	d ¹⁰	16	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
17	118		AA	17	s ²	p ⁶	d ¹⁰	17	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
18	118		BB	18	s ²	p ⁶	d ¹⁰	18	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
19	118		CC	19	s ²	p ⁶	d ¹⁰	19	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
20	118		DD	20	s ²	p ⁶	d ¹⁰	20	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
21	118		EE	21	s ²	p ⁶	d ¹⁰	21	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
22	118		FF	22	s ²	p ⁶	d ¹⁰	22	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
23	118		GG	23	s ²	p ⁶	d ¹⁰	23	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
24	118		HH	24	s ²	p ⁶	d ¹⁰	24	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
25	118		II	25	s ²	p ⁶	d ¹⁰	25	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
26	118		JJ	26	s ²	p ⁶	d ¹⁰	26	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
27	118		KK	27	s ²	p ⁶	d ¹⁰	27	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
28	118		LL	28	s ²	p ⁶	d ¹⁰	28	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
29	118		MM	29	s ²	p ⁶	d ¹⁰	29	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
30	118		NN	30	s ²	p ⁶	d ¹⁰	30	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
31	118		OO	31	s ²	p ⁶	d ¹⁰	31	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
32	118		PP	32	s ²	p ⁶	d ¹⁰	32	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
33	118		QQ	33	s ²	p ⁶	d ¹⁰	33	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
34	118		RR	34	s ²	p ⁶	d ¹⁰	34	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
35	118		SS	35	s ²	p ⁶	d ¹⁰	35	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
36	118		TT	36	s ²	p ⁶	d ¹⁰	36	ЭКАФРАНЦИЙ 382,9394	125	ЭКАРАДИЙ 382,9394	126	ЭКААКТИНИИДЫ	127-130	131	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	132	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	133	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	134	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	135	ЭКАТАНТАЛ 382,9394	136
37	118																								

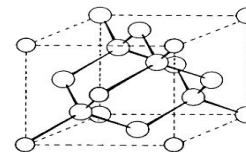
Рекордная атомная плотность, возможность различной гибридизации



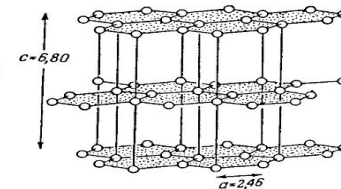
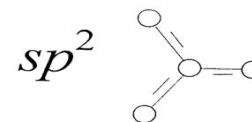
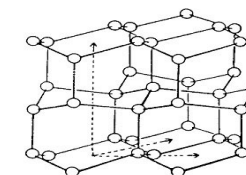
Благодаря уникальному положению в таблице Менделеева углерод способен формировать огромное число структур. Соединения углерода с водородом и другими легкими элементами – органические вещества. Известно уже свыше 30 миллионов органических веществ, т.е. производных углеводородов и «всего» 300 тысяч неорганических соединений



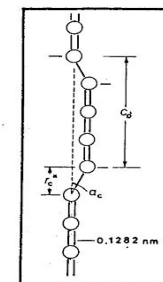
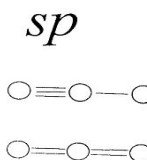
cubic diamond



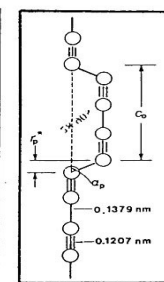
hexagonal diamond



graphite

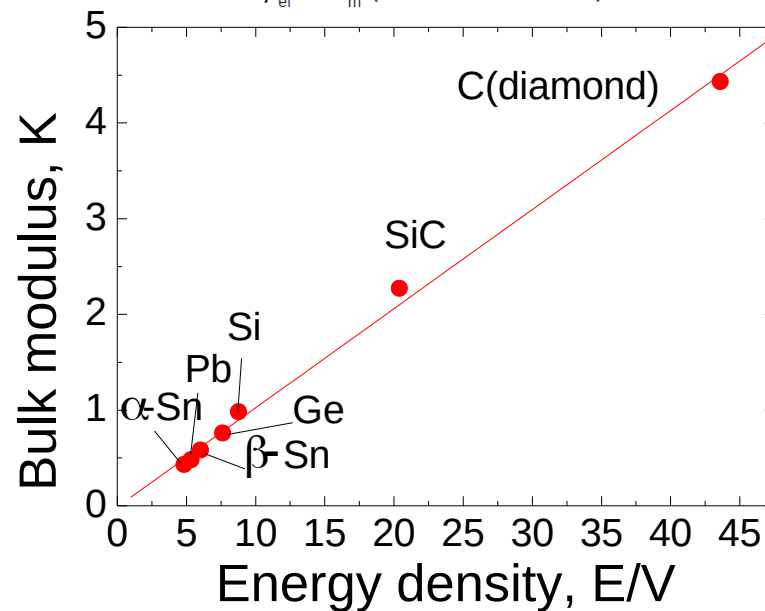
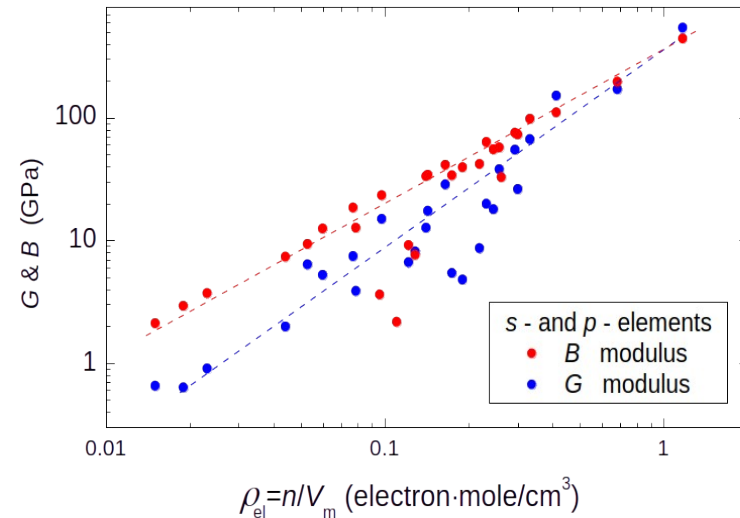
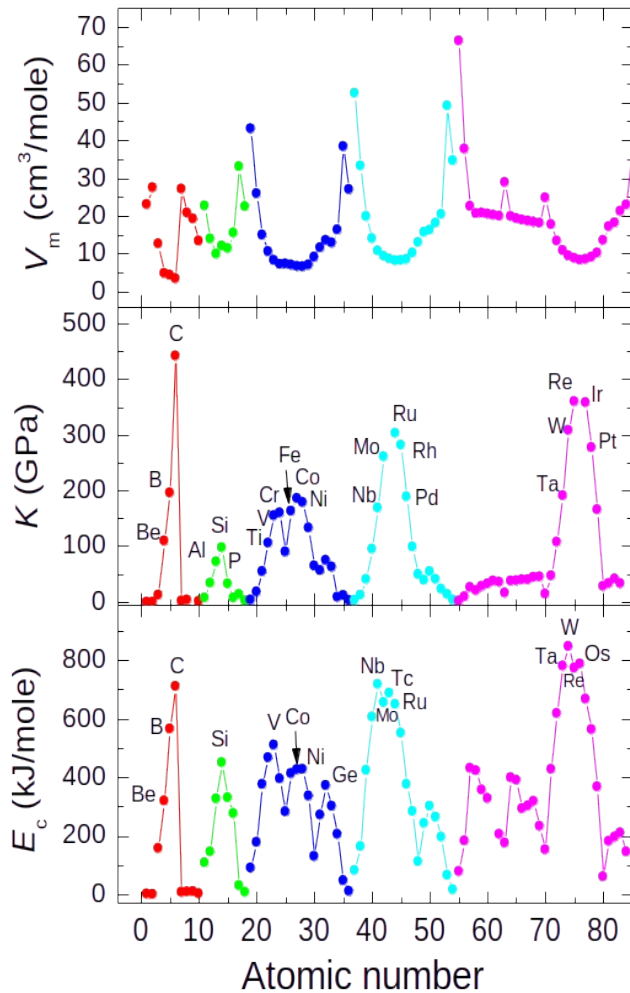


cumulene carbyne

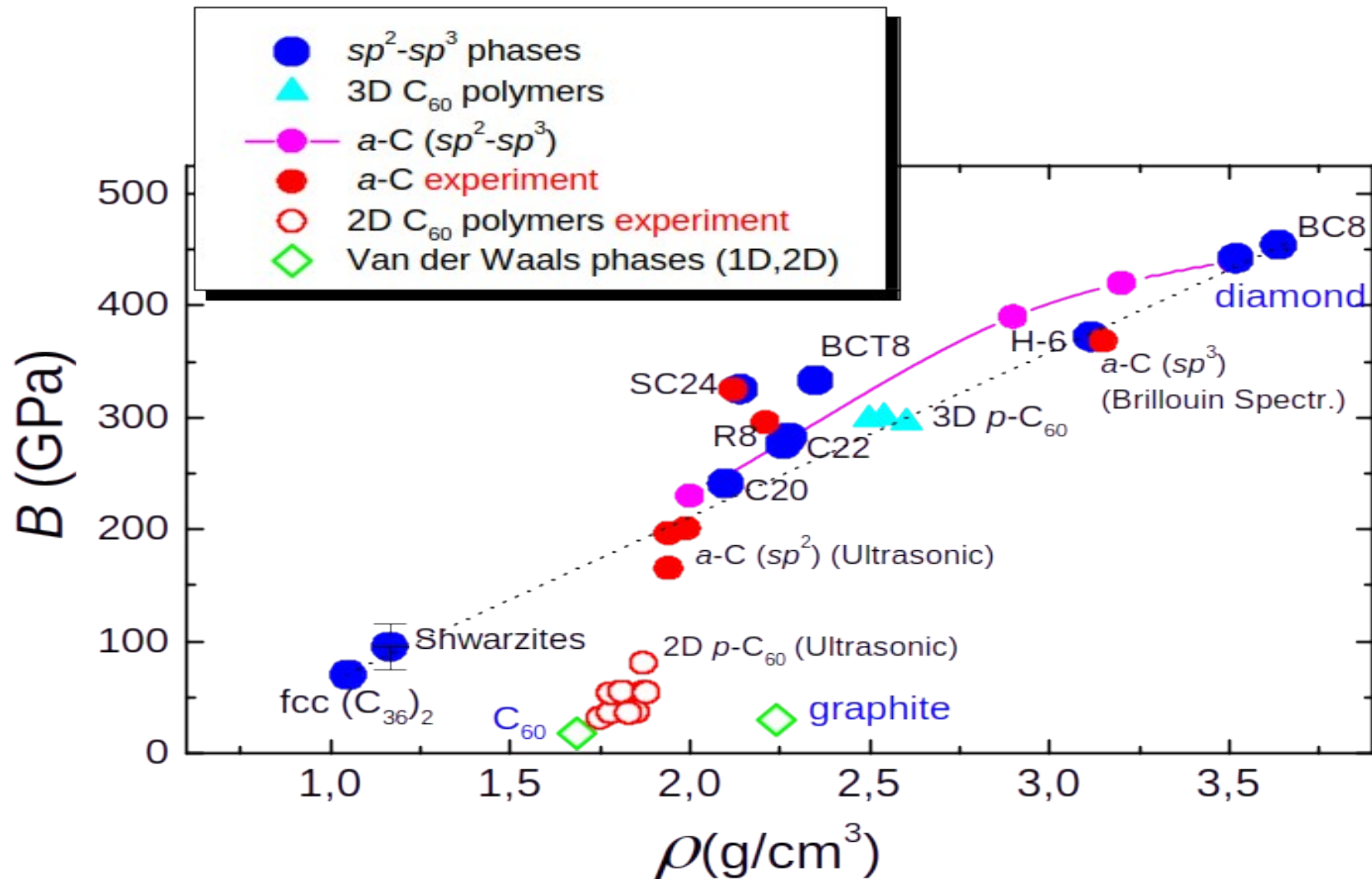


polyynes carbyne

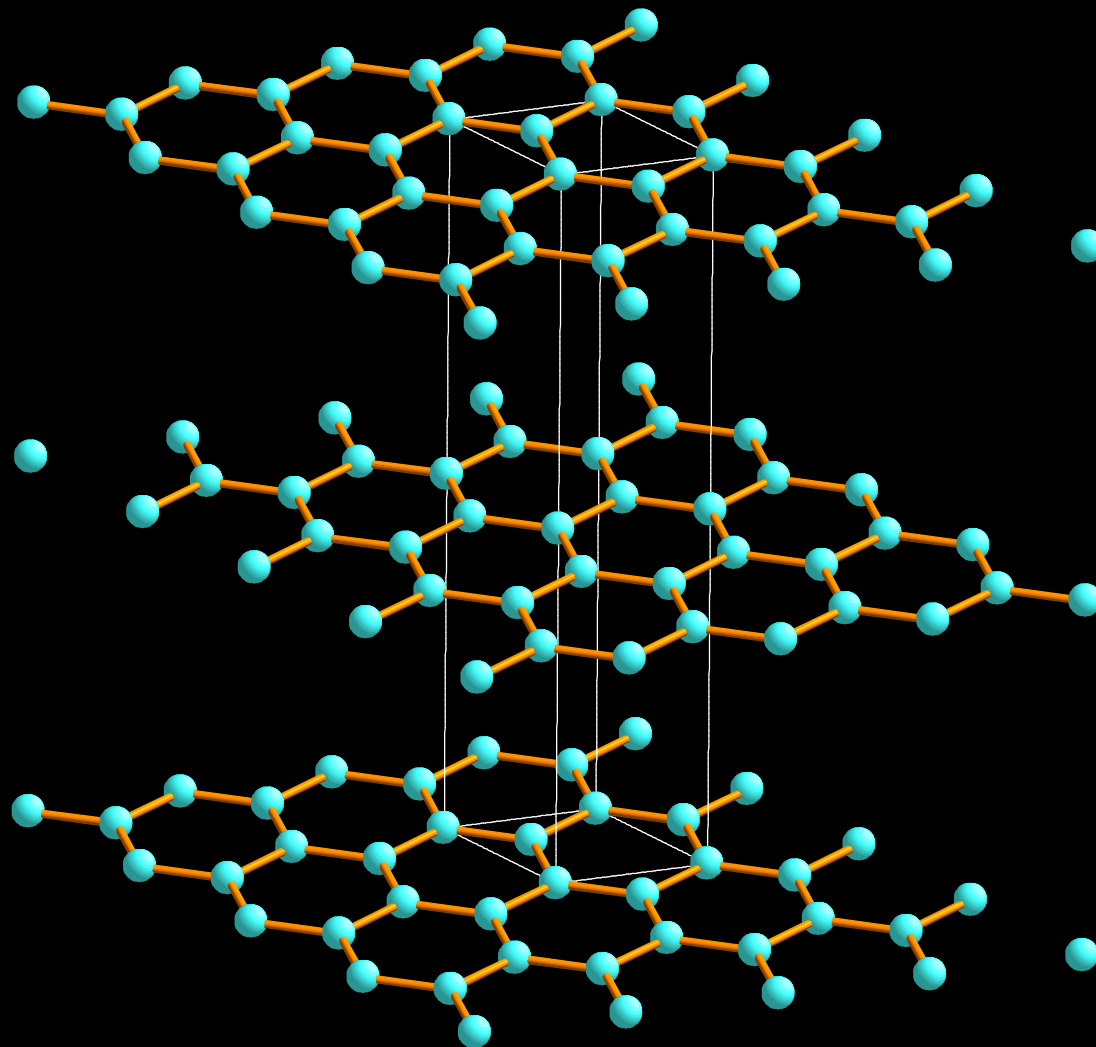
Рекордная плотность энергии в углеродных материалах



Модуль сжатия и плотность углеродных материалов

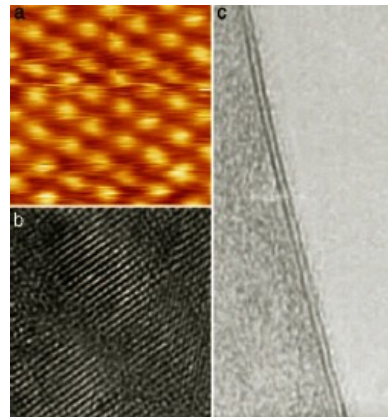
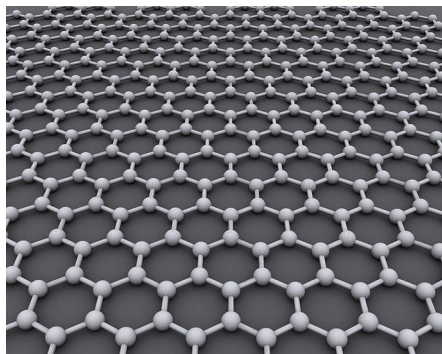
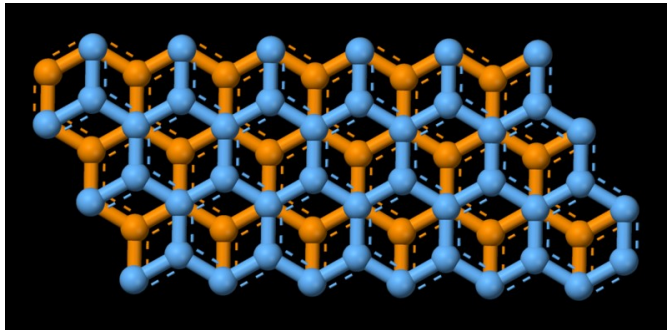
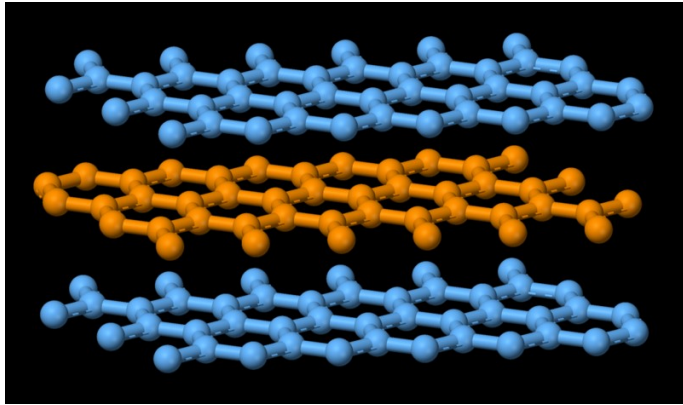


Графит- плотность 2.2 г/см³, полуметалл,
твердость 0.15ГПа



Двухмерные ковалентные структуры углерода

Графит - Графен

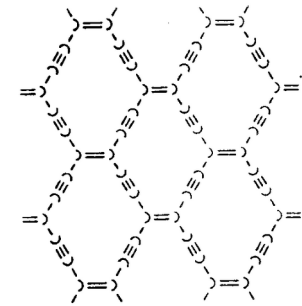
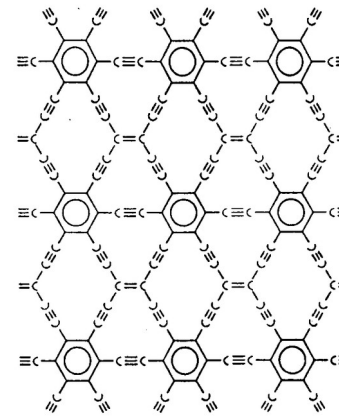


Гипотетические фазы

Graphynes

R.H. Baughman, H. Eckhardt, and M. Kertesz. *J. Chem. Phys.* **87**, 6687

(1987). Structure-property predictions for new planar forms of carbon: Layered phases containing sp^2 and sp atoms

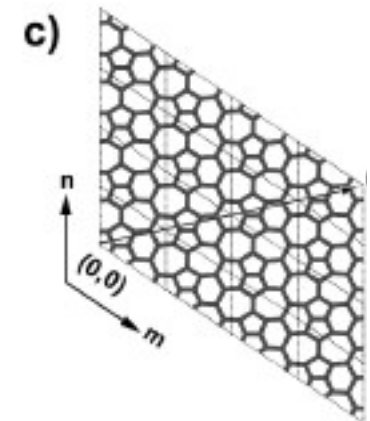
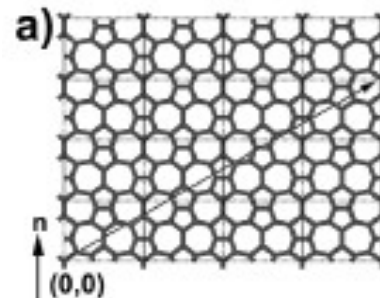


VOLUME 84, NUMBER 8

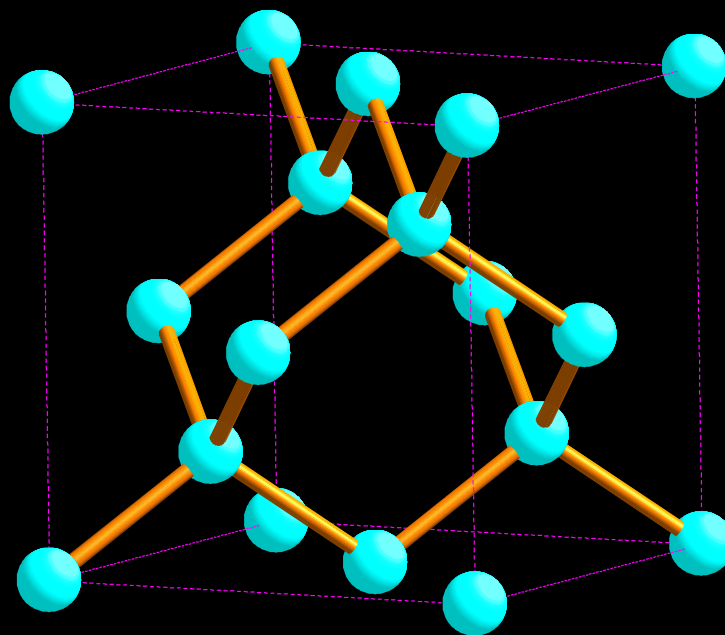
PHYSICAL REVIEW LETTERS

21 FEBRUARY 2000

New Metallic Allotropes of Planar and Tubular Carbon

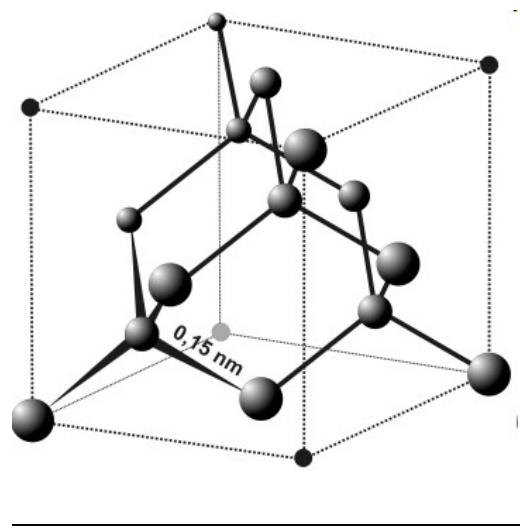


Алмаз – плотность 3.5 г/см³, диэлектрик
(щель 5.5 эВ), твердость 100 ГПа



Трёхмерные ковалентные структуры углерода

Алмаз



PHYSICAL REVIEW B

VOLUME 57, NUMBER 10

1 MARCH 1998-II

Possible high-pressure phase of diamond

S. Serra,* G. Benedek, M. Facchinetti, and L. Miglio

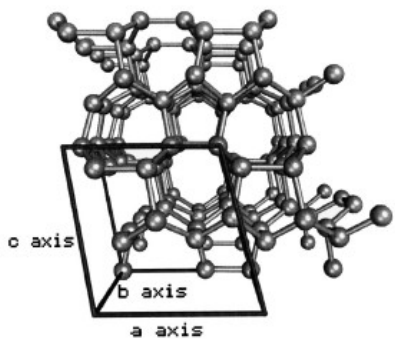
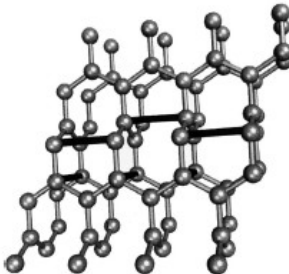


FIG. 1. Left panel: bct-4 crystal structure with the additional bonds (in black) considered in the rebonding procedure. Right panel: resulting crystal structure of tcl-16.

Гипотетические sp^3 фазы

PHYSICAL REVIEW B

VOLUME 62, NUMBER 23

15 DECEMBER 2000-I

Solid C_{36} as hexaclathrate form of carbon

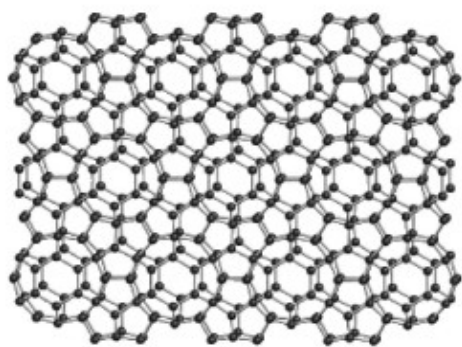


FIG. 2. Relaxed C_{36} hexaclathrate structure with sp^3 bonding for all atoms obtained using the GTBMD scheme. The structure containing a pair of C atoms in each "hole" between C_{36} cages has perfect D_{6h} symmetry and is the most stable of all clathrates considered in this work. For clarity of illustration only one layer is shown.

PHYSICAL REVIEW B

VOLUME 52, NUMBER 21

1 DECEMBER 1995-I

Theoretical stability limit of diamond at ultrahigh pressure

S. J. Clark, G. J. Ackland, and J. Crain

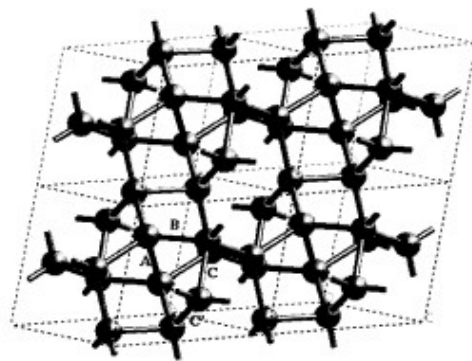


FIG. 2. Illustration of the R8 structure of carbon. The crystallo-

Гибридные гипотетические sp^2 – sp^3 структуры

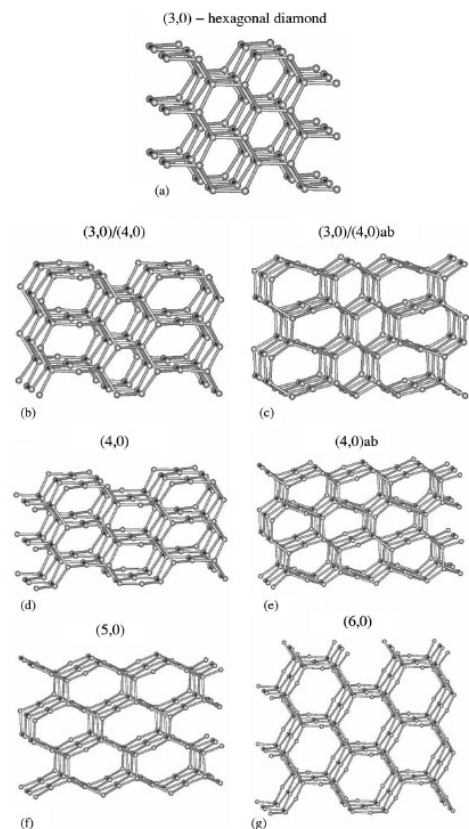


FIG. 2. The honeycomb structures: (a) all sp^3 (3,0) honeycomb structure (hexagonal-diamond), (b) mixed (3,0) and (4,0) structure, (c) mixed (3,0) and (4,0)ab structure, (d) (4,0) structure, (e) AB-stacked (4,0)ab structure, (f) (5,0) structure, and (g) (6,0) hexagonal structure. All except (6,0) can be obtained from buckling orthorhombic-graphite.

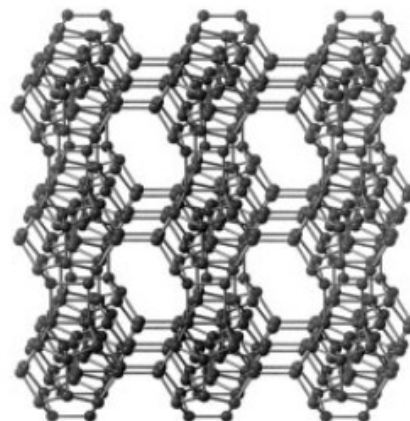


Рис. 2. Гипотетическая структура кристалла $[C_{36}]_n$ (1).

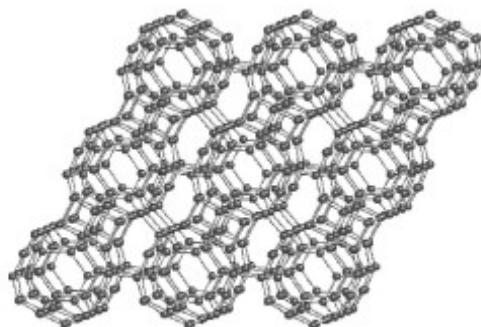


FIG. 2. The most stable polymeric C_{36} solid (Poly1) obtained using the GTBMD relaxation.

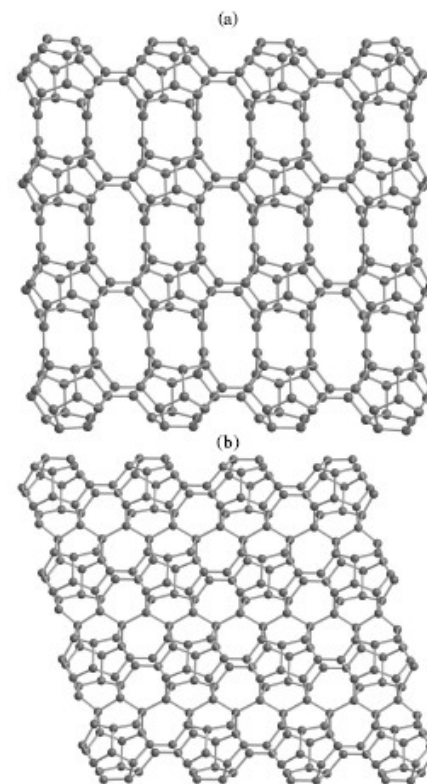


Рис.1. Двумерные структуры $(C_{20})_{4 \times 4}$ с межкастерными связями $open-[2+2]$, конфигурация А (а), и с комбинацией $open-[2+2]$ и "сдвинутых" межкастерных связей, конфигурация В (б). Энергия связи фуллеренов $\Delta E = 6.11 \text{ эВ}/C_{20}$ (а) и $\Delta E = 7.08 \text{ эВ}/C_{20}$ (б)

Трехмерные ковалентные структуры углерода

Гипотетические sp^2 фазы

G. Jungnickel, et al., *Phys. Rev. B* **57**, R661 (1998)

VOLUME 68, NUMBER 15

PHYSICAL REVIEW LETTERS

13 APRIL 1992

Predicted New Low Energy Forms of Carbon

Michael O'Keeffe,⁽¹⁾ Gary B. Adams,⁽²⁾ and Otto F. Sankey⁽²⁾

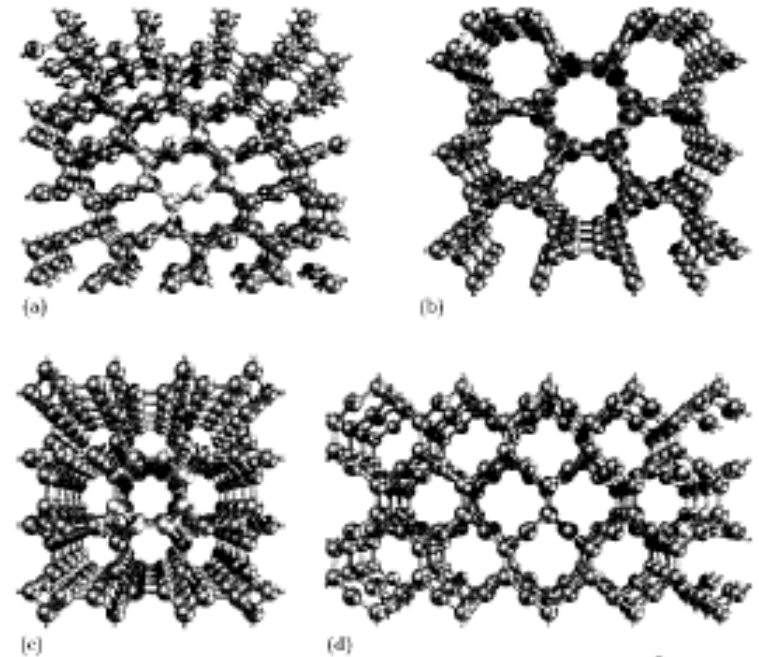
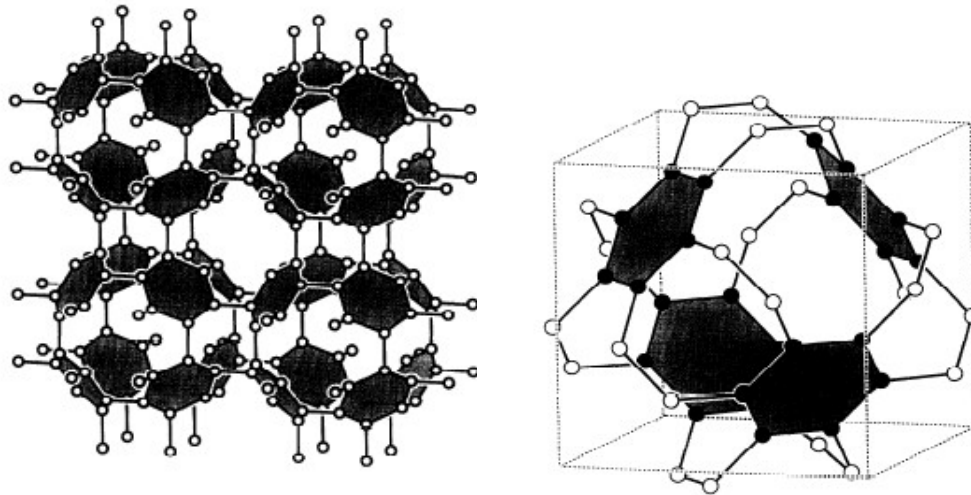


FIG. 1. Perspective views of the relaxed purely sp^2 bonded structures R6 (a,b) and BCT8 (c,d) showing the 8-membered rings (a,c), the channels (b,d), and the three-dimensional network character.

Трёхмерные ковалентные структуры углерода

Гипотетические sp^2 фазы на основе графеновых поверхностей с отрицательной кривизной

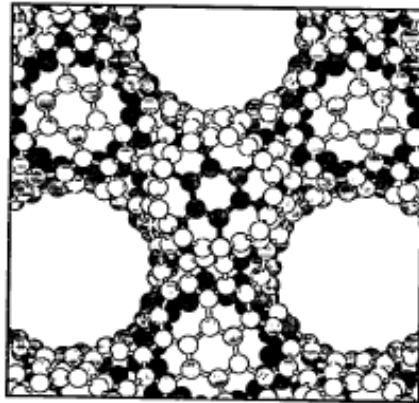
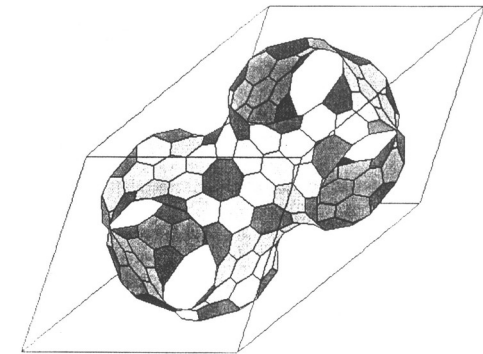
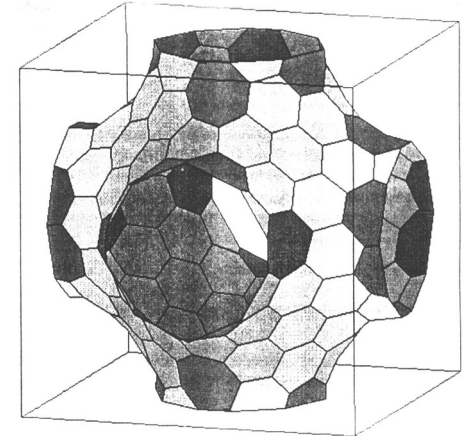
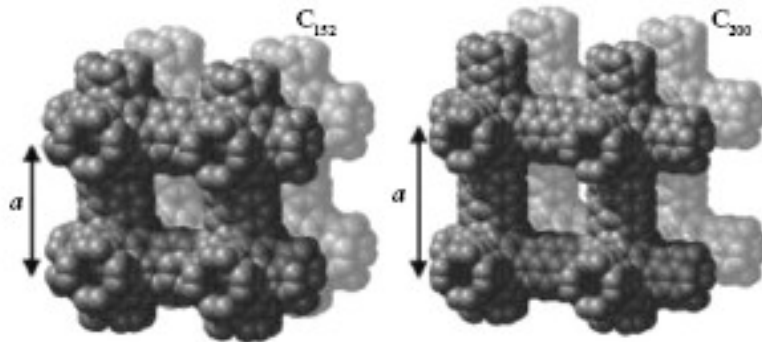
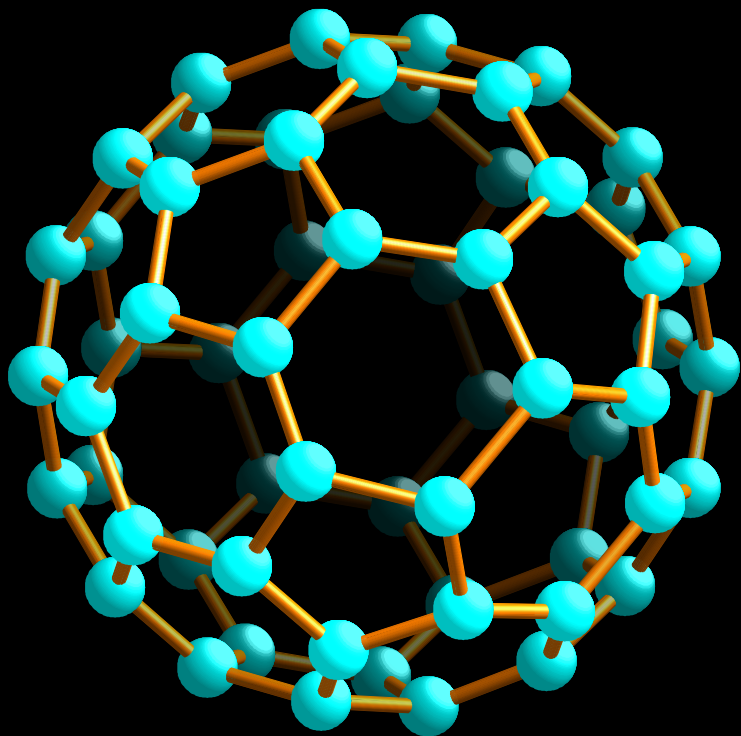


FIG. 1. One double-layer cut from the C_{168} structure, as seen from the (111) direction. Atoms are shaded according to distance from viewer. The view cuts through a plane of bonds of the diamond structure. Tubes protruding toward viewer would be connected to the next double layer in the full structure.

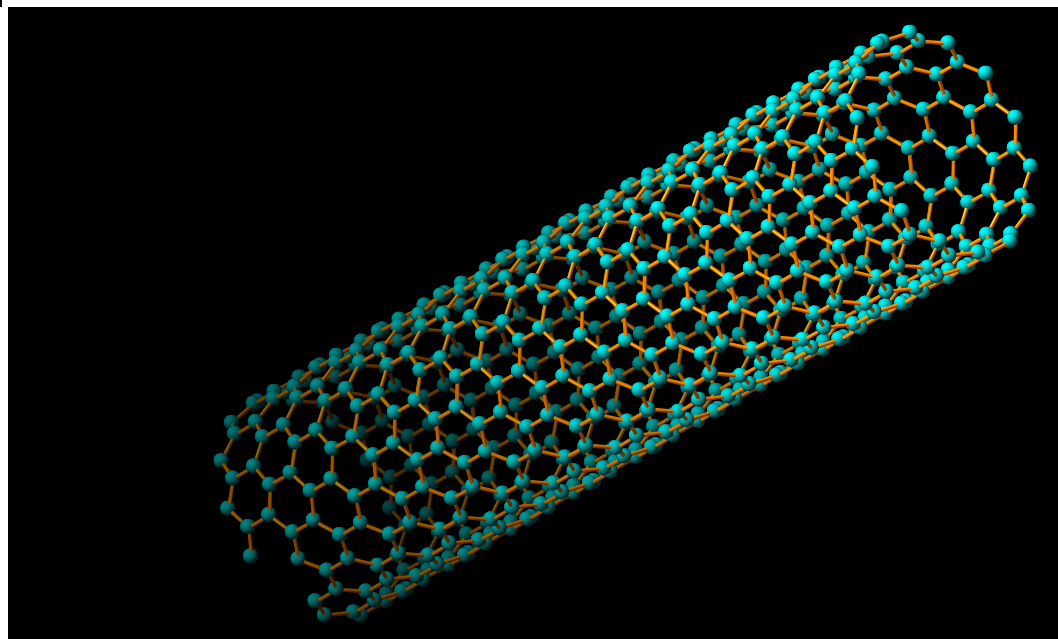




Фуллерит - C₆₀

Robert Floyd Curl, Jr (August 23, 1933) was awarded the Nobel Prize in Chemistry in 1996 for the discovery of fullerene. He shared the Prize with late Richard Smalley of Rice University and Harold Kroto (University of Sussex, UK).

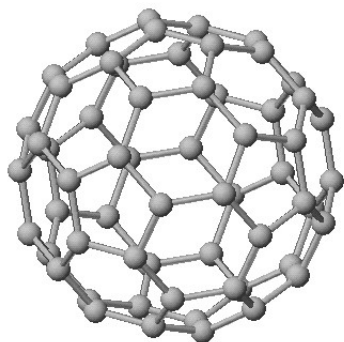
Нанотрубка



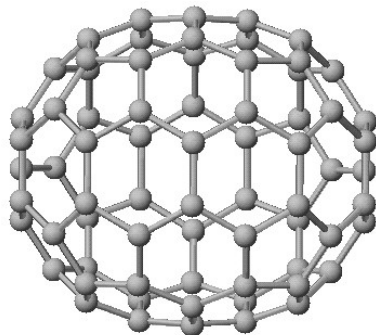
Симметрия футбольного мяча – усеченный икосаэдр,
20 шестиугольников, 12 пятиугольников



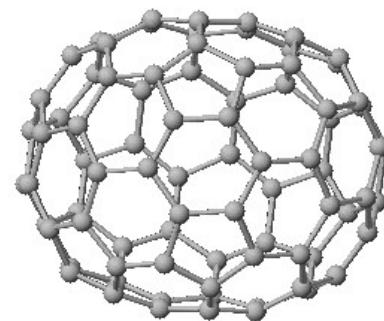
Нанокластерные и молекулярные формы углерода



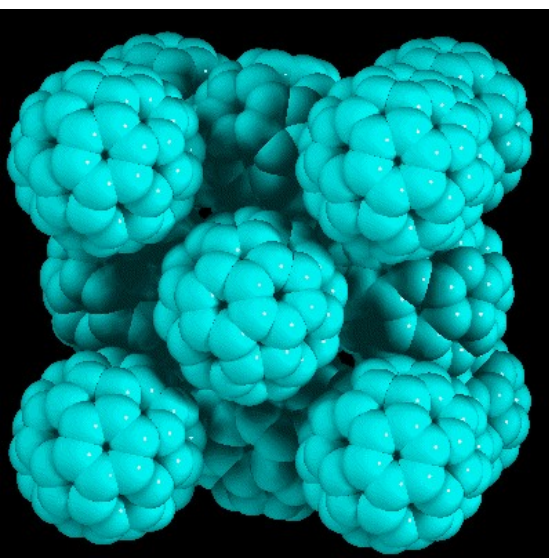
C_{60}



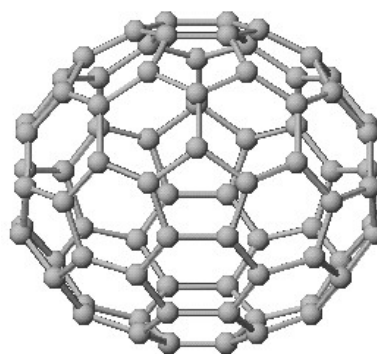
C_{70}



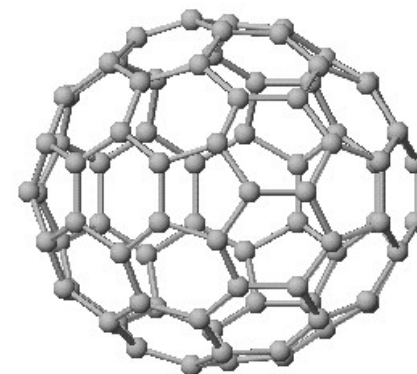
C_{82}



Фуллерит C_{60} ,
плотность 1.7
г/см³,
полупроводник
(щель 1.5 эВ),
твёрдость 0.1
ГПа



C_{78}



C_{84}

Углеродные кластеры

Наноалмазы (детонационные, космические и др.)

Икосаэдрические и алмазоподобные наночастицы

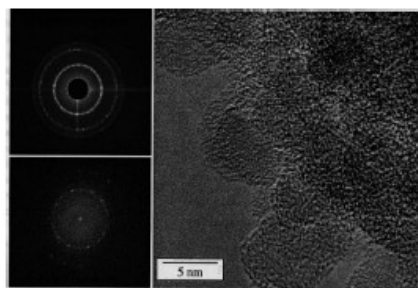


FIG. 1. Electron diffraction pattern (top left), power spectrum (bottom left), and HRTEM picture of the edge zone of a collection of nanodiamonds.

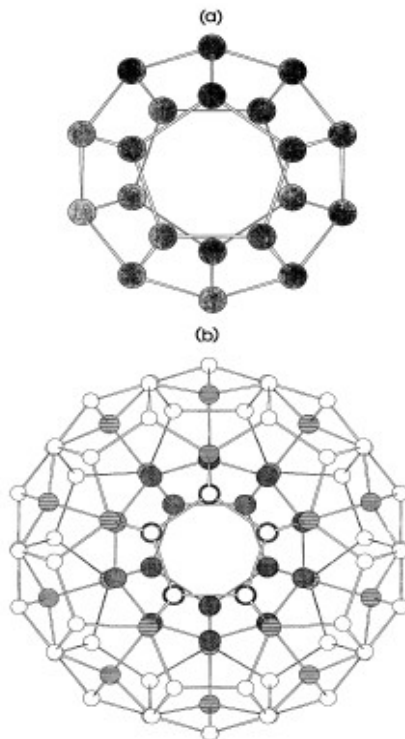
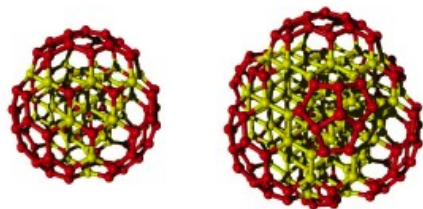


FIG. 1. Structure of (a) C_{20} , the core of the icosahedral tetrahedrally bonded structures, and (b) C_{100} , the smallest such structure with fourfold coordinated inner atoms. In (b) the dark circles are the 20 atoms of the core, the shaded ones are the atoms of the second fourfold shell, and the white ones are the 60 surface atoms.

VOLUME 70, NUMBER 19

PHYSICAL REVIEW LETTERS

10 MAY 1993

New Model for Icosahedral Carbon Clusters and the Structure of Collapsed Fullerite

Linda Zeger and Efthimos Kaxiras

VOLUME 90, NUMBER 3 PHYSICAL REVIEW LETTERS 24 JANUARY 2003

Quantum Confinement and Fullerene-like Surface Reconstructions in Nanodiamonds

Jean-Yves Raty,^{1,2} Giulia Galli,¹ C. Bostedt,¹ Tony W. van Buren,¹ and Louis J. Terminello¹

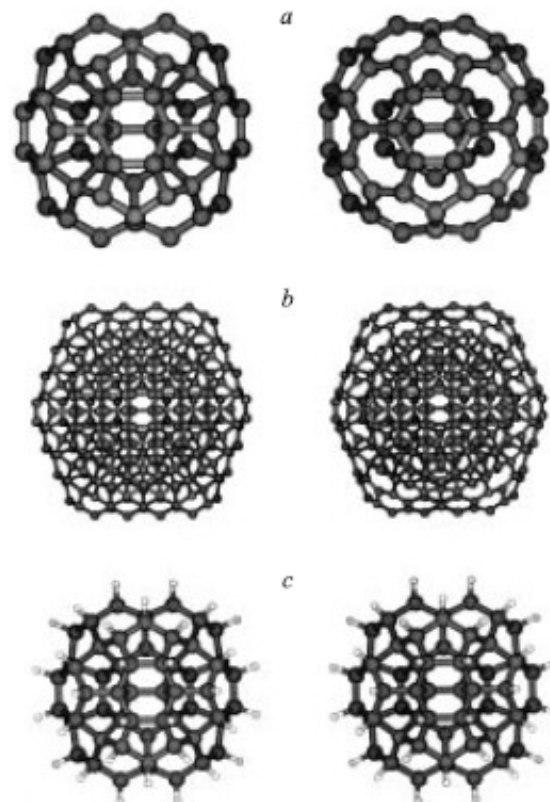


Рис. 2. Слева — стартовые модели икосаэдрических алмазоподобных наночастиц: a — C_{100} , b — C_{600} , c — $C_{100}H_{60}$, справа — их оптимизированные геометрии. DFTB-расчеты.

Физика твердого тела, 2007, том 49, вып. 2

Атомная структура, стабильность и электронное строение икосаэдрических наноалмазов и онионов

© А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский

Углеродные кластеры: нанообруч – минимальный сегмент нанотрубки

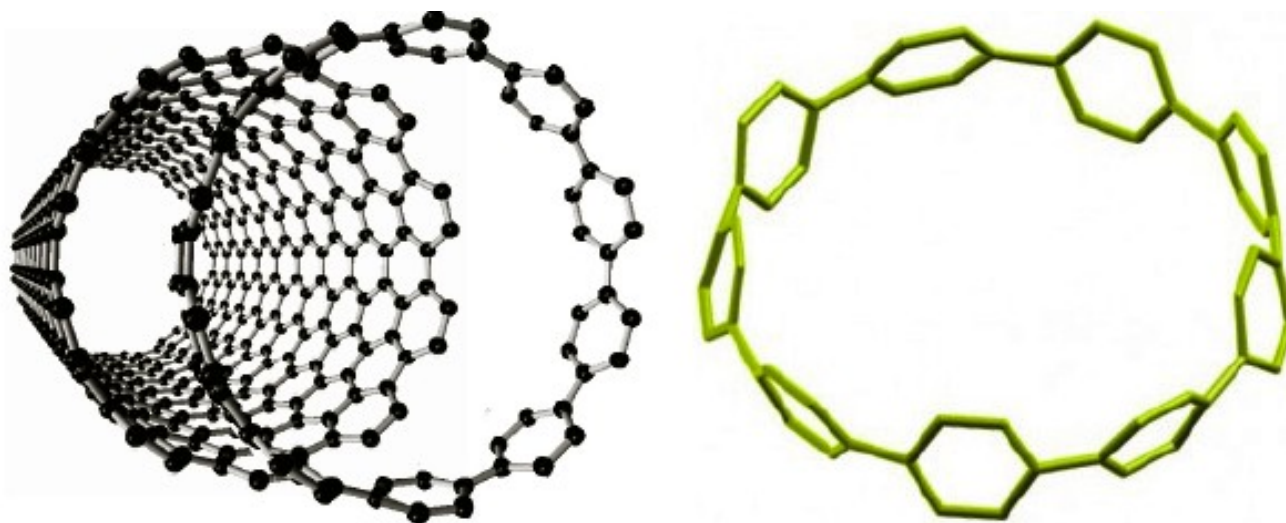


MATERIALS SCIENCES DIVISION & MOLECULAR FOUNDRY
RESEARCH HIGHLIGHT 09-1

Carbon Nanohoos

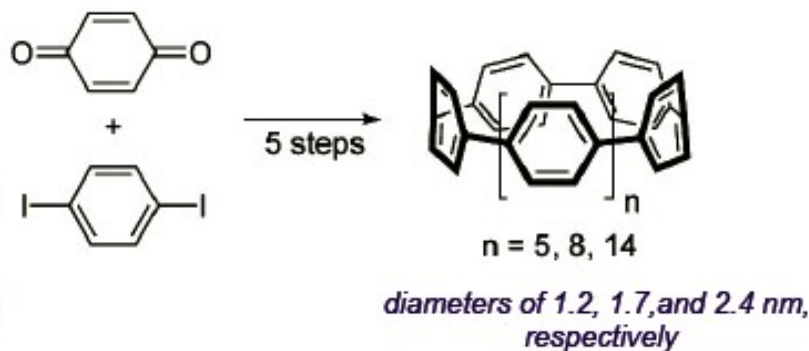
Shortest Segment of a Carbon Nanotube Synthesized

C. Bertozzi, Director, Molecular Foundry (510)643-1682, Materials Sciences Division (510 486-4755), Berkeley Lab.

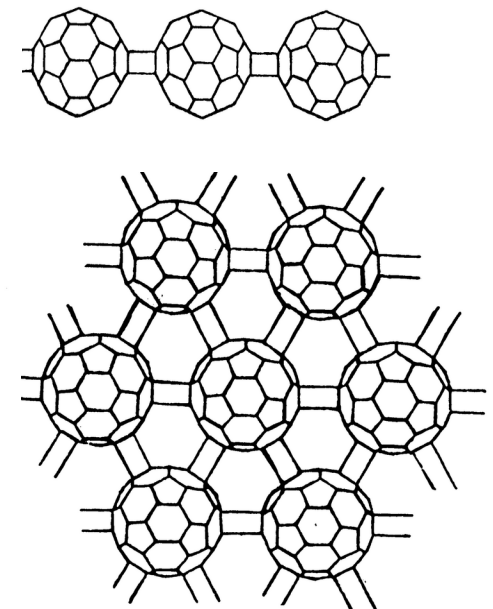
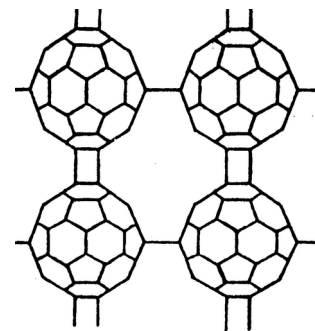
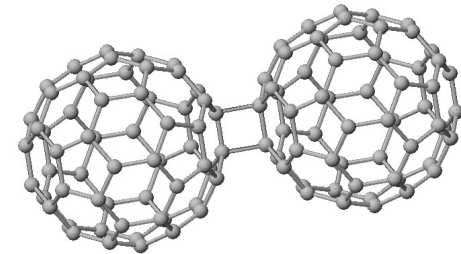
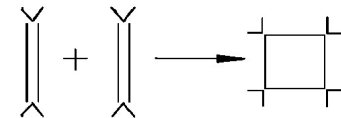
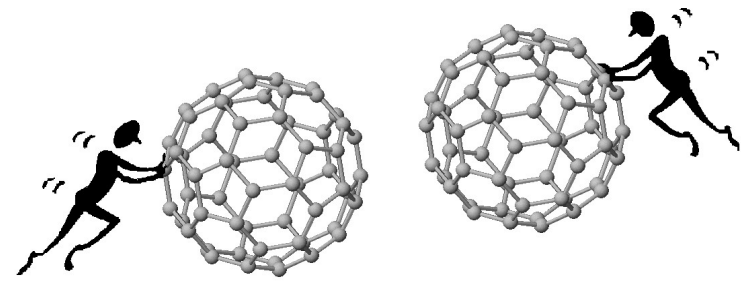
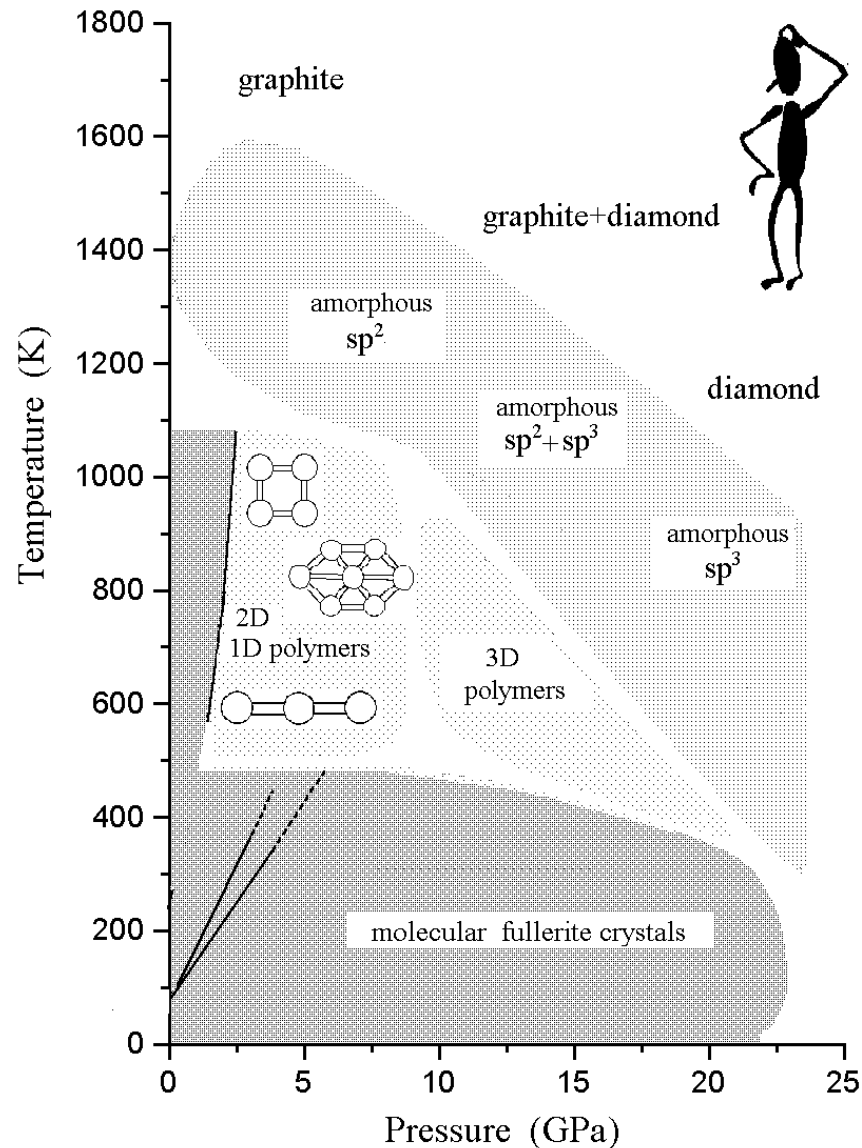


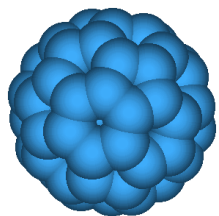
An example of the shortest possible carbon nanotube: a "nanohoop" of benzene rings. Figure shows such molecules, called cycloparaphenylenes; one with 9 such rings (above right), and one with 11 rings (above left).

Synthesis of cycloparaphenylene requires the bending of a string of benzene rings—which normally resist bending—into a hoop. The calculated strain energy is considerable, and increases with decreasing ring size: 5, 28, and 47 kcal/mol for hoops with 18, 12, and 9 benzene units, respectively. By carefully selecting small molecule precursors (right), strain was built up sequentially during the synthesis, and rings with 18, 12 and 9 benzenes were obtained in good yield (>35%).

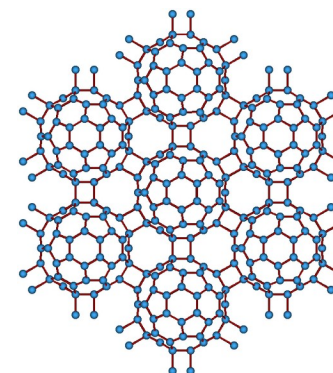
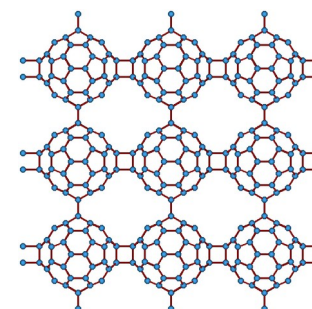
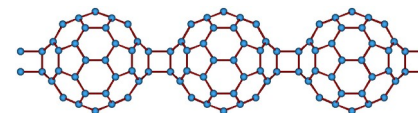
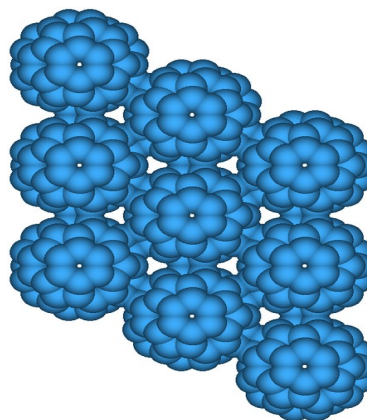
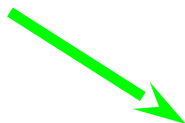
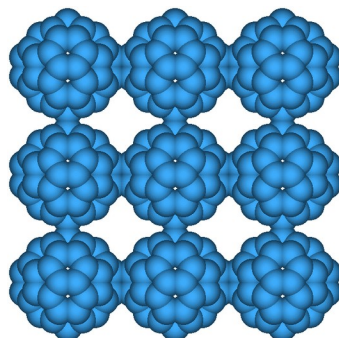
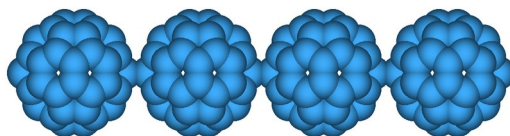
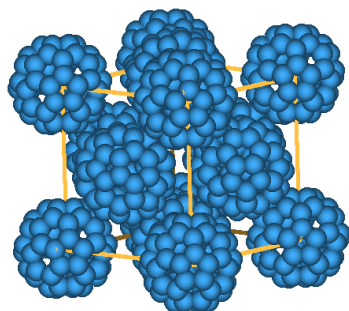
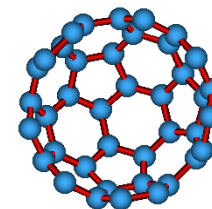


C60 при высоком давлении

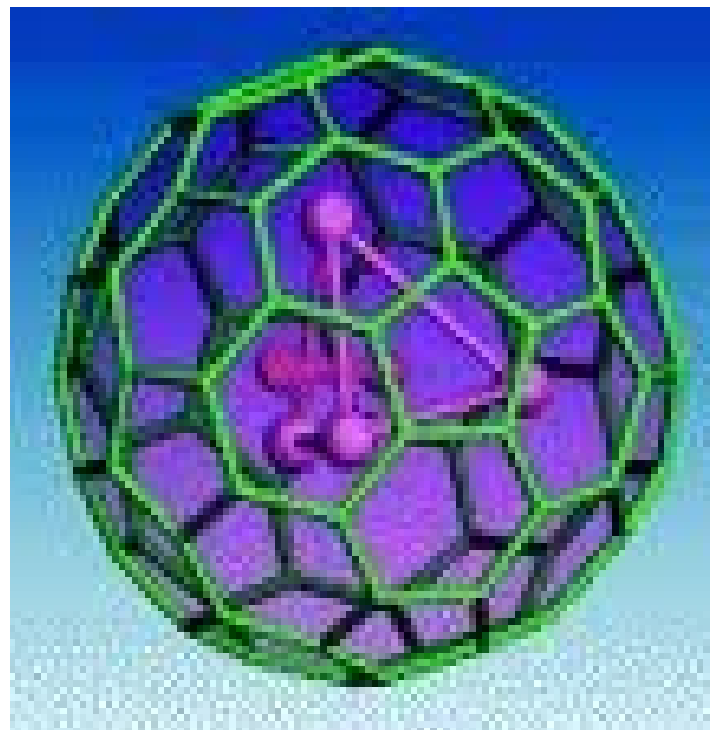




Полифуллерены C_{60}

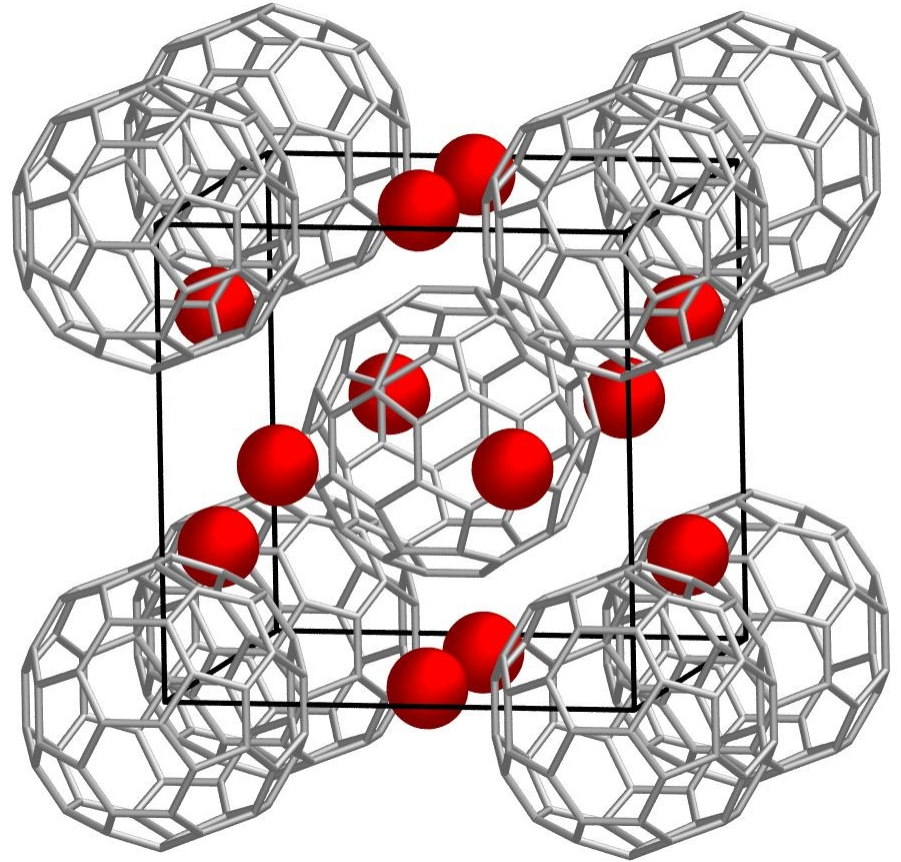
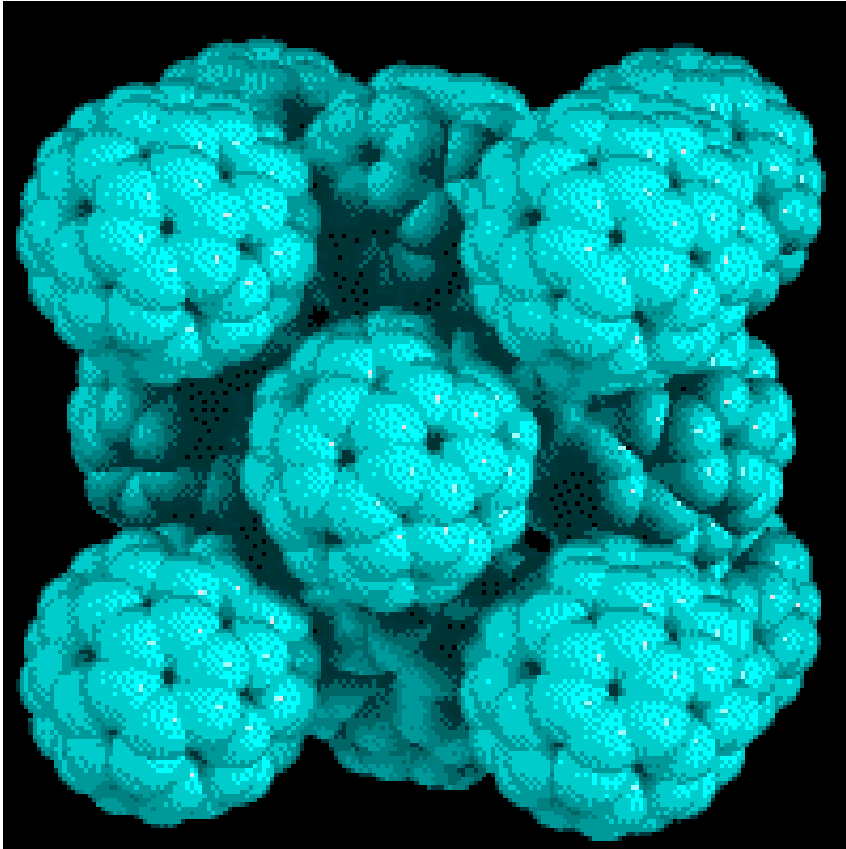


Эндо комплексы металлов и неметаллов с фуллеренами



Благородные газы, щелочно-земельные, d- и f-металлы и их нитриды и карбиды

Экзо комплексы металлов с фуллеренами

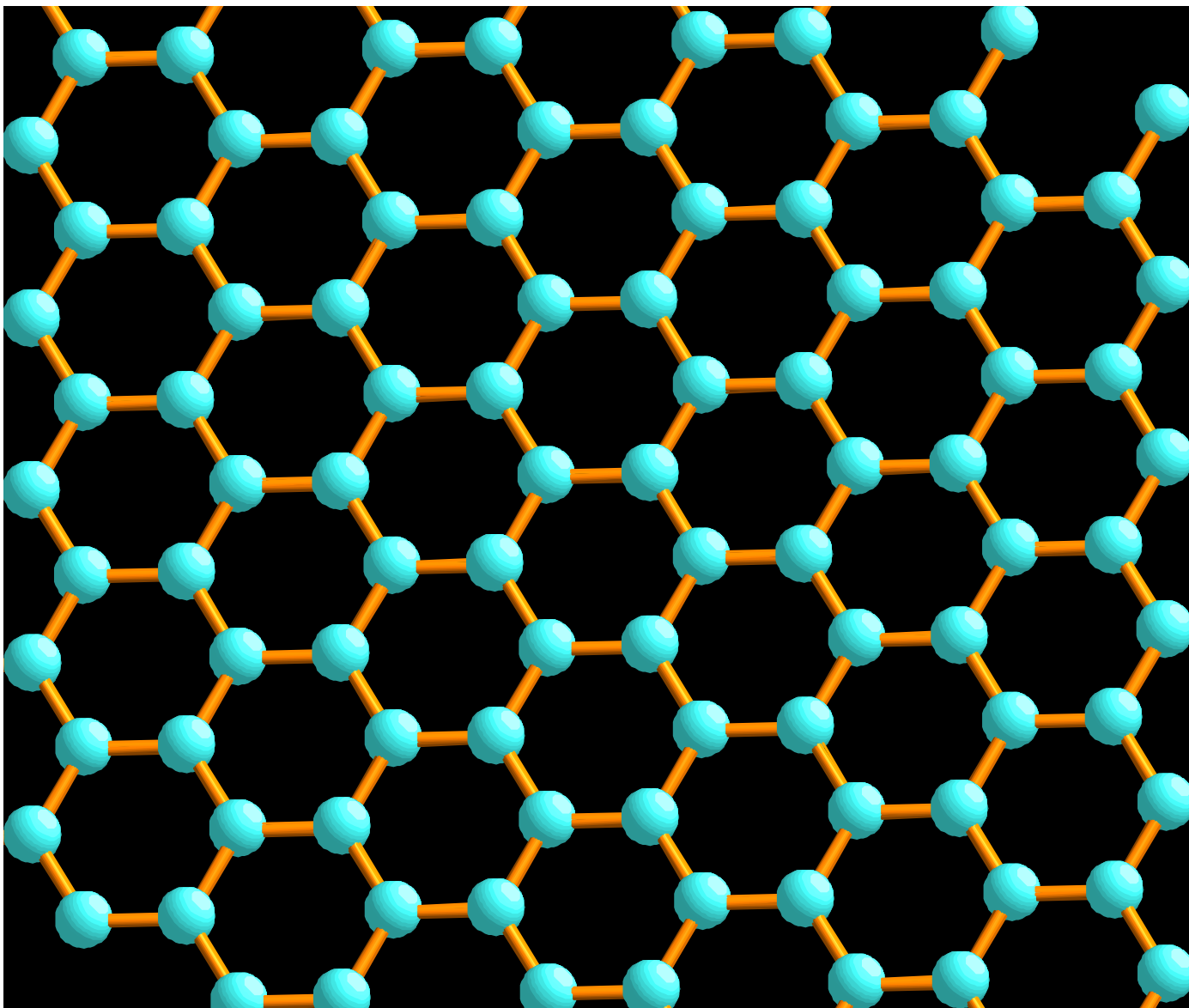


Сверхпроводимость

33 К – $\text{Cs}_2\text{RbC}_{60}$

38 К – Cs_3C_{60} (под давлением)

Графен (K.S. Novoselov, A.K. Geim, Нобелевская премия по физике, 2010)

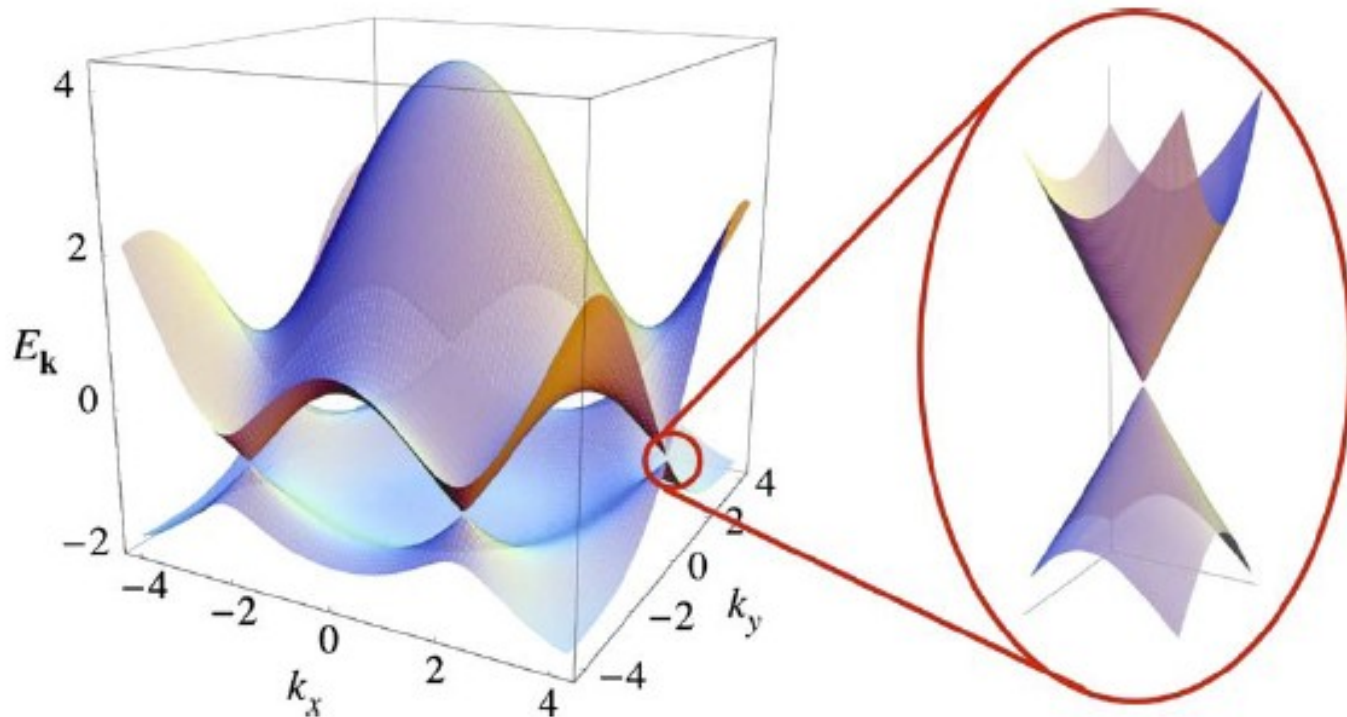


Дираковские «фермионы» в графене

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx \pm v_F |\mathbf{q}|$$

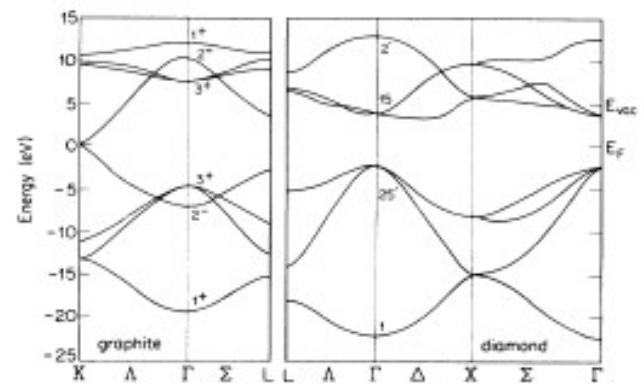
$$\varepsilon(\mathbf{q}) = \mathbf{q}^2 / (2m)$$

Wallace, 1947



Электронный транспорт в графене описывается релятивистским уравнением Дирака. Заряженные носители в графене ведут себя подобно релятивистским частицам с нулевой массой покоя и эффективной «скоростью света» $\sim 10^6 \text{ м/с}$.
K.S. Novoselov, A.K. Geim, et al. 2005

Электронная структура: графит, алмаз, графен и аморфные sp^2 – sp^3 сетки



PHYSICAL REVIEW B
VOLUME 35, NUMBER 6
15 FEBRUARY 1987-II

Electronic and atomic structure of amorphous carbon

J. Robertson
Central Electricity Research Laboratories, Central Electrical Generating Board, Leatherhead,
Surrey KT22 7SE, United Kingdom

E. P. O'Reilly
Department of Physics, University of Surrey, Guildford, Surrey, GU2 5XH, United Kingdom
(Received 22 August 1986)

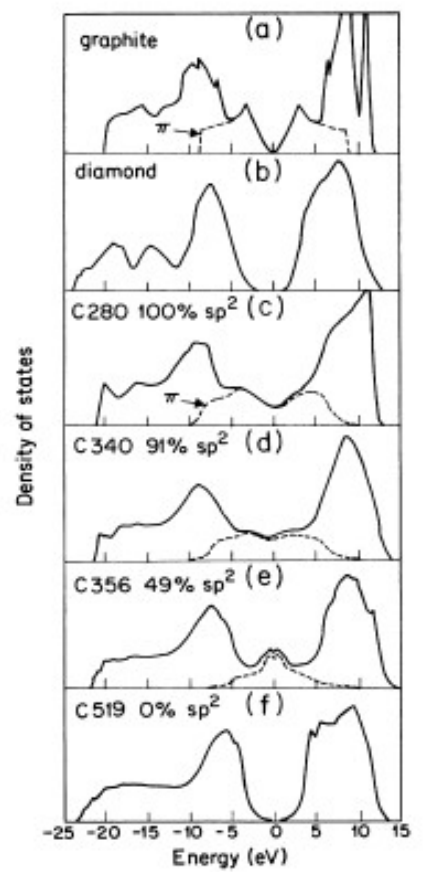
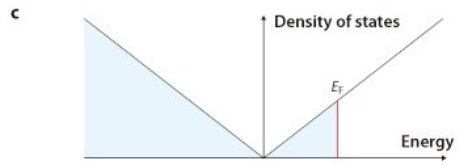
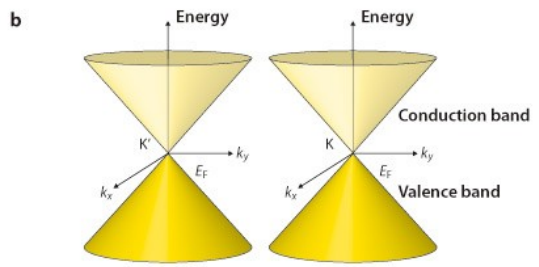
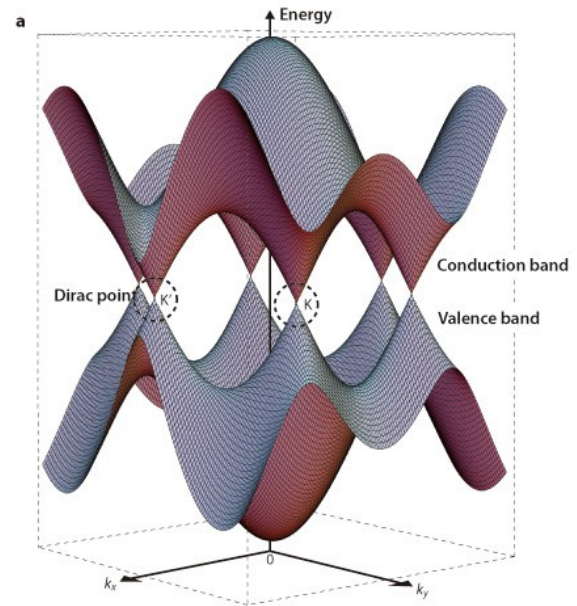


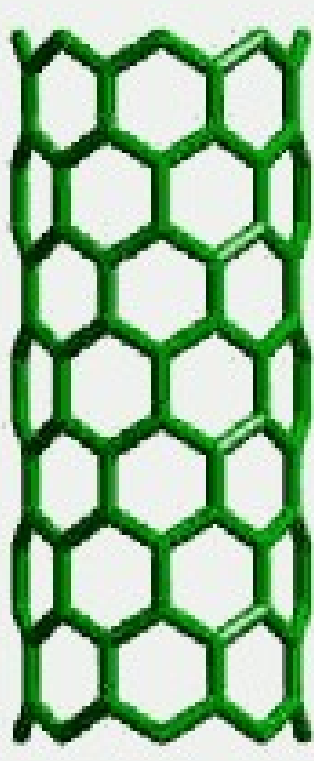
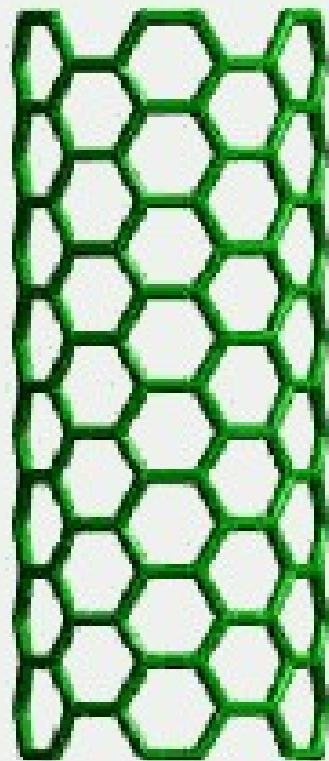
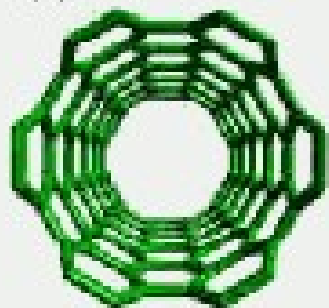
FIG. 2. Local density of states of graphite, diamond, and of the four random networks of Beeman *et al.* (Ref. 5), calculated by the recursion method.

Нанотрубки

(a)

(b)

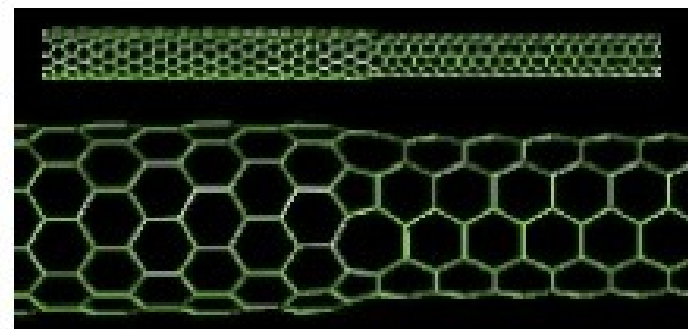
(c)



(a) кресло

(b) зигзаг

(c) спираль



“Гетеропереход”: металл – полупроводник.

Механические свойства:

Модуль Юнга

1ТПа (0.2 нерж. сталь)

Напряжение разрыва

13-53 ГПа (0.4-1.5 нерж. сталь)

Одномерные и квазиодномерные углеродные структуры

Одностенные и многостенные нанотрубки различной киральности

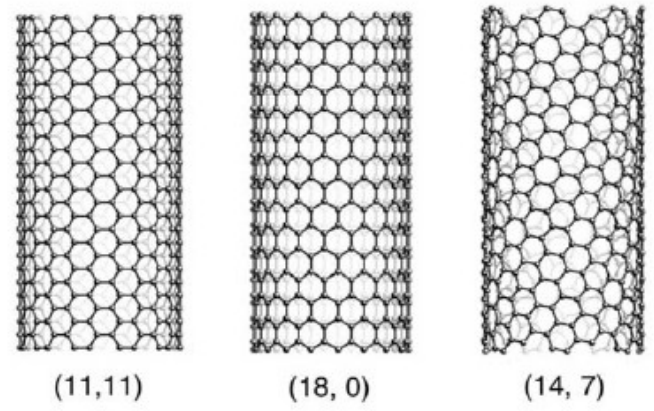
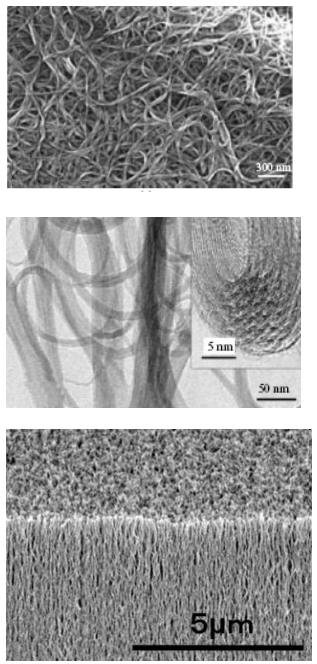
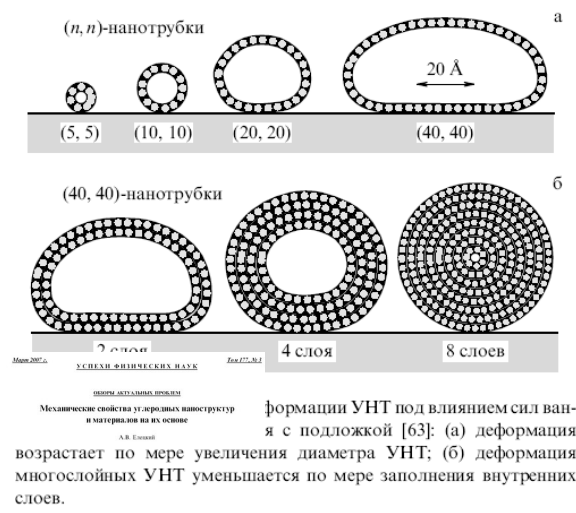
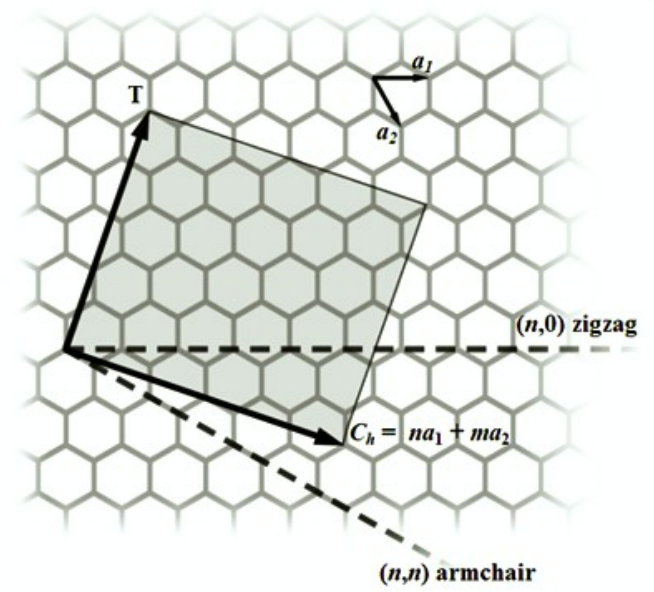
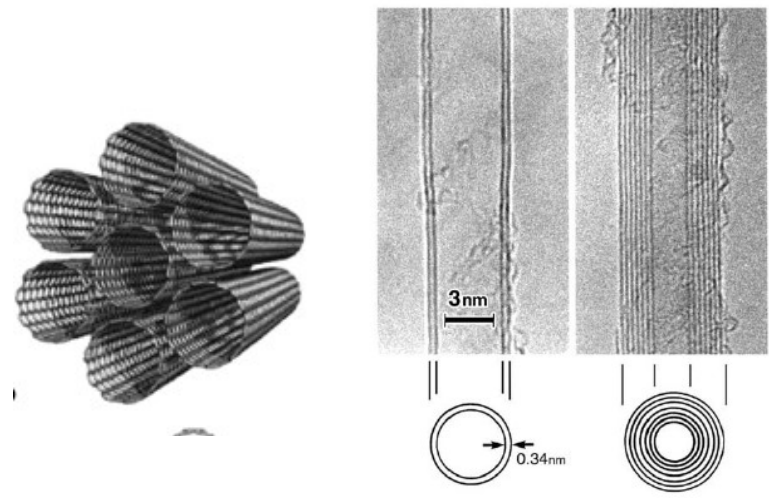
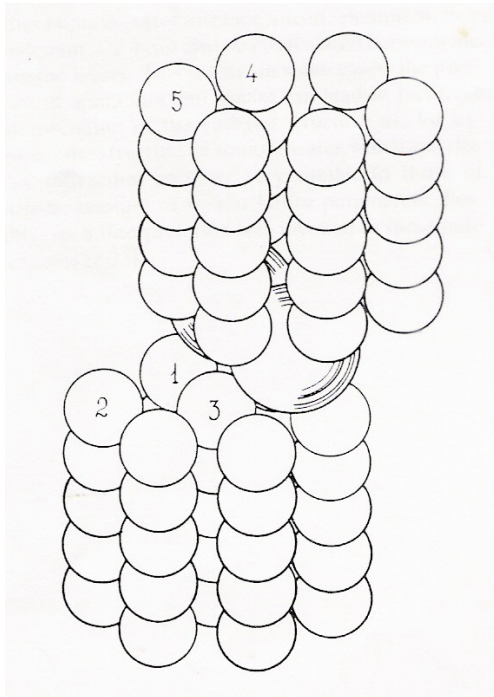
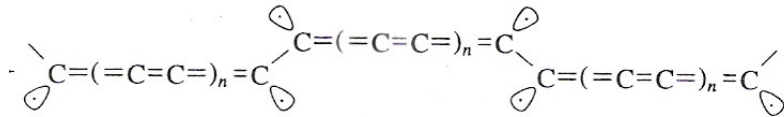


Fig. 2. Computer-generated images of single-wall carbon nanotubes: (a) (11,11) armchair type, (b) (18,0) zig-zag type, and (c) (14,7) helical type. The numbers in parentheses are the chiral indices.¹



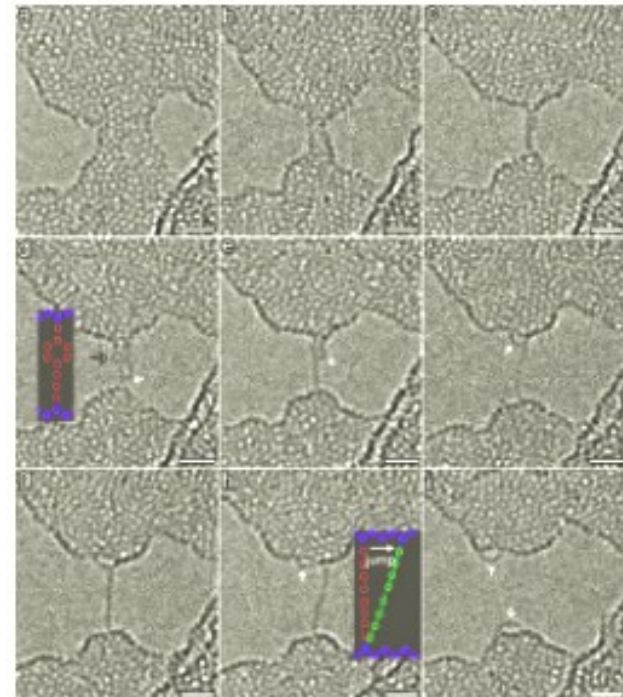
Одномерные и квазиодномерные углеродные структуры

Карбин



Стабилизация карбиновых цепочек примесями

Углеродные цепочки из графена



Одномерные и квазиодномерные углеродные структуры

Графеновые ленты

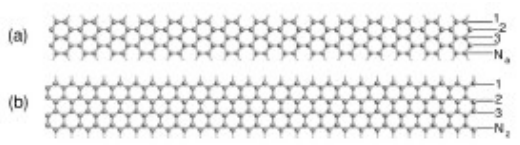


FIG. 1. The schematic view of the armchair ribbon (a) and zigzag ribbon (b) with H termination. Large solid circles indicate carbon atoms and small ones indicate the hydrogen atoms. The width parameter N_a and N_z are defined in the text.

PHYSICAL REVIEW B VOLUME 62, NUMBER 24 15 DECEMBER 2000-II

Graphitic ribbons without hydrogen-termination: Electronic structures and stabilities

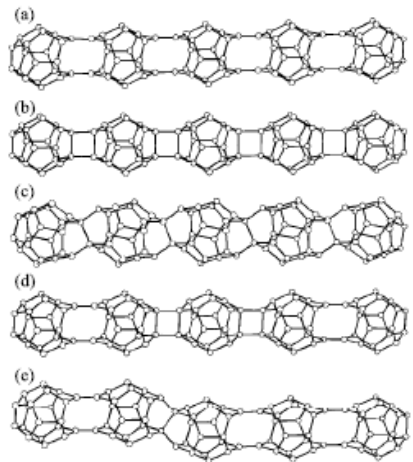


Рис.2. Цепочки $(C_{20})_n$ с междоузельными связями open-[2+2] (a), [2+2] связями (b) и "искривленными" связями (c), а также цепочки с комбинацией open-[2+2] и [2+2] связей (d) и open-[2+2] и "искривленных" связей (e). Энергии связи ΔE фуллеренов в цепочках равны 3.598 эВ/ C_{20} (a), 2.298 эВ/ C_{20} (b), 3.511 эВ/ C_{20} (c), 2.973 эВ/ C_{20} (d), 3.630 эВ/ C_{20} (e).

Одномерно полимеризованные фуллерены

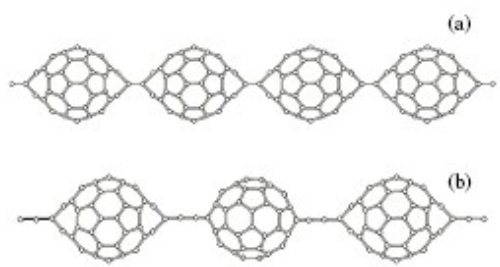


Fig. 2. Fragments of periodic quasi-1D structures with different numbers of carbon atoms: (a) $C_{60} + C[2]$ -1D structure and (b) $C_{60} + C[3]$ -1D structure.

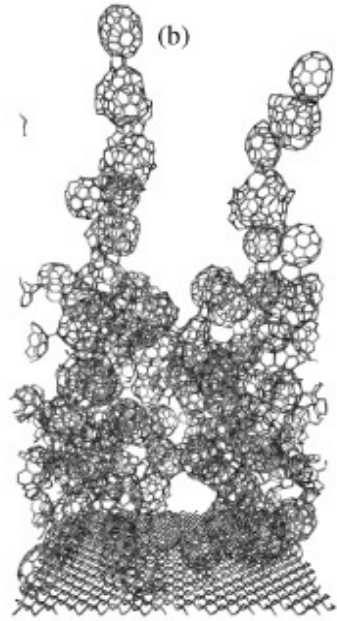
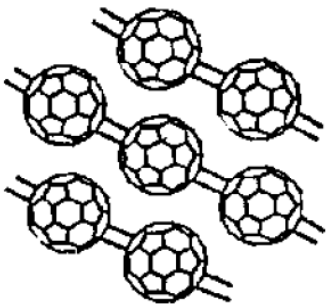


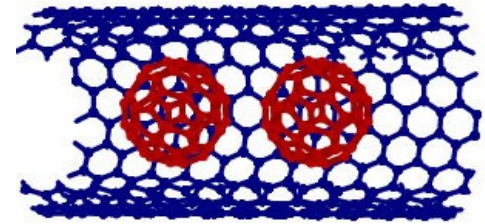
FIG. 2. Atomic structure of amorphous film obtained by deposition of beams with bimodal mass distribution in the range 1–23 atoms and 46–120 atoms with relative weight 5:1 [sample (a)] and 1:10 [sample (b)], respectively.

VOLUME 83, NUMBER 4 PHYSICAL REVIEW LETTERS 26 JULY 1999

Growth of Nanostructured Carbon Films by Cluster Assembly

D. Donadio¹, L. Colombo^{1,*}, P. Mileni² and G. Benedek¹

Одномерные и квазиодномерные углеродные структуры



Fullerene peapods

PHYSICAL REVIEW B, VOLUME 64, 115420

Electron diffraction study of one-dimensional crystals of fullerenes

K. Hirahara,^{1,*} S. Bandow,¹ K. Suenaga,¹ H. Kato,² T. Okazaki,² H. Shinohara,² and S. Iijima^{1,3,4}

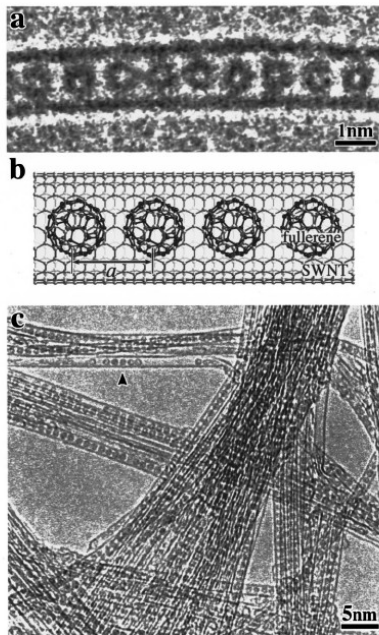


FIG. 1. (a) HRTEM image and (b) its schematic illustration of an individual fullerene-encapsulated single-walled carbon nanotube $[(C_{60})_n@SWNT]$, the so-called peapod. (c) A general view of the fullerene-encapsulated nanotubes of $(Sc_2C_{84})_n@SWNTs$.

VOLUME 92, NUMBER 24

PHYSICAL REVIEW

Observation of Ordered Phases of Fullerenes in Carbon Nanotubes

Andrei N. Khlobystov,^{1,*} David A. Britz,¹ Arzhang Ardavan,² and G. Andrew D. Briggs¹

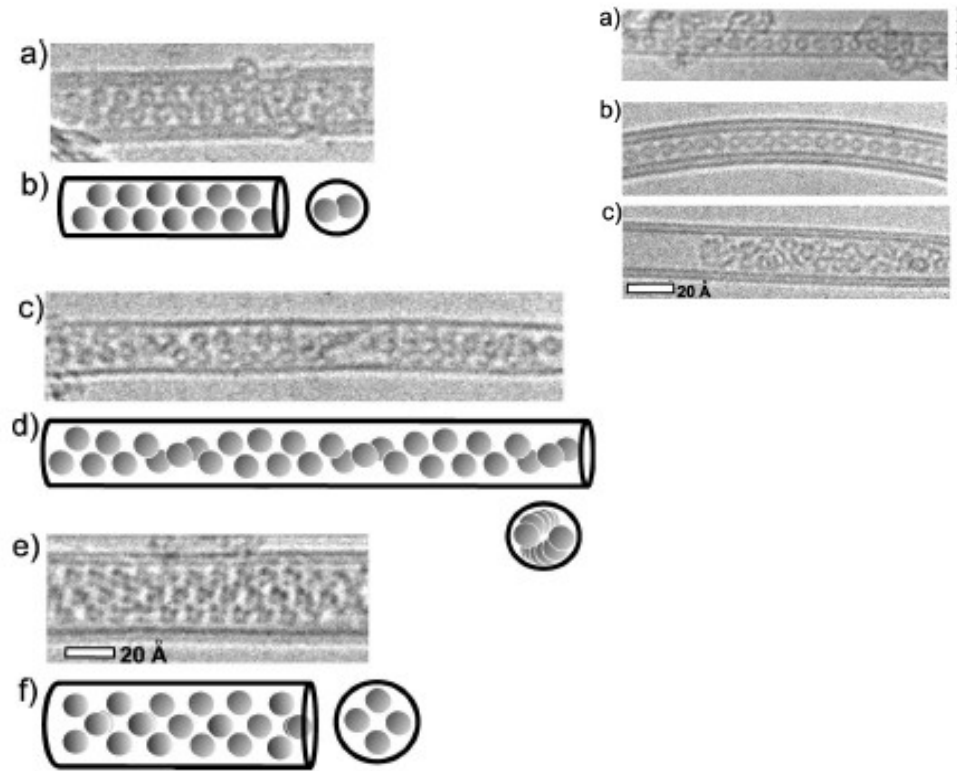
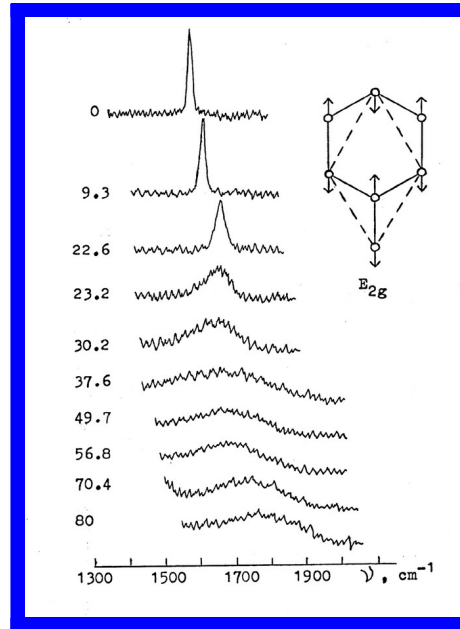
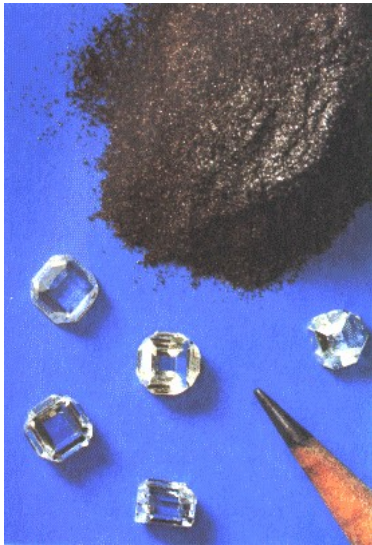
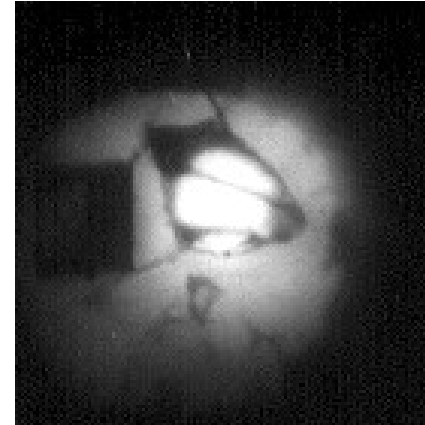


FIG. 2. HRTEM micrographs and schematic representation of (a),(b) $C_{60}@DWNTs$ zigzag phase; (c),(d) $C_{60}@SWNT$ chiral phase; (e),(f) two-molecule layer phases.

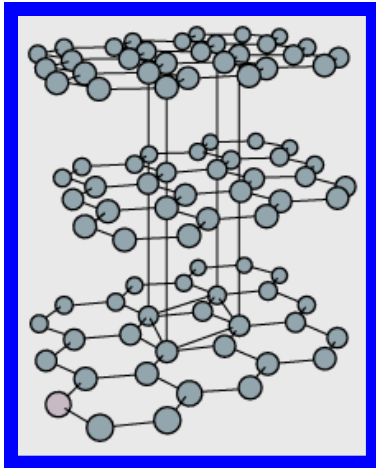
Графит при высоких давлениях



Raman spectra of graphite single crystal



Light can be seen through graphite single crystal at pressure ~ 20 GPa



Structures of graphite and amorphous carbon

Нанополукристаллический алмаз из графита

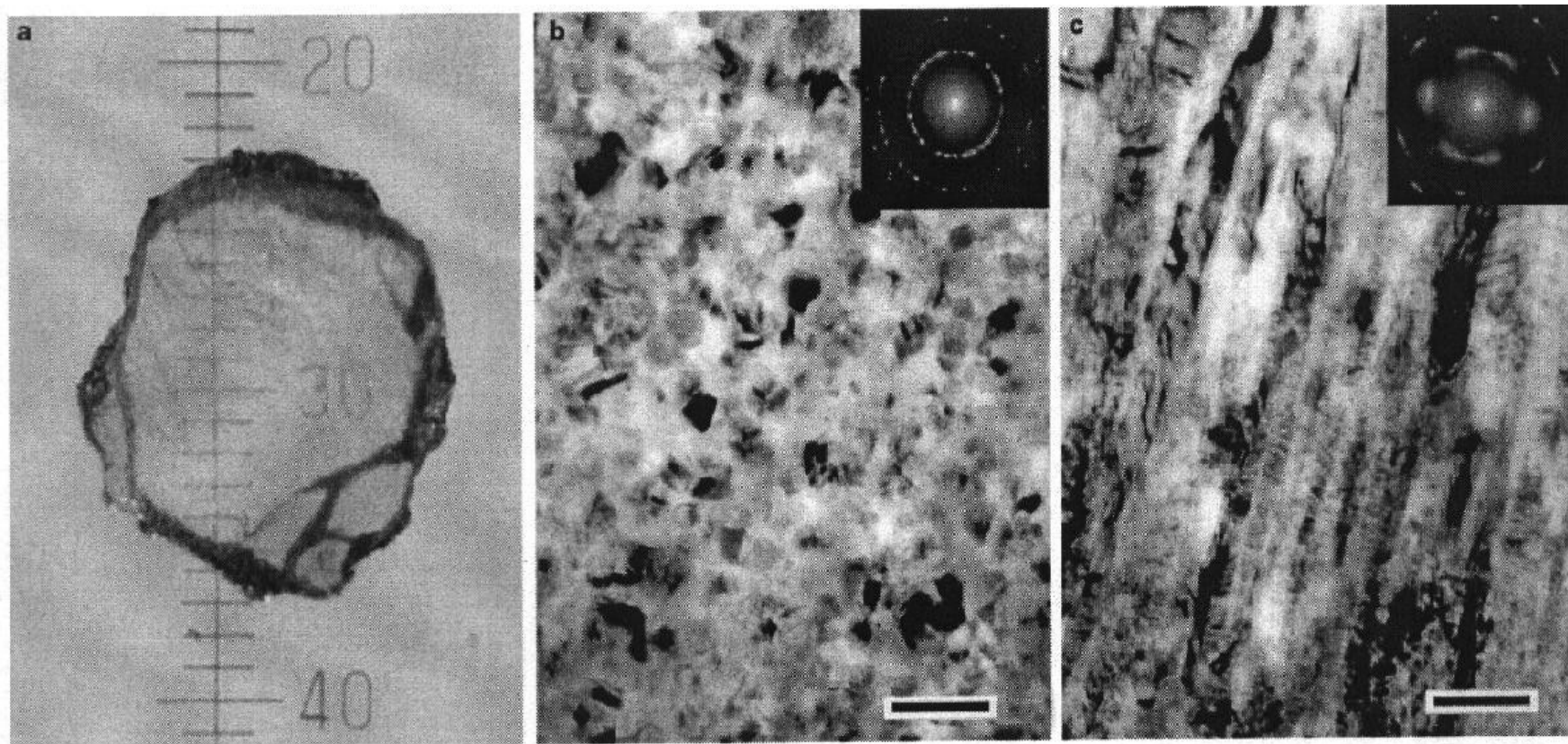
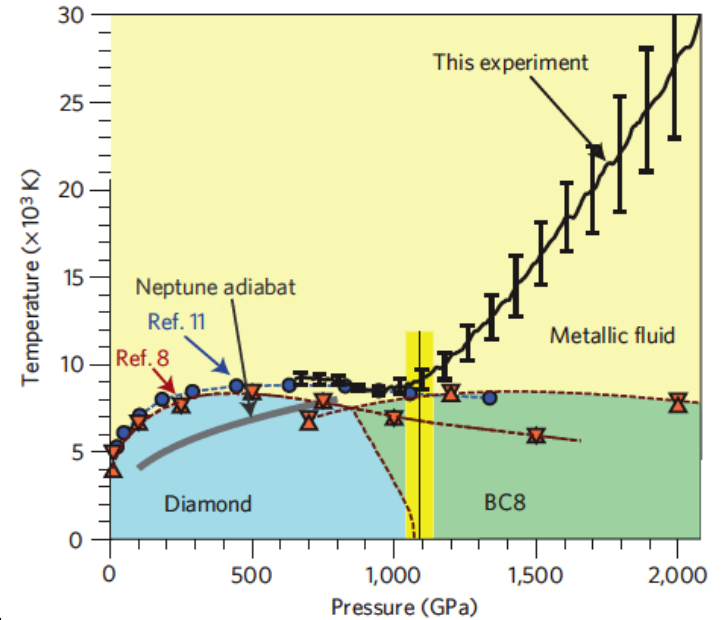
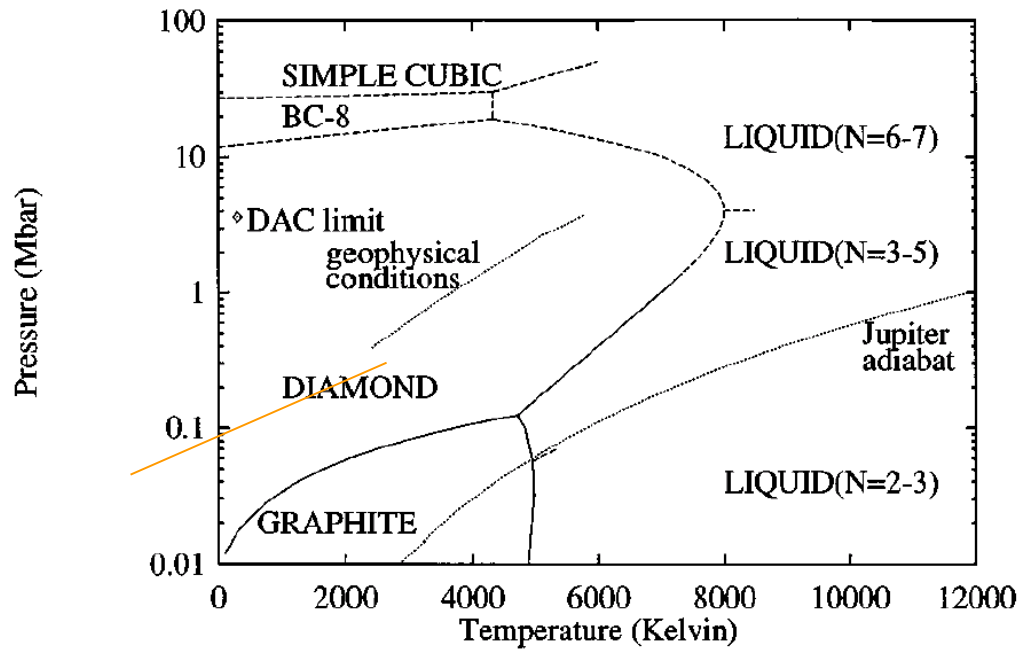


Figure 1 Sintered polycrystalline diamond synthesized by direct conversion of graphite. **a**, Optical microscopic image of a sample of the synthesized diamond (about 0.1 mm in diameter and 0.3 mm thick). **b**, **c**, Transmission electron microscopy reveals that this diamond material consists of minute crystals that are 10–20 nm across (**b**) and of larger, elongated (100–200 nm) crystals, which are evident in another region of the same sample (**c**). Scale bars, 50 nm. Insets, electron-diffraction patterns of each crystal type, obtained using a beam size of 400 nm.

Нанополикристаллический алмаз из графита



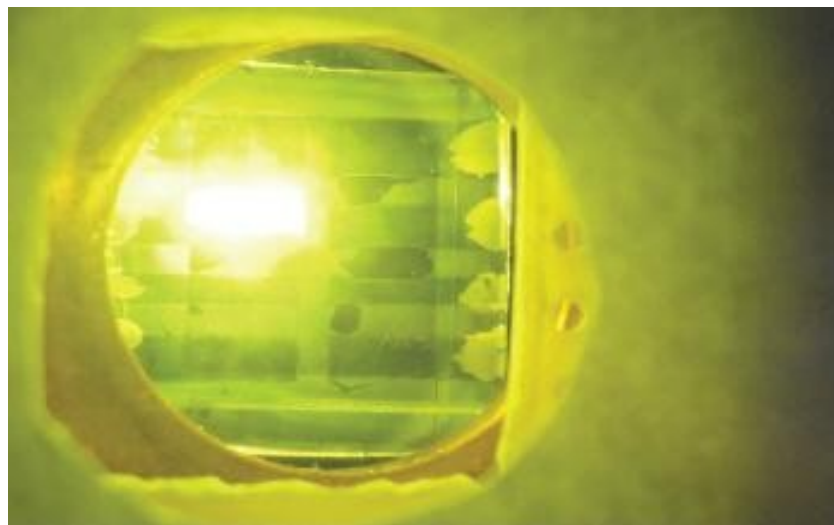
Алмаз под давлением



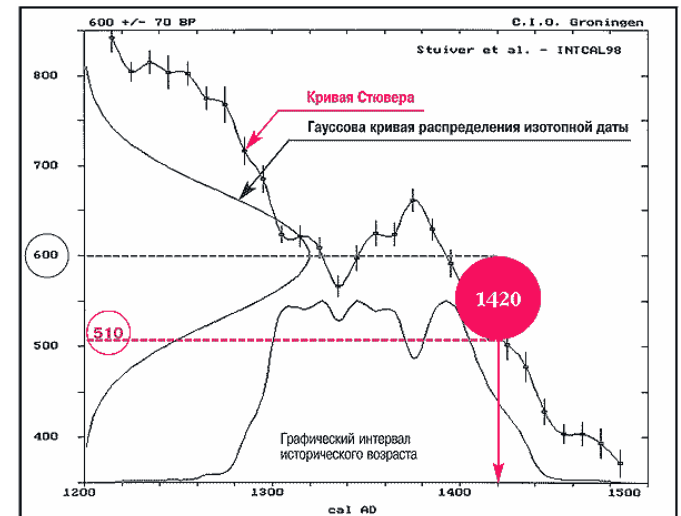
J.H. Eggert et al. 2010

Grumbash, Martin, 1996

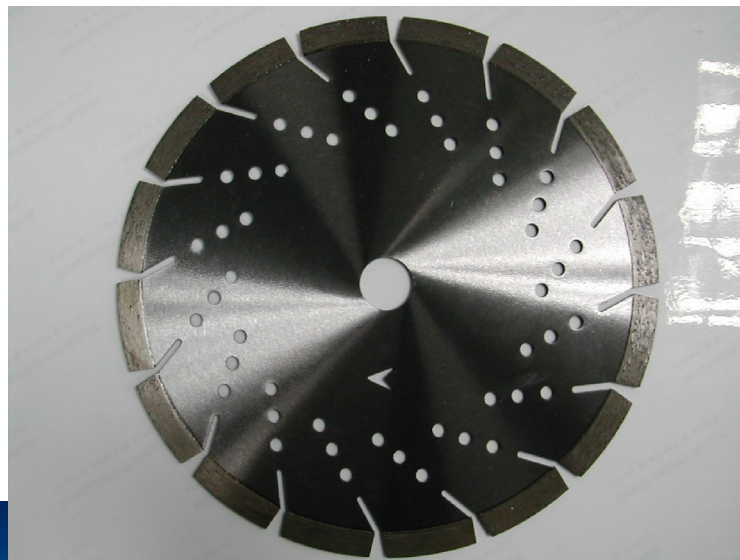
Применение углерода



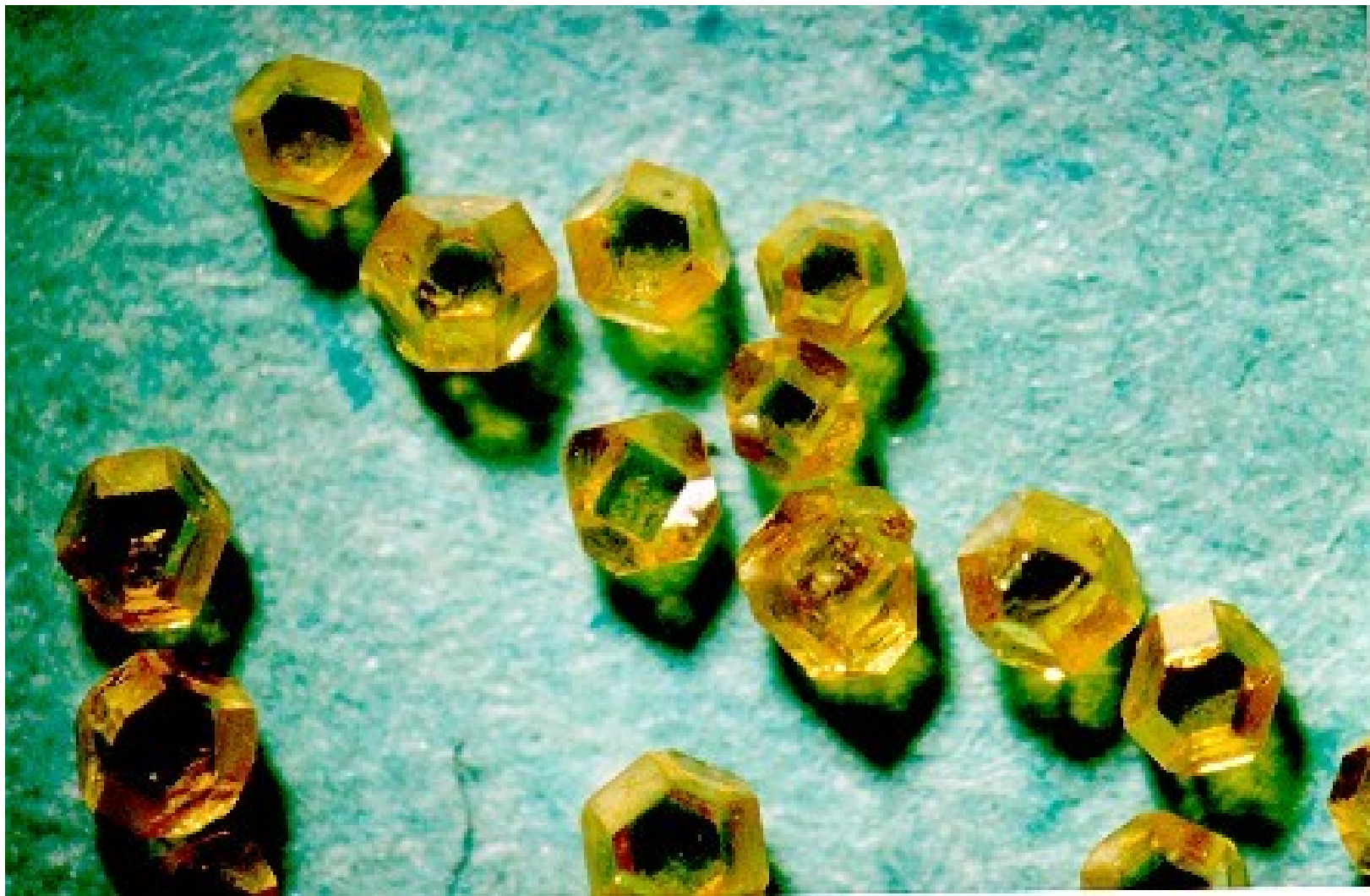
Радиоуглеродный анализ



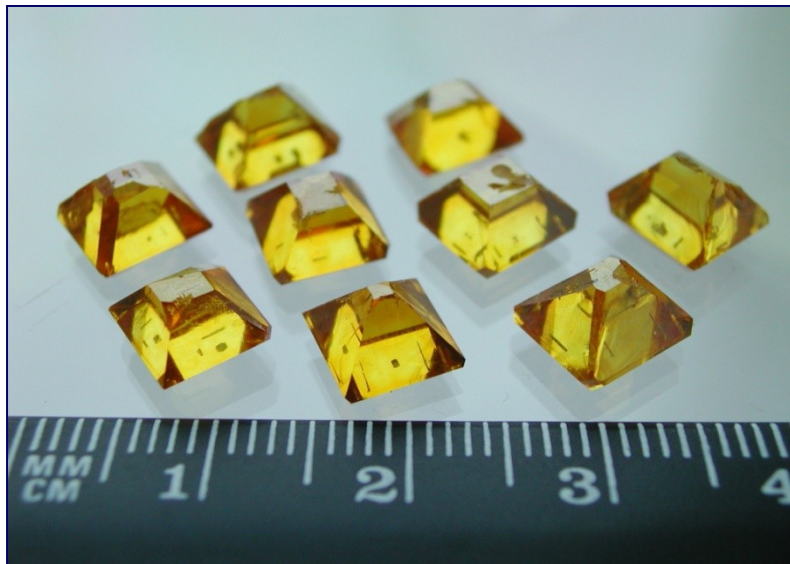
Сверхтвердые материалы



Man made diamonds: впервые GE в 1955 г. (ASEA 1953 г ?).



Крупные высококачественные монокристаллы синтетического алмаза

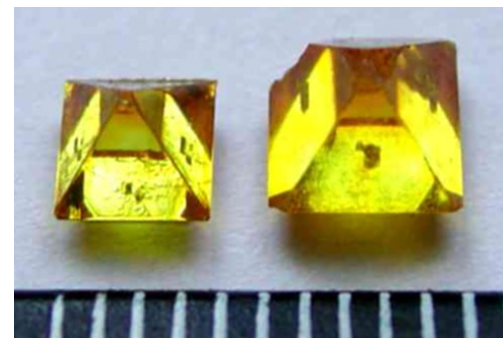


Кристаллы алмаза Ib типа

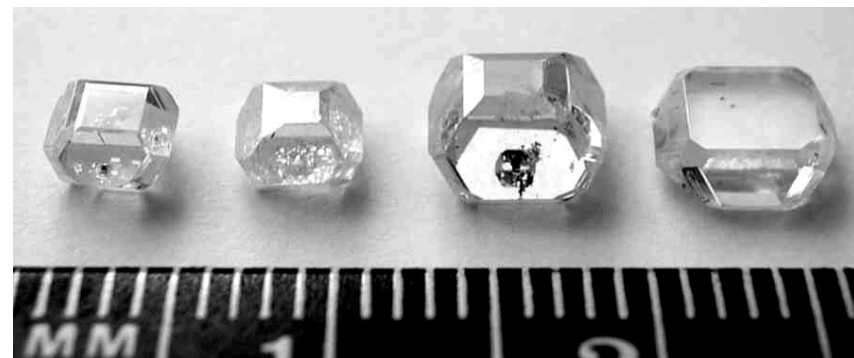


Кристаллы синтетического алмаза
массой до 6 карат

Сибирское отделение РАН, Институт геологии и минералогии



Кристаллы алмаза Ib+IaA типа

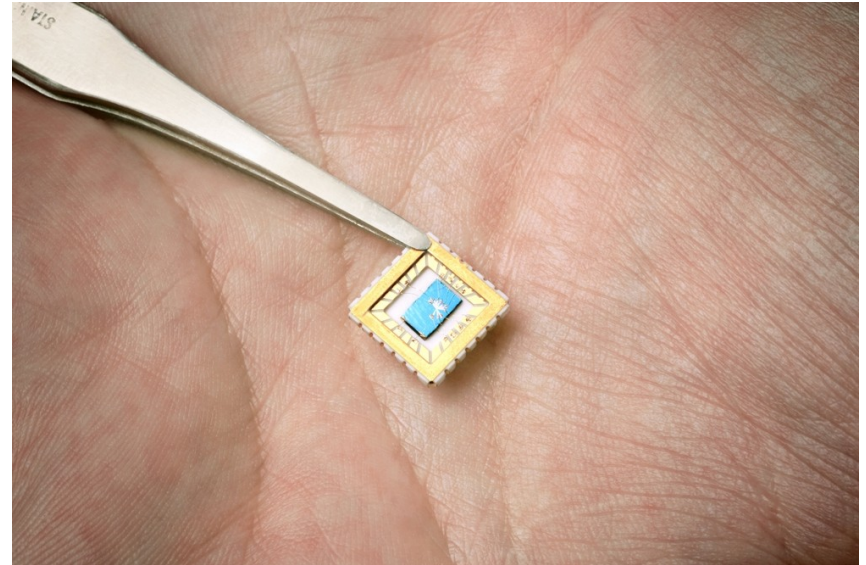


Безазотные кристаллы IIa типа



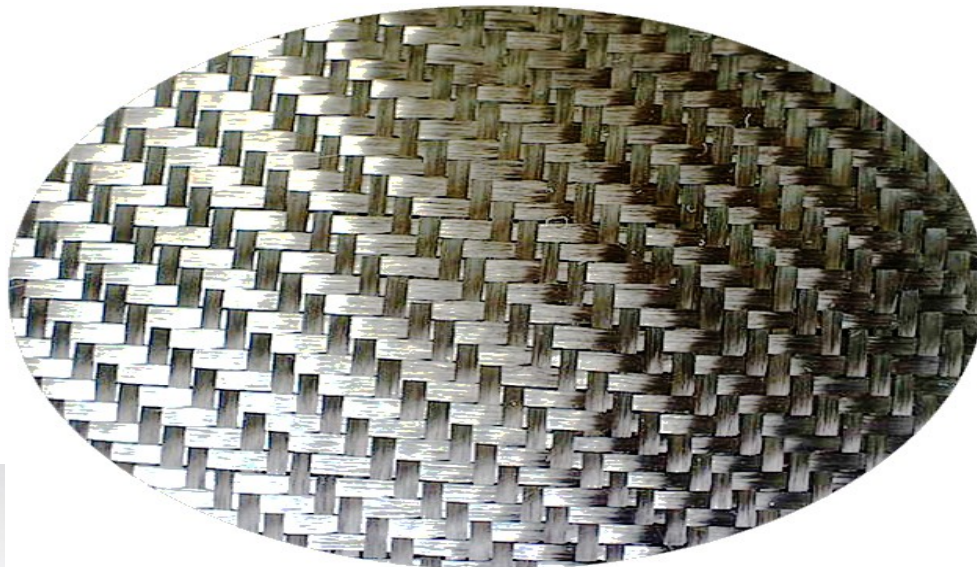
Кристаллы алмаза IIb типа

Материалы для электроники



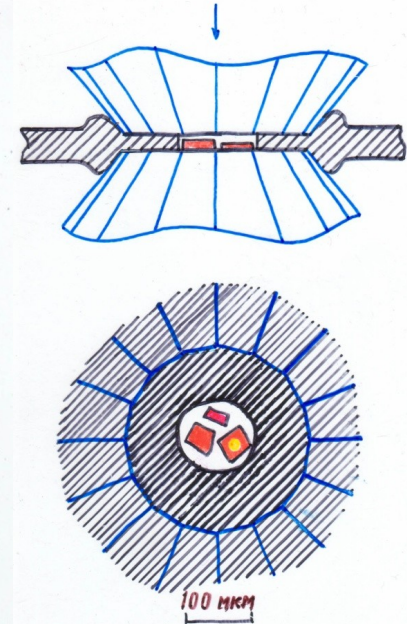
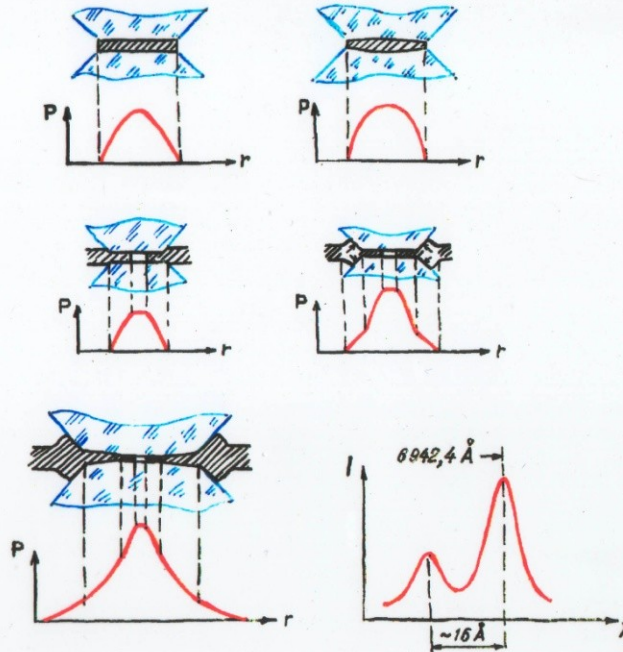
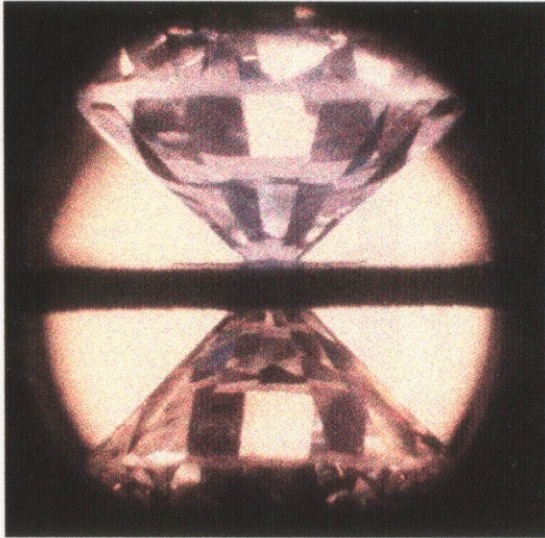
цветной дисплей из нанотрубок и
первый транзистор из графена

Композиционные материалы



Камеры высоких давлений мегабарного диапазона

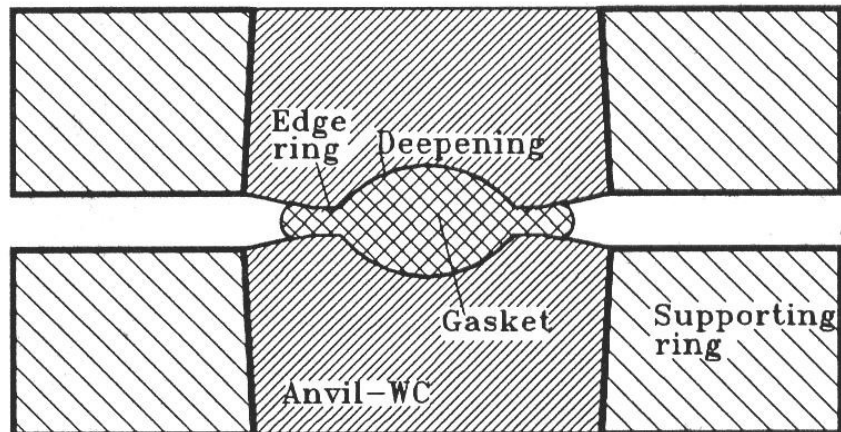
Diamond Anvils



Исследования углерода в ИФВД РАН



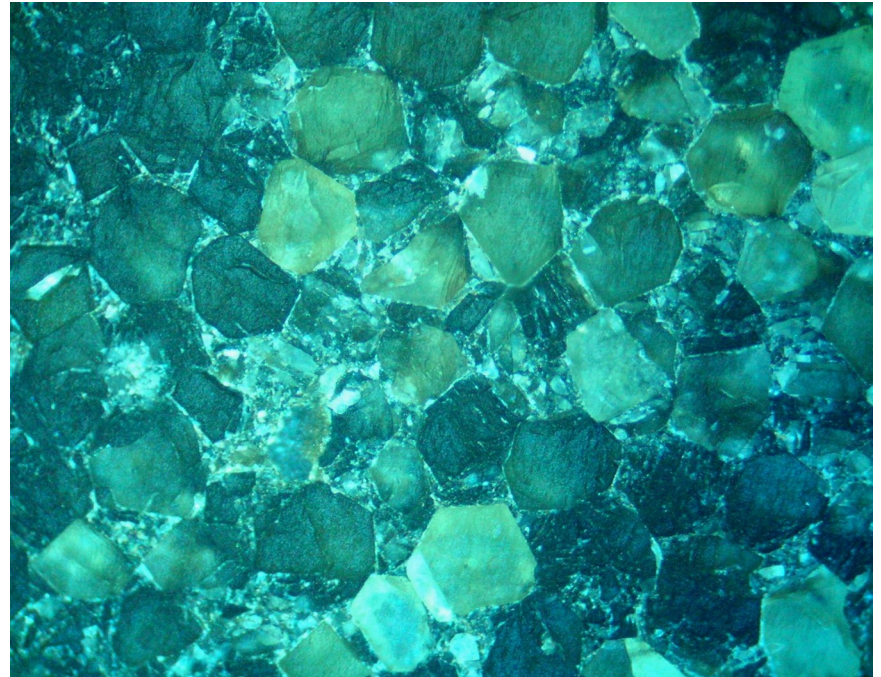
- 50 лет синтеза алмазов в СССР



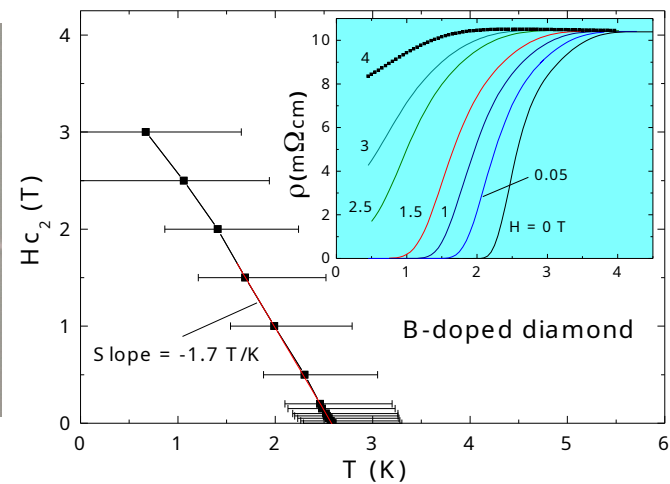
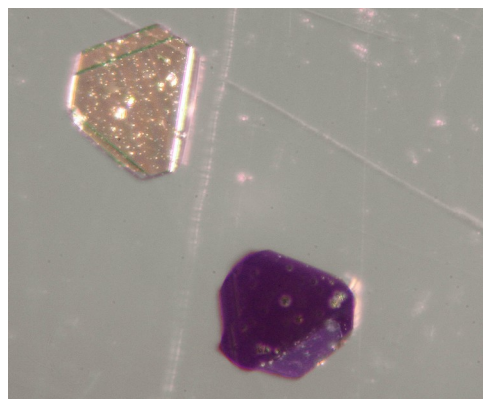
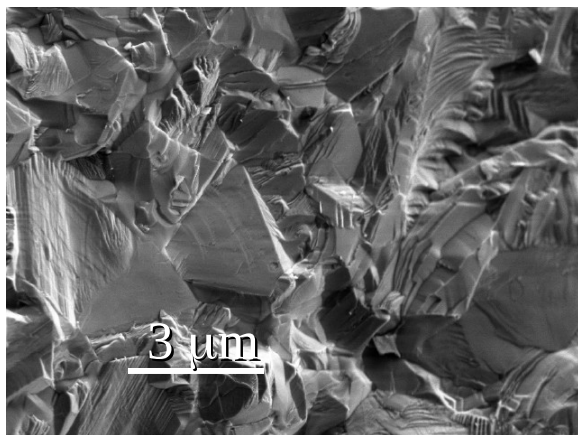
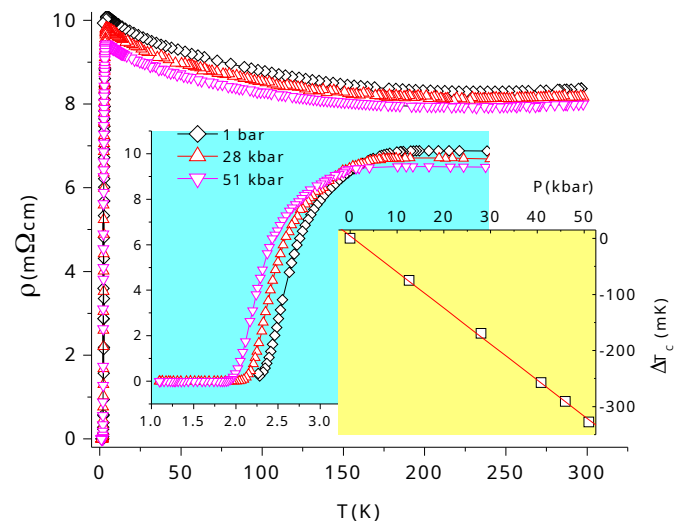
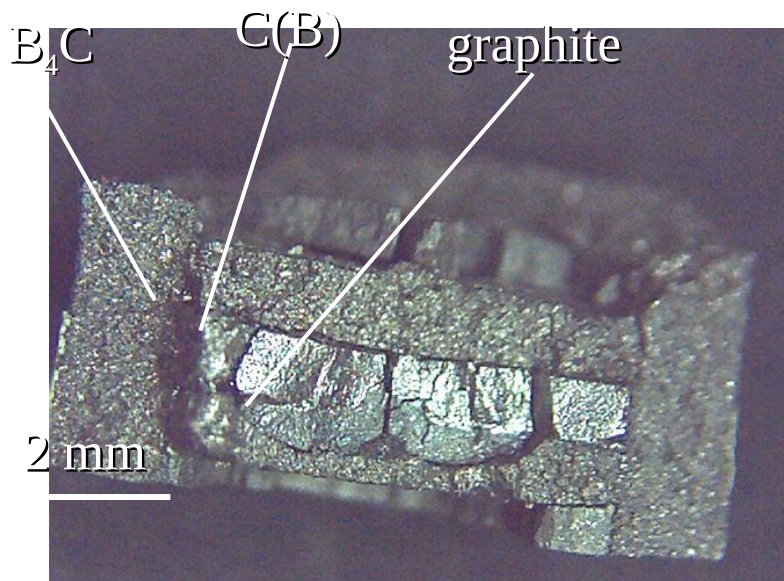
Искусственные поликристаллические алмазы заданной формы (70е годы)



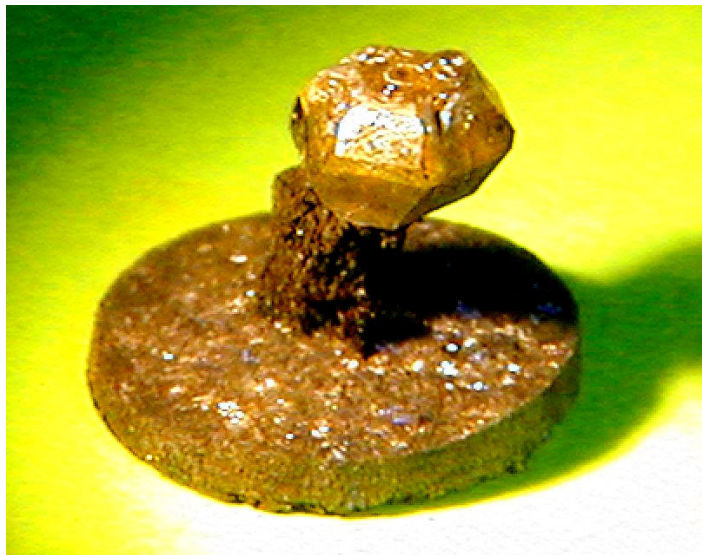
Алмазные композиционные материалы (2005-2010)



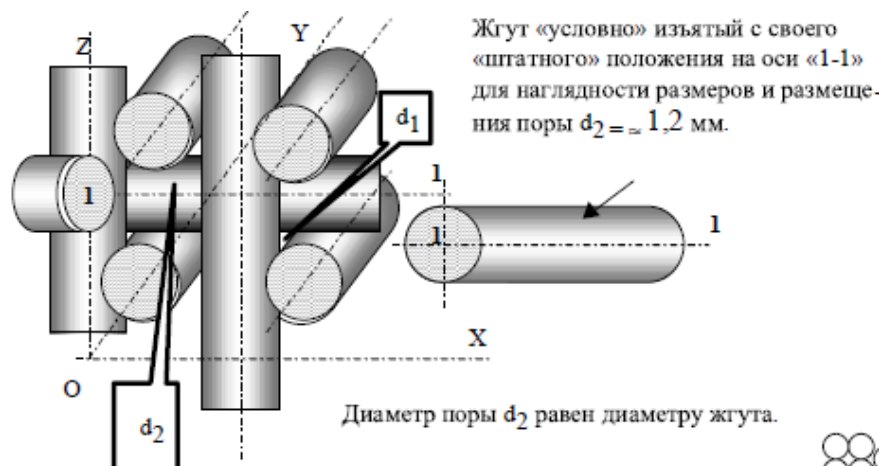
Сверхпроводящие алмазы, легированные бором (2003-2010)



Выращивание и модификация цвета монокристаллов алмаза (2000-2010)



Углерод-углеродные композиционные материалы на Большом Прессе ИФВД РАН



Неорганический синтез углеводородов в ИФВД РАН (2002-2010)

Реализована экспериментальная модель образования нефти в условиях верхней мантии Земли. В системе из неорганических компонентов $\text{CaCO}_3\text{-FeO-H}_2\text{O}$ при $P=3\text{-5 ГПа}$ и $T=1100\text{-1500 К}$ синтезирована смесь углеводородов алканового, алкенового и аренового рядов

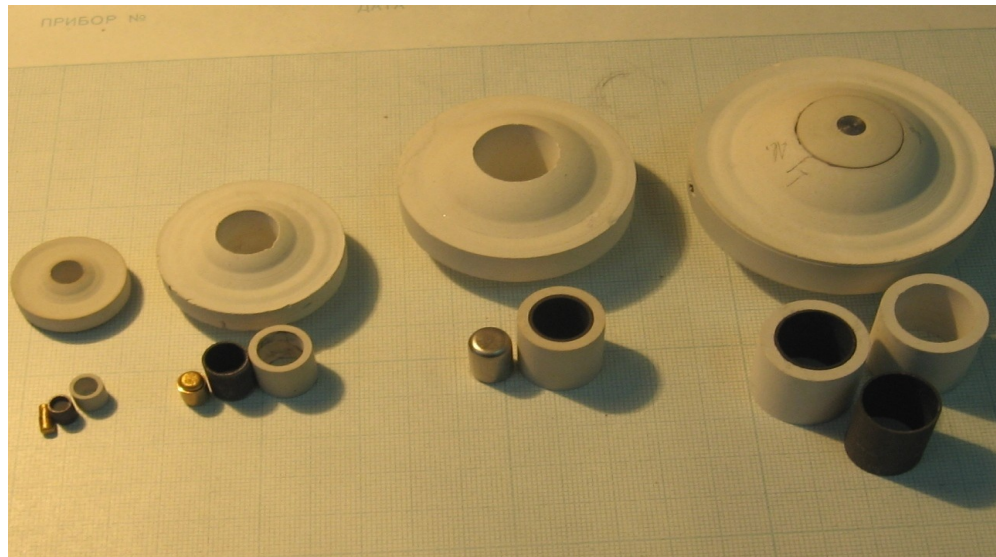


“Every ten or fifteen years since the late 1800’s, ‘experts’ have predicted that oil reserves would last only ten more years. These experts have predicted nine out of the last zero oil-reserve exhaustions.”

C. Maurice and C. Smithson, *Doomsday Mythology: 10,000 Years of Economic Crisis*, Hoover Institution Press, Stanford, 1984.

Экспериментальное оборудование:

камера КОНАК с герметичной платиновой ампулой



Реакция неорганического синтеза углеводородов

Источники углерода:

Оксид углерода (CO_2), графит, алмаз, карбонаты (MgCO_3 , CaCO_3)

Источники водорода:

вода, биотит, мусковит

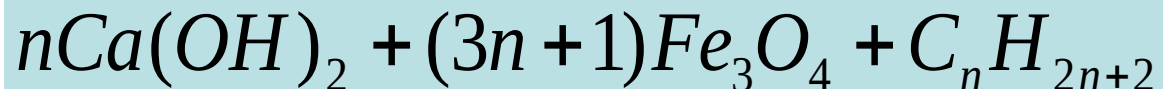
Восстановительная среда:

Присутствие окиси железа FeO

Термобарические условия:

$T = 1200 \text{ K}$, $p = 30 \text{ кбар} - 100 \text{ км}$

$T = 1500 \text{ K}$, $p = 50 \text{ кбар} - 150 \text{ км}$



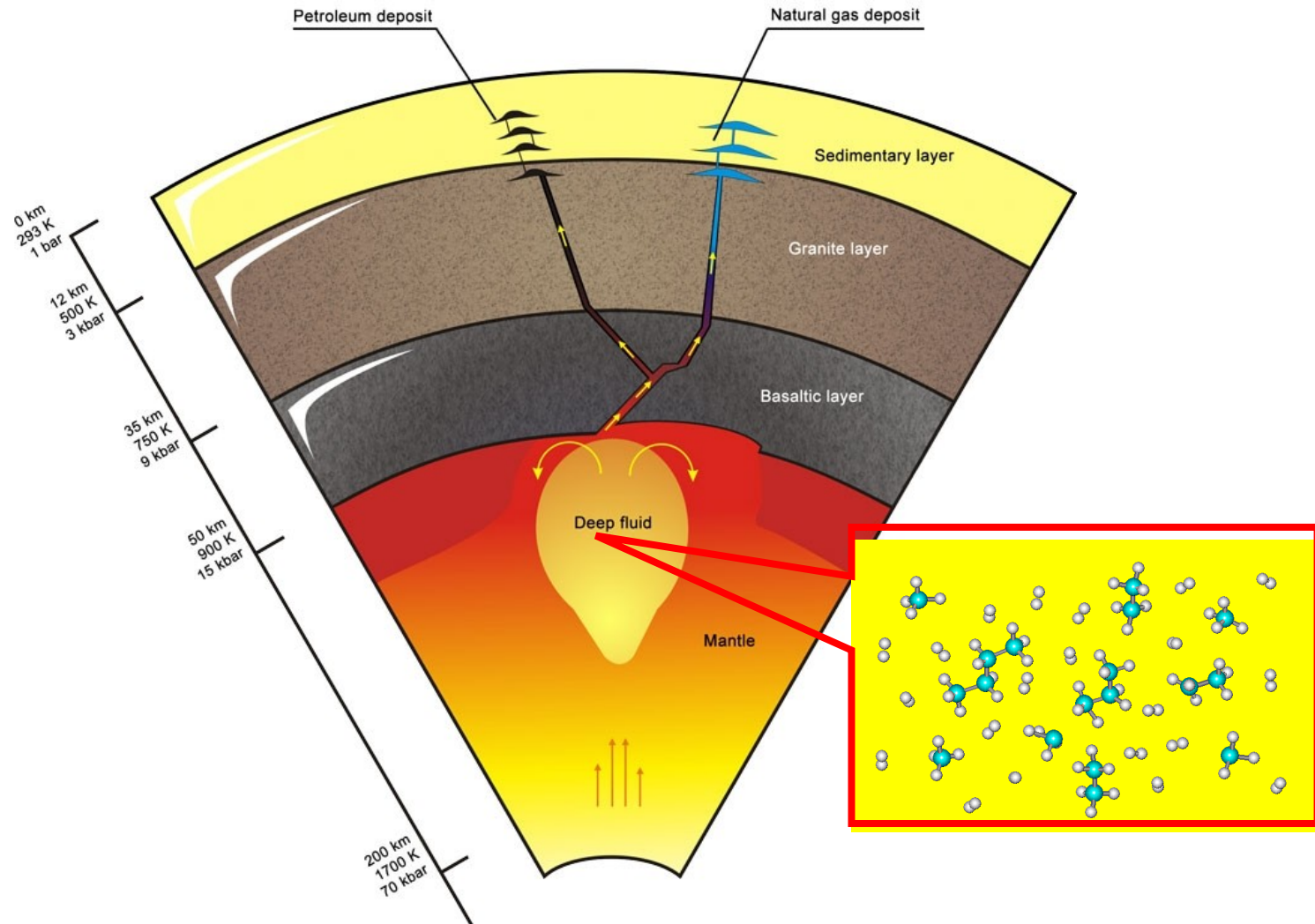
Синтез идет в 2 стадии: на первой стадии при высоких температурах и давлениях из источников водорода и углерода синтезируется метан; на второй стадии при медленном охлаждении под давлением из метана синтезируются более тяжелые углеводороды – “methane path”



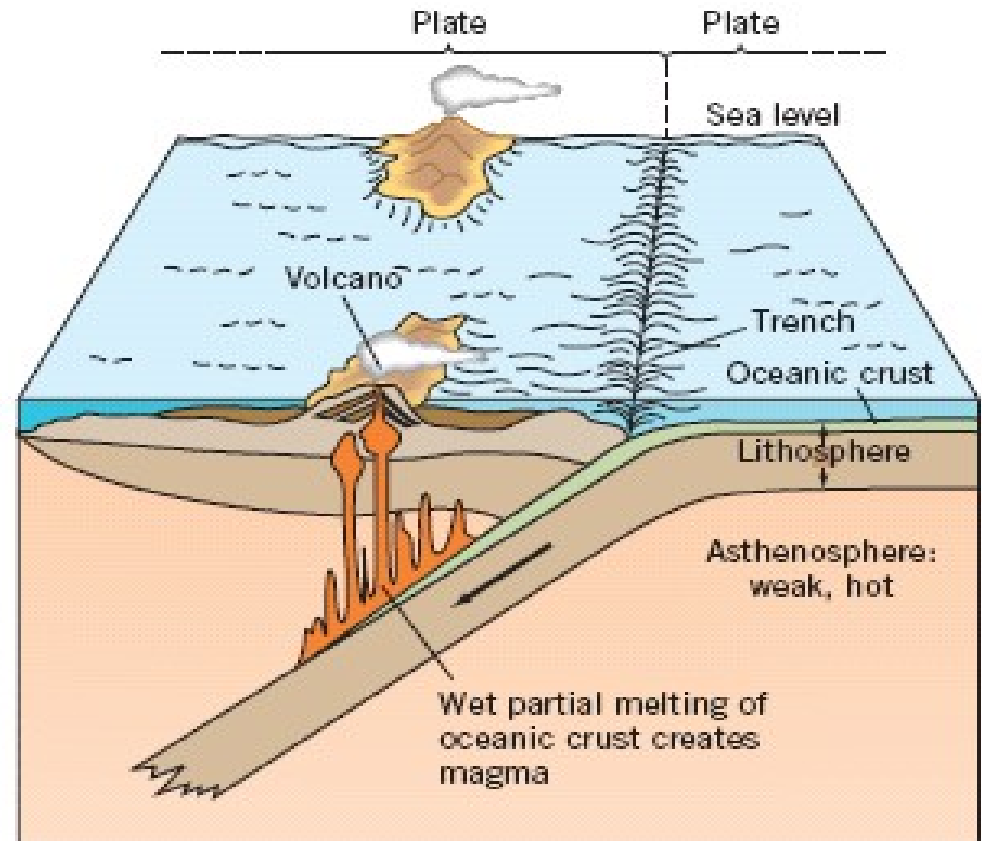
Экспериментальные результаты

Углеводород	Концентрация (мЗ на 1000 тонн)		
	$p = 50$ кбар $T = 1500$ К	$p = 30$ кбар $t = 1200$ К	“Белый тигр” (Вьетнам)
CH_4	130.2	570	124.6
C_2H_6	13.3	17.9	13.5
C_2H_4	13.4	16.2	0
C_3H_8	8.1	5.9	8
C_3H_6	19.7	20.6	0.1
$i-C_4H_{10}$	0.4	0.5	1.6
$n-C_4H_{10}$	4.7	1.9	3.5
$i-C_5H_{12}$	0.9	0.8	0.4
$n-C_5H_{12}$	2.7	1.6	6.2
$i-C_6H_{14}$	0.3	0.1	2.1
$n-C_6H_{14}$	1.4	0.4	2.3

Углеводороды при абиогенном синтезе могут формироваться на границе мантии и земной коры



Deep Carbon Fluxes



Работы ИФВД РАН
стимулировали
организацию крупного
международного проекта
“Deep Carbon
Observatory” с
финансированием в
сотни миллионов
долларов.



Deep Carbon Observatory

Achieving transformational understanding of carbon's chemical and biological roles in Earth's Interior

[Home](#)
[About Us](#)
[Science](#)
[News](#)
[Events](#)
[Sponsors](#)
[Resources](#)

Get Involved

Register for DCO Monthly Newsletter
<http://dco.gi.cw.edu/user/register>
 To join the DCO network and to receive periodic email notifications highlighting the progress of the DCO and participation opportunities, please **sign**
<http://dco.gi.cw.edu/user/register>
 up to receive DCO communications.

DCO Newsletters
<http://dco.gi.cw.edu/dconewsletters>
<http://dco.gi.cw.edu/dcofaq>

Announcements

Deep Hydrocarbon Research Opportunity:
IODP Expedition 337
<http://dco.gi.cw.edu/iodpexpedition>



The Alfred P. Sloan Foundation approves funding for the Deep Life **proposal**
<https://dco.gi.cw.edu/deeplifesloanprop>

Deep Carbon in the News

Researchers in the DCO Reservoirs & Fluxes Directorate studying the recent **volcanic eruption**
<http://dco.gi.cw.edu/resfluxnews> in Indonesia



More
<http://dco.gi.cw.edu/news/deep>



RESERVOIRS & FLUXES



ENERGY



PHYSICS & CHEMISTRY



DEEP LIFE

Upcoming Events

DCO Union Session
<http://dco.gi.cw.edu/december-2010-union-session-agu> and **Town Hall Meeting**
<http://dco.gi.cw.edu/december-2010-town-hall-agu> at AGU
 14-15 December 2010
 San Francisco, California



Carbon Cycling in the Deep Crustal Biosphere
18-23 January 2011
<http://dco.gi.cw.edu/january2011southafrica>
 University of the Free State, South Africa



See **here**
<http://dco.gi.cw.edu/events/upcoming-events> for more upcoming events

Past Events

Reaching the Mantle Frontier: Moho and Beyond, A Three-Day Workshop Co-Sponsored by IODP and DCO
9-11 September 2010
<http://dco.gi.cw.edu/september2010mohoworkshop>
 Broad Branch Road Campus, Carnegie Institution of Washington



What is the Deep Carbon Observatory?

The Deep Carbon Observatory (DCO) is a multidisciplinary, international initiative dedicated to achieving a transformational understanding of Earth's deep carbon cycle, including its poorly constrained reservoirs and fluxes, the unknown role of deep biology, and unexplored influences of the deep carbon cycle on critical societal concerns related to energy, environment and climate.

Frequently Asked Questions about the DCO <http://dco.gi.cw.edu/faq>

Science Highlights

Microbiology of the Deep Ocean Crust

A recent paper **Mason et al., PLoS ONE 5, e15399 (2010)**
<http://www.plosone.org/article/citation?list.action=journaldoi=6ADBFD6D43C706FFF182A3884328F10B&mbp=017&articleId=10.1371%2Fjournal.pone.0015399> reports—for the first time—microbiological data from the gabbroic layers of the ocean crust, up to 1,300 meters below the seafloor. The samples for these analyses were obtained from the Integrated Ocean Drilling Program Expeditions 304 and 305 to the Atlantis Massif near the Mid-Atlantic Ridge. **Read more**
<http://dco.gi.cw.edu/first-investigation-microbiology-ocean-crust>



Novel Carbon Structures

Although pure carbon expresses itself in diverse forms—including graphite, diamond, fullerenes, and graphene—the structure of an unusual superhard form of graphite created in high-pressure experiments in 2003 has remained elusive. Two teams of theorists with independent lines of

Спасибо за внимание

International Executive
Committee

**John Baross, University
of Washington, USA**

**Taras Bryndzia, Shell
Oil Company, USA**

**Rixiang Zhu, Chinese
Academy of Science,
China**

**Vincent Courtilot,
Institut de Physique du
Globe de Paris, France**

**Adrian Jones,
University College
London, UK**

**Barbara Sherwood
Lollar, University of
Toronto, Canada**

**Eiji Ohtani, Tohoku
University, Japan**

**Sergei Stishov, Russian
Academy of Sciences,
Russia**



*Front Row - Adrian Jones, Connie Bertka, Taras Bryndzia, Barbara Sherwood Lollar, Robert Hazen
Back Row- John Baross, Sergei Stishov, Russell Hemley, Eiji Ohtani, Yingwei Fei, Claude Jaupard*