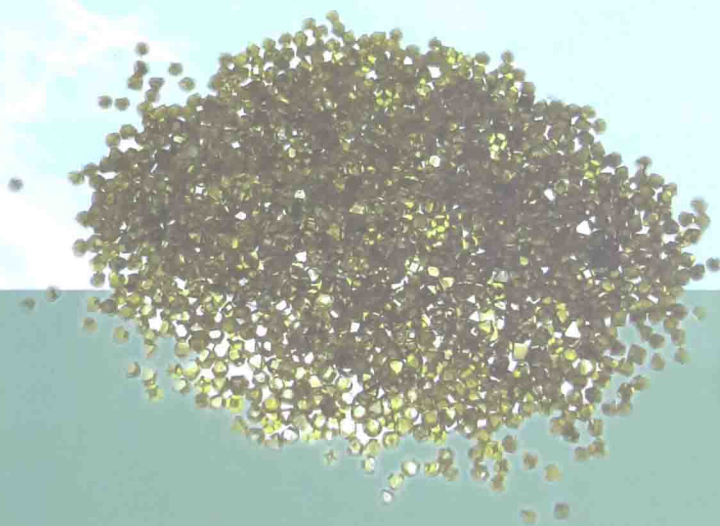


金刚石 生长基础

郝兆印 贾 攀 卢灿华



吉林大学出版社
JILIN UNIVERSITY PRESS

金刚石生长基础

郝兆印 贾 攀 卢灿华

吉林大学出版社

内容简介

本书论述了高温高压生长金刚石的有关理论与技术。涉及金刚石晶体结构与特性，生长金刚石的原料石墨、催化剂合金的结构与特性，高压密封材料的特性与结构，高温高压石墨-金刚石转变的机制讨论等。适合金刚石行业的人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

金刚石生长基础 / 郝兆印, 贾攀, 卢灿华编著.

—长春: 吉林大学出版社, 2012. 2

ISBN 978 - 7 - 5601 - 8126 - 4

I. ①金… II. ①郝… ②贾… ③卢… III. ①金刚石—人工合成—教材 IV. ①TQ164. 8

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 014473 号

书 名: 金刚石生长基础

作 者: 郝兆印 贾 攀 卢灿华

责任编辑、责任校对: 唐万新

吉林大学出版社出版、发行

开本: 787 × 1092 毫米 1/16

印张: 15.75 字数: 355 千字

ISBN 978 - 7 - 5601 - 8126 - 4

封面设计: 孙群

长春新华印刷集团有限公司 印刷

2012 年 2 月 第 1 版

2012 年 2 月 第 1 次印刷

定价: 48.00 元

版权所有 翻印必究

社址: 长春市明德路 501 号 邮编: 130021

发行部电话: 0431 - 89580026/28/29

网址: <http://www.jlup.com.cn>

E-mail: jlup@mail.jlu.edu.cn

本书由

吉林大学超硬材料国家重点实验室
中南钻石股份有限公司

资助出版

作者简介

郝兆印

吉林大学超硬材料国家重点实验室 教授
长期从事高温高压生长金刚石晶体研究。

贾 攀

中南钻石股份有限公司 研究员级高级工程师
长期从事高温高压生长金刚石及相关材料研究。

卢灿华

中南钻石股份有限公司 研究员级高级工程师
长期从事高温高压生长金刚石及相关材料研究。

序

《金刚石生长基础》是《人工合成金刚石》一书的充实与补充。本书详细论述了高温高压条件下石墨向金刚石转变过程涉及到的一系列材料的结构与性质和若干理论问题。这是本书有别于其他书籍的特色之处。

吉林大学在上个世纪 60 年代,就开展了高温高压的研究。在老一辈学者苟清泉教授带领下,开展了高温高压下物质的原子间相互作用和状态方程的研究。70 年代初期,建立了我国高校第一个高压实验室,开展了高压下岩石的状态方程研究,为核爆炸防护工程做了重要的基础工作。同时,开始了对人造金刚石合成机理和合成金刚石专用石墨材料与触媒材料的系统研究。1973 年在吉林大学召开了第一届人造金刚石专用石墨材料研讨会。苟清泉教授带领吴绍曾、曾琴、熊大和、王立中和我,通过对金刚石生产实践的深入了解,编写了我国金刚石行业第一本专著《人造金刚石》,并于 1975 由科学出版社出版。这是为由一机部在贵阳第六砂轮厂主办的为期三个月的首届全国“人造金刚石学习班”编写的教材。苟先生亲自赴贵阳讲授他提出的高温高压下石墨变成金刚石的结构转化机理、石墨和触媒的优选原则以及金刚石聚晶的粘接机理。曾琴、熊大和与我参加了讲课和指导学生进行科学实验。学员们初步尝试了理论与实践相结合的乐趣,讲课很受欢迎。之后,吉林大学派出多名教师到全国各地金刚石厂、有关科研院所讲授金刚石的合成机理与工艺设计。1975 年安装了六面顶压机,开始系统性研究金刚石单晶的生长。1976—1977 吉林大学举办了为期一年的全国第一个“人造金刚石进修班”,许多企业、研究所派出了技术骨干学习。这些工作对推动我国金刚石行业的发展,起到了重要作用。与此同时,还举办了为期三年的“人造金刚石研究生班”、“高压物理研究生班”,招收凝聚态物理专业硕士、博士研究生。吉林大学培养的超硬材料行业高端人才,包括一大批硕士、博士长期工作在超硬材料的第一线,为我国超硬材料的辉煌贡献着自己的才智。这期间又出版了《高压科学与技术》(邹广田、王立中)、《立方氮化硼》(张铁臣、邹广田)、《人工合成金刚石》(郝兆印、陈宇飞、邹广田),这三本书对金刚石的从业人员有很大启发。

吉林大学长期从事超高压物理、超硬与多功能高压相材料研究,在这些领域中做了系统的创造性工作。1982 年实现了百万大气压下物质性质的研究,先后建立了原位高压拉曼光谱、瞬态荧光光谱、红外光谱、布里渊散射、X 光衍射和高压电学测量等多种超高压原位测量技术,对多种物质的高压特性进行了深入系统的研究,并取得了国际公认的创新成果。

进入新的世纪,吉林大学在超硬材料方面的工作发展到了一个更高的层次。在高温高压宝石级金刚石的生长、气相生长金刚石薄膜、气相生长金刚石单晶、金刚石及立方氮化硼复合片、金刚石和立方氮化硼工具等多方面都有极大的进展。从量子力学第一原理出发进行的新性能超硬材料的理论设计与实验,为国内超硬材料的发展开拓了新方向。

2011年我国金刚石单晶的产量可达100亿克拉，是全球第一金刚石单晶生产大国。但是，在高品质金刚石大单晶、高性能复合材料、多功能高精度加工工具等诸多方面，目前仍然是我国的弱项，需加强高等院校、科研单位、企业之间的深入广泛合作，实现我国金刚石行业的重大突破。

近些年，我国虽有多本超硬材料专著问世，这本书有自己的特色。其中关于粉状石墨的特性与结构、催化剂合金的配比原则、叶蜡石的密封性等章节是作者多年研究的结晶，相信对金刚石行业专业人员具有参考作用。

我在这里特别要感谢苟清泉先生对高压科学和超硬材料领域的杰出贡献，和对我们的教育之恩。苟先生是人造金刚石的结构转化理论的创建者。他的理论及石墨、触媒的优选原则深受时任美国GE公司人造金刚石专家宋健民博士赞赏，非常符合他们的实践经验，对他们有指导作用。后来，苟先生被聘为美国金刚石钻头专业公司——克里斯坦森公司的高级科学顾问。这充分表明，苟先生在国际金刚石界的崇高地位。他为中国争了光。

苟先生不幸与2011年6月30日仙逝，我们深切怀念他。



于吉林大学超硬材料国家重点实验室

前 言

金刚石已经成为我们生活中的一个重要组成部分，如新婚夫妇会选择洁白的钻石作为爱情永恒的见证。而人造金刚石已成为机械、石材加工、国防等众多领域中必不可少的元素。我国已成为世界上人造金刚石产量的第一大国，超硬材料在我国已形成一定规模的高新技术产业，并有众多的从业人员。本书是写给金刚石从业人员的基础教程。

刚进入金刚石行业的人员，会惊异于黑色光泽石墨与催化剂合金混合，经高温高压，变成金光闪烁的金刚石晶体。有一些疑难问题需要解答，比如：

①石墨为什么有金属光泽，工业金刚石为什么是金黄色。

②叶蜡石为什么会有密封性能，如何选择叶蜡石矿物。叶蜡石密封边结构产生了何种变化。

③金刚石生长要求温度场、压力场均匀。晶体生长需要驱动力，即温度差，这个温度差如何获得。

④催化剂是 Fe-Ni 合金，为什么将使用几十年的 Ni-Mn-Co 合金淘汰？为什么是 Fe-Ni、而不是 Fe-Mn？

⑤生长金刚石工艺有台阶压力，为什么设置台阶压力，台阶压力高低如何确定，台阶压力时间长短如何确定。

诸如此类问题，他们希望得到明确答案。

经近半个世纪不懈努力，在不断交流经验、互相学习的过程中，我国成为了工业金刚石生产第一大国。六面顶压机设计与制造，WC 压头制造与应用，大腔体开发，粉末合金与粉末石墨应用，间接加热技术，粉末柱体真空还原技术，非恒定压力、功率加压加热方式，导电钢碗设计等，都是在互相学习、交流中取得的进展。借鉴两面顶压机相关技术，并成功移植到六面顶压机技术中。正是这些点点滴滴技术进步，成就了我国金刚石行业的发展，受到了全球的瞩目。在技术上，已成功实现了“国产六面顶压机的大型化与压力、功率、电流的计算机控制同步进行”。从根本上改变了我国超硬材料科研、生成落后面貌。

回顾我国超硬材料走过的历程，分享金刚石行业今日的辉煌成果，应当感谢设计、制造了六面顶压机的人们；感谢设计、制造了 WC 压头、小斜边和钢环的人们；感谢采用粉状叶蜡石的人们；感谢将两面顶压机生长金刚石技术消化、吸收移植到六面顶压机上的人们；感谢发表了大量指导我们一路前行的论文的学者们；感谢将我国金刚石行业发展壮大的企业家们；感谢多年来组织各种行业会议的朋友们，这些会议为思想和技术交流搭建了重要平台，对行业发展功不可没。我国金刚石行业从设备制造、原材料开发、工艺技术，工具制造等方面都有了独立自主的体系，所有这一切是我国金刚石行业向更高阶段发展的根基。借此机会，再一次深情地说：谢谢你们，金刚石行业的朋友们！

我国学者对金刚石生长的研究一直没有间断，发表了许多有见解的文章。为使初学

者了解这些创新思想，书中尽量引用国内学者的论述。书中的引用，难免挂一漏万。如有相关文献及论述漏引或引用不当，请各位专家、学者指正。

技术人员和工人对金刚石生长技术希望有深入了解。制定工艺的技术人员常年在车间忙碌，工人三班轮换，他们很少有时时间和精力从国内外浩瀚的文献中查阅相关技术资料。他们的技术水平决定金刚石质量，决定工厂效益，这一切最终决定我国金刚石产品整体质量水平。本书旨在为他们提供帮助，书中主要是文字叙述，并配有大量图片，特别注意到许多技术细节的可操作性。如果阅读人员高中毕业，已经有了生长金刚石实际经验，阅读本书没有困难。考虑到阅读人员中会有一些技术人员，书中提供一些物理、化学基础内容，对他们进一步提高有帮助。

研究高温高压生长金刚石相关问题，涉及物理、化学、机械、材料、矿物诸多学科，书中错误难免，敬请指正。高温高压生长金刚石是技术也是科学。作者深知本书对很多理论与实践问题没有给出满意的说明，比如高温高压石墨通过合金的催化作用，向金刚石转化的许多细节等。高温高压生长金刚石理论与技术，与经济效益紧密相关，需要长期研究下去。金刚石行业发展历程表明，理论上的突破必将带来巨大的经济效益。

在本书成稿过程中，马建家绘制了部分图表，在此表示衷心感谢。

作者

2011.8

目 录

第一章 金刚石	(1)
引 言	(1)
1.1 原子的电子结构	(2)
1.2 化学键的类型	(4)
1.3 金刚石晶体结构	(5)
1.3.1 杂化和价态	(5)
1.3.2 金刚石晶体结构	(6)
1.3.3 金刚石晶格的空间群	(7)
1.3.4 金刚石晶格参数	(9)
1.3.5 金刚石晶格面网密度	(9)
1.3.6 金刚石单晶晶面夹角	(9)
1.4 金刚石的性质	(10)
1.4.1 金刚石物理性质	(10)
1.4.2 金刚石化学性质	(13)
1.4.3 金刚石晶体的形貌	(14)
1.4.4 金刚石的分类	(15)
1.4.5 金刚石晶体 ESR 测量	(18)
1.4.6 金刚石颜色	(20)
1.4.7 金刚石烧蚀试验	(24)
1.5 关于硬度的讨论	(25)
1.5.1 材料硬度的分类	(25)
1.5.2 影响材料硬度的因素	(27)
1.6 金刚石晶体的磁性质	(28)
1.7 金刚石晶体内部杂质与表面的位错	(29)
1.7.1 金刚石晶体内的纳米杂质	(30)
1.7.2 莫尔条纹	(30)
1.7.3 金刚石表面缺陷	(31)
1.8 金刚石表面镀钛层的结构	(32)
1.8.1 金刚石表面镀钛层的晶体结构	(32)
1.8.2 金刚石表面镀钛层的织构现象	(33)
小结	(33)
第二章 石墨	(35)
引言	(35)

2.1	石墨	(35)
2.1.1	天然石墨的分类	(35)
2.1.2	天然石墨的提纯	(36)
2.1.3	人造碳材料的石墨化过程	(37)
2.2	石墨的晶体结构	(38)
2.2.1	石墨晶体的六方结构	(39)
2.2.2	石墨晶体的菱方结构	(40)
2.3	石墨的性质	(40)
2.3.1	密度	(40)
2.3.2	电阻	(41)
2.3.3	熔点、沸点	(41)
2.3.4	吸热量	(42)
2.3.5	热膨胀系数	(42)
2.3.6	热导率	(42)
2.4	石墨在金刚石生长过程中的功能	(43)
2.4.1	石墨——组成金刚石的唯一原料	(43)
2.4.2	石墨——腔内晶体生长驱动力的来源	(43)
2.4.3	石墨——高压腔内的一种受压介质	(45)
2.5	石墨化程度的讨论	(45)
2.5.1	石墨化度	(46)
2.5.2	石墨化度公式	(47)
2.5.3	石墨化指数	(47)
2.5.4	关于石墨化度公式的评价	(48)
2.5.5	X 射线衍射法测定多晶石墨中晶粒	(50)
2.5.6	人造多晶石墨测量结果	(50)
2.6	粉状石墨	(50)
2.6.1	粉状石墨晶体结构 X 射线测量	(50)
2.6.2	粉状石墨微晶颗粒尺寸	(51)
2.6.3	粉状石墨中的杂质	(51)
2.7	拉曼光谱测量石墨材料	(52)
2.8	石墨颗粒表面活性试验	(54)
	小结	(55)
第三章	催化剂合金	(56)
	引言	(56)
3.1	生长金刚石催化剂合金简要回顾	(57)
3.2	金属键与金属结构	(59)
3.3	液态金属的结构特征	(60)
3.4	液态金属的性质	(61)
3.4.1	密度	(61)

3.4.2	黏度	(62)
3.4.3	扩散系数	(62)
3.5	Mn、Fe、Co、Ni 的物理化学性质	(64)
3.5.1	Mn 的性质	(64)
3.5.2	Fe 的性质	(64)
3.5.3	Co 的性质	(66)
3.5.4	Ni 的性质	(66)
3.6	Fe-Ni、Fe-Mn 合金相变特性	(66)
3.7	Mn、Fe、Co、Ni 的高压高温相图	(67)
3.8	催化剂合金的晶体结构	(68)
3.9	催化剂合金熔点测量	(69)
3.10	Fe、Co、Ni 及其合金的磁性	(70)
3.10.1	Fe、Co、Ni 单质的磁性	(70)
3.10.2	Fe、Ni、Co 合金磁性的特点	(73)
3.10.3	Fe-Ni 合金居里点随温度的变化	(74)
3.10.4	Fe 中 Ni、Co 成分的变化对合金磁矩的影响	(74)
3.10.5	催化剂合金的磁性测量	(74)
3.11	合金的电阻	(76)
3.11.1	Fe-Ni 合金电阻的变化	(76)
3.11.2	Fe-C 电阻率	(76)
3.12	金属与碳	(77)
3.12.1	金属加碳的熔化	(77)
3.12.2	合金熔点与生长金刚石温度的关系	(78)
3.13	Fe-C 的结构	(79)
3.13.1	奥氏体	(79)
3.13.2	铁素体	(80)
3.13.3	Fe ₃ C 的结构	(80)
3.14	Fe 基催化剂合金	(83)
3.14.1	Ni 基到 Fe 基合金	(83)
3.14.2	Fe 基合金做催化剂生长金刚石研究	(84)
3.15	催化剂合金的配比原则	(86)
3.16	Si 对 C 活度的影响	(92)
3.17	稀土元素对催化剂合金性能的影响	(93)
3.18	Mössbauer 测量结果的讨论	(96)
3.18.1	高温高压条件下的渗碳实验	(96)
3.18.2	Mössbauer 测量	(96)
3.18.3	Mössbauer 测量结果	(98)
3.19	金属膜	(100)
3.19.1	Fe-Ni 合金做催化剂的金属膜形貌	(100)

3.19.2	金属膜断面的形貌	(102)
3.19.3	金属膜表面与断面成分分析	(103)
3.19.4	金属膜表面与断面结构分析	(104)
3.19.5	金属膜断面的 Auger 谱技术测量	(106)
3.20	粉状催化剂合金	(107)
3.20.1	粉状合金与片状合金	(107)
3.20.2	粉状合金的制作	(108)
3.20.3	雾化粉末合金的性能	(109)
3.20.4	减少雾化粉末表面氧杂质的方法	(111)
	小结	(111)
第四章	高压密封	(112)
	引言	(112)
4.1	高压密封	(112)
4.1.1	六面顶与两面顶的密封	(112)
4.1.2	叶蜡石岩石	(114)
4.1.3	叶蜡石岩石中的杂质	(116)
4.1.4	高温高压下叶蜡石岩石黏弹黏塑性	(119)
4.1.5	高温高压下叶蜡石岩石的应变	(120)
4.1.6	叶蜡石岩石中的水	(123)
4.2	叶蜡石晶体结构	(125)
4.2.1	层状硅酸盐的晶体结构	(125)
4.2.2	鲍林规则与硅铝酸盐的结构	(126)
4.2.3	叶蜡石的晶体结构	(128)
4.2.4	叶蜡石岩石的结构	(129)
4.2.5	叶蜡石红外吸收光谱	(133)
4.2.6	叶蜡石烘烤后晶体结构的变化	(134)
4.3	高温高压叶蜡石的相变	(136)
4.3.1	密封边的晶体结构	(136)
4.3.2	高温高压后叶蜡石的结构	(139)
4.3.3	高温高压后叶蜡石的 Raman 光谱	(141)
4.3.4	高温高压后叶蜡石断面扫描电镜观测	(141)
4.4	白云石岩石	(142)
4.4.1	白云石岩石的结构	(143)
4.4.2	白云石的热分析	(143)
4.4.3	高温高压白云石成分的变化	(144)
4.4.4	高温高压后白云石的结构	(144)
4.4.5	高温高压前后白云石的 Raman 光谱	(145)
4.5	六面顶压机压头的简单讨论	(146)
4.5.1	压头尺寸的讨论	(146)

4.5.2 压头脆性	(148)
4.6 压头断裂声音的数字化	(149)
4.6.1 声音	(149)
4.6.2 压头断裂声音的采集	(149)
4.6.3 压头断裂声音的频谱	(149)
4.7 导电钢圈 Mg_2TiO_4 保温介质	(150)
4.7.1 导电钢圈的设计	(150)
4.7.2 关于水玻璃	(150)
4.7.3 叶蜡石的烘烤	(151)
4.7.4 关于 Mg_2TiO_4	(152)
小结	(154)
第五章 石墨-金刚石转变	(156)
引言	(156)
5.1 温度、压力对石墨结构的影响	(158)
5.2 相图	(160)
5.2.1 碳的相图	(160)
5.2.2 高压 Ni-C 相图	(160)
5.2.3 高压 Fe-C 相图	(161)
5.2.4 金刚石生长“V”形区	(161)
5.2.5 Fe-(Ni)Co-C 三元相图	(163)
5.2.6 高温高压在位测量结果	(164)
5.3 石墨-金刚石转变	(165)
5.3.1 石墨-金刚石转变为一级相变	(165)
5.3.2 石墨-金刚石相平衡线的热力学计算	(166)
5.3.3 石墨-金刚石转变为重构型相变	(167)
5.3.4 石墨-金刚石转变为非均匀相变	(168)
5.3.5 石墨-金刚石转变为复相催化反应	(169)
5.3.6 能带论与石墨-金刚石催化过程	(170)
5.3.7 配位场与石墨-金刚石催化过程	(172)
5.4 $\text{Fe}_3\text{C} \Rightarrow \text{C}(\text{金刚石}) + 3\gamma\text{-Fe}$ 的热力学分析	(174)
5.5 FeC 化合物生长金刚石的实验	(175)
小结	(177)
第六章 苟氏金刚石转变机理简介	(178)
引言	(178)
6.1 苟氏金刚石转化机理	(179)
6.1.1 石墨晶体的两种结构	(179)
6.1.2 石墨到金刚石的直接转化	(179)
6.1.3 有催化剂存在时石墨向金刚石的转变	(180)
6.1.4 催化剂与石墨的优选原则	(180)

6.2 石墨表面的金刚石膜对生长金刚石的影响	(182)
小结	(183)
第七章 石墨再结晶形态	(184)
引言	(184)
7.1 高温高压条件下石墨的再结晶现象	(185)
7.1.1 多晶石墨的微结构	(185)
7.1.2 未进入催化剂中石墨的结晶形态	(187)
7.1.3 催化剂合金中碳的浓度梯度	(187)
7.1.4 多晶石墨在催化剂合金内的结晶形态	(190)
7.2 温度、压力对再结晶石墨形态的影响	(190)
7.2.1 温度对再结晶石墨形态的影响	(190)
7.2.2 压力对再结晶石墨形态的影响	(192)
7.2.3 靠近金属膜的石墨形貌	(194)
7.2.4 成核阶段压力、温度对再结晶石墨形态的影响	(194)
7.3 石墨-合金界面	(196)
7.3.1 石墨与合金相互渗透	(196)
7.3.2 金刚石晶体的生长	(198)
7.3.3 石墨形态变化的启示	(201)
小结	(201)
第八章 金刚石单晶生长技术	(202)
引言	(202)
8.1 金刚石生长速度讨论	(202)
8.2 稳定的温度、压力场的获得	(206)
8.2.1 热量的传递	(206)
8.2.2 六面顶压机高压腔体内压力、温度分布	(209)
8.2.3 均匀温度、压力场的获得	(210)
8.3 工艺参数的选择	(212)
8.3.1 提前加热的原因	(213)
8.3.2 加热压力的选择	(213)
8.3.3 暂停压力的选择	(214)
8.3.4 暂停压力时间的确定	(214)
8.3.5 电流与压力	(214)
小结	(215)
附录 提 纯	(216)
1 电解	(216)
1.1 电解原理简介	(216)
1.2 电解液参数对电解过程的影响	(217)
1.3 摇床工作原理简介	(218)
1.4 电解泥球磨工艺参数	(219)

2 化学反应方程式	(221)
2.1 泡稀硝酸的反应方程	(221)
2.2 高氯酸氧化石墨法反应方程式	(221)
2.3 硫酸-硝酸(或硝酸钠)反应方程式	(222)
2.4 氧化法原理	(222)
2.5 去除叶蜡石反应方程式	(222)
2.6 氯气的治理反应方程式	(223)
2.7 氮氧化物的治理反应方程式	(223)
参考文献	(224)
后 记	(234)

第一章 金刚石

引 言

用石墨和 Fe、Co、Ni 等金属或它们的合金做催化剂，高温高压生长金刚石晶体，已是一个产业。从工业生产角度讨论技术问题，是为获得晶体形状完整规则、颜色浅黄、透明度高、颗粒尺寸大、单次产量高的金刚石。这涉及高温高压设备设计与制造、原材料选择、组装元件设计、加压加热方式、提纯及选型、分级等，每一个技术环节都对金刚石产量、质量有影响。刚进入金刚石工业生产领域的初学者，学会处理实际问题，至关重要。

用 Fe、Ni 等催化剂金属与石墨做原料生长金刚石晶体，在高温高压圆柱形腔体内的变化，仅涉及相关材料原子价电子(原子核最外层电子)变化。材料原子外层电子状态发生变化，导致原子之间化学键的改变，从而引起原子排列变化，这个过程涉及化学键的断裂与重排。因此，需要了解：

1. 高压高温生长金刚石晶体全过程涉及到哪些原子？

2. 金刚石晶体生长过程是极端条件下相变过程，涉及到晶体构型(原子排列)、原子外层电子(价电子)重新分布(价态改变、能量分布和空间分布)、原子间相互作用(化学键)性质。需要知道相变前相关原子外层电子状态及相变后价电子改变。

3. 高温高压金刚石生长涉及的原材料很多是晶体，比如原材料石墨、催化剂金属(Fe、Co、Ni 或者它们的合金等)、传压介质(叶蜡石、白云石)等都是多晶体。产物金刚石是单晶体。石墨-金刚石转变涉及到的原材料，用表 1-1 概括。

表 1-1 与金刚石生长相关的主要材料

材料	原子	晶体	用途
石墨	C	多晶体	原料
金属	Mn、Fe、Co、Ni(合金)	多晶体	催化剂
叶蜡石 白云石	Si、Al、O、H Ca、Mg、C、O	多晶体	传压、密封、保温
金刚石	C	单晶体	产品
其他	B、N、O、S		主要杂质

高温高压生长金刚石涉及的原子主要有 14 个：H、B、C、N、O、S、Ca、Mg、Al、Si、Mn、Fe、Co、Ni。石墨向金刚石转变，是各相关原子最外层电子参与反应，内层电子态变化小，了解原子电子壳层结构很重要。原子核外电子排列分层次，电子能量最低，离原子核最近，为第一层；依次为 2、3、4 层等。每一个层还分亚层，具体见表 1-2。表 1-2 给出的电子数目是每个轨道(每一层)可以容纳电子最大数目，绝大多数原子