

人造金刚石合成机理研究

苟 清 泉 著

成都科技大学出版社

内 容 提 要

本书是根据作者多年来从事人造金刚石合成机理研究发表的论文整理写成的专著。全书共有四章，即高温高压下石墨变金刚石的结构转化机理；含硼黑金刚石的结构与特殊性能；人造金刚石聚晶的粘结机理；高温高压下石墨变金刚石的结构转化率。

本书可供从事人造金刚石生产和科研工作的科技人员和有关专业的师生参考。

人造金刚石合成机理研究

药 清 泉 著

成都科技大学出版社出版

四川省新华书店发行

西南冶金测绘队制印厂印刷

开本 850×1168 毫米 $1/32$ 插页1 印张2

1986年5月第1版 1986年5月第1次印刷

印数1—2,000 字数54,000

统一书号：13475·1 定价：0.79元

序 言

我读过苟清泉教授很多人造金刚石方面的研究著作。我在今年访问中国时也与他讨论过这方面的问题；并邀请他到我们公司进行过这方面的指导和讲学。苟教授在人造金刚石方面的深厚造诣已使他成为这个领域里著名的权威。他发表了很多创造性的理论，解释了过去文献中报导的在人造金刚石合成中观测到的很多迷惑难解的现象。其实，他的理论不但能解释已观测到的结果，而且预言了很多未知的成果。这些预言有很多已被后来的实验结果所证实。

苟教授确实是人造金刚石合成研究这个重要领域里国际知名的权威。他对于人造金刚石合成本质的研究所作的贡献，已大大促进了中国和国外这方面技术的进展。我强烈地相信，如果他能把他所发表的论文整理成一本专著，则他的贡献将会被全世界更加广泛地认识到。我很愿意向中国的出版社推荐出版他这本书，并愿意把这本书译成英文出版，使西方读者也能从他的贡献中得到益处。

我从事人造金刚石合成工业已超过八年之久。我从1977年到1984年在G. E. 公司负责人造金刚石的合成技术工作；并生产过50吨以上的人造金刚石。我现在是诺顿克里斯坦森公司超硬材料研究实验室的经理。并说明一下，G. E. 公司是世界上最大的人造金刚石生产厂家。而诺顿公司（以及它的子公司克里斯坦森公司）是世界上最大的金刚石工具厂家。

关于出版苟教授这本专著，如需要进一步了解他在人造金刚石研究方面的声誉和成就，我将十分乐于提供有关进一步的情况。

诺顿克里斯坦森公司超硬材料研究室经理

宋健民 博士

1985年8月6日于美国盐湖城

前 言

这本专著是根据作者十多年来从事人造金刚石合成机理研究取得的成果而写成的。

自从人们发现石墨和金刚石都是由碳组成的以后，就对如何使石墨向金刚石转化发生了极大的兴趣，大力探索以石墨为原料来合成金刚石。经过长期的探索，终于在本世纪五十年代，在高温高压条件下，利用某些熔融金属触媒，成功地实现了由石墨结构向金刚石结构的转化。

石墨为什么在高温高压条件下，在金属触媒的作用下，能转变成金刚石呢？这个问题过去长期没有搞清楚，致使金刚石的合成工作长期缺乏比较成熟的理论指导。为了更好地开展人造金刚石工作，必须在实践的基础上总结经验，加强理论研究，找出规律，用以更好地指导实验。为此目的，本书作者从1971年起开始了人造金刚石合成机理的研究。1972年9月曾把这方面的研究成果在北京152厂等单位报告过，并于1973年6月在一机部于郑州召开的“人造金刚石晶体生长机理和提高质量座谈会”上报告，引起了广泛的兴趣。后又写成“高温高压下石墨变金刚石的结构转化机理”的论文，文中提出了一个石墨变金刚石的微观机理模型，并以此为基础，还提出了石墨与触媒的优选原则，对指导合成金刚石的实践有帮助。此论文发表于《吉林大学学报》自然科学版1974年2期。本书的第一章就是根据这篇论文写成的。

1974年我国一些单位先后应用新发展起来的新石墨与新触媒合成出了含硼黑色金刚石，发现具有耐热性较高的特性。经过我进行理论分析，发现只要金刚石表面的碳原子被硼原子置换，变成硼皮金刚石，就可大大提高耐热性（抗氧化性），并还预言具有好的化学惰性，不易与钢铁表面发生亲合作用。这些理论结果与预言，

后来为实践所证实。关于这方面的理论分析，我后来写出了题为“含硼黑金刚石的结构与合成机理及其特殊性能的探讨”的论文，发表于《吉林大学学报》自然科学版1978年2期，本书的第二章就是根据这篇论文写成的。

一般人工合成的金刚石，粒度还比较小，还不能完全满足于制造钻头及其他制品之用。但人工合成大颗粒单晶比较困难，成本很高，不能生产。因此，十多年来，国内外十分注意大颗粒人造金刚石聚晶的研制。所谓聚晶就是由许多十分细小的金刚石微粒，加上适当的粘结剂，在高温高压下烧结而成的。目前国内外正在用金刚石聚晶制成各种金刚石工具，如钻头、修整笔、拉丝模及其他切削、磨削工具。如何合成出耐磨性、耐热性及韧性好的聚晶？过去也缺乏理论指导，主要靠经验探索。要想合成出性能比较好的聚晶，与粘结剂的选择很有关系。因此，研究人造金刚石聚晶的粘结机理，指出粘结剂的选择原则，就很有必要。我于1978年研究了这方面的问题，提出了粘结剂的选择原则，写出了一篇论文，发表于《人造金刚石与砂轮》1979年第1期。本书的第三章就是根据这篇论文写成的。

我在上述第一篇论文中提出的石墨在高温高压下转化为金刚石的微观机理模型，主要还是定性的。我后来又根据这个转化机理模型，应用晶体中原子热振动与移动的统计方法，从定量上估算石墨向金刚石转化的速率与温度和压力的关系，推导出了计算公式。实例的计算结果与实验相符，从而证明了我过去提出的转化机理是合理的。我于1982年写成了题为“高温高压下石墨变金刚石的结构转化率”的论文，发表于《成都科技大学学报》1983年第1期。本书的第四章就是根据这篇论文写成的。

以上这些理论成果和预言，有很多已被在我指导下进行实验研究的教师和学生从实验上加以验证。十多年来，不少教师、进修学员及研究生和大学生在我的理论的指导下对人造金刚石的合成进行了大量的实验研究。在合成工艺的改进上，产品质量的提高上，新产品的试制上，都取得了显著的进展。由于这些工作是分散

在很多单位进行的,结果大部分都没有发表,故未搜集在本书中。例如,我们1976年最早采用含硼黑色金刚石制作聚晶,研制成功了磨耗比及抗氧化温度都比较高的聚晶,用于制成石油钻头,在四川打深井取得了良好效果。一位研究生在我的指导下,于1981年根据我提出的聚晶金刚石的粘结机理及硼皮金刚石能够耐高温的理论,以人造黄金金刚石粉为原料,使用含钴的溶液,硅及硼做粘结剂,同时采用高堆积密度金刚石粒度配比,合成出了性能优良的大颗粒聚晶,耐磨性与抗氧化性能有显著提高,而且生产成本有所下降,取得了显著的经济效益。另一位研究生在我的指导下,于1981年以我提出的人造金刚石合成机理为指导,选择新石墨和新触媒,将国外引进的两面顶压机合成磨料级工艺,改变成粗颗粒合成工艺,成功地合成出了单产较高的粗颗粒单晶金刚石,可以投产,质量也较高,可用于制造切割锯片和钻头等。有几位教师在我的理论指导下,最近成功地合成出了浅色和无色透明的硼皮金刚石,抗氧化性能也有明显的提高。以上这些用理论指导实践所取得的结果,待以后有机会时再进行总结,加以介绍。

以上这些理论,我曾在国内历次召开的金刚石会议上和很多研究单位及工厂中报告过,也曾多次向历届的研究生、进修生、讲习班的学员讲过。在大家共同努力下,进行了很多探讨和应用性的研究,逐步使理论研究更加充实和深入。当然,这方面的工作,以后还要继续进行。

由于以上四篇论文是用中文写的,分散发表在国内的三个学报上,不易为国外的同行学者看到。国外学者知道我的理论大约是从1979年开始的。因为1979年我编著的《固体物理学简明教程》出版了,其中有一章讲了超硬材料,引用了我第一篇论文中的理论。当年,这本教材流传到了美国、日本及法国,引起了国外一些同行学者很大的兴趣。1980年国际高压科学技术协会秘书长 B.Vodar 教授专程从法国来到我在吉林大学主持的高压合成实验室参观访问,进行了一些学术讨论,对我们的工作有了比较深刻的印象。由于他

和其他美国学者的推荐，1981年及1983年分别在瑞典及美国召开的国际高压科学技术会议都邀请我去作学术报告，都因临时有事未去成，失去了两次与各国学者交流的机会，感到很歉然。

1985年8月上旬，我应美国诺顿克里斯坦森公司金刚石技术中心的邀请，去作了人造金刚石合成机理方面的研究报告，把我四篇有关这方面的论文都作了比较详细的介绍，受到了他们热情的赞扬。该公司的研究经理宋健民博士极力主张把我这方面的论文整理写成专著，并翻译成英文出版。本书序言实际上就是他写的推荐意见。我们大学的校长王建华教授得知此事后，指定我校出版社优先安排我这本书的印刷和出版。这本书之所以能较快地出版，是与他们两位的促进和支持分不开的。我对他们表示衷心的感谢。

出版这本书的主要目的，是希望更广泛的范围内得到交流，进一步和同行专家们进行探讨，使这方面研究不断深入下去。

苟清泉

1986年3月20日于成都科技大学

目 录

序言	(iii)
前言	(v)
第一章 高温高压下石墨变金刚石的结构转化机理	(1)
一、引言	(1)
二、石墨和金刚石的原子结构状况	(3)
三、无触媒作用时石墨变金刚石的结构转化机理	(7)
四、有触媒作用时石墨变金刚石的结构转化机理	(10)
五、触媒与石墨的优选原则	(15)
六、提高粒度和强度的途径	(17)
第二章 含硼黑金刚石的结构与特殊性能	(19)
一、含硼黑金刚石及聚晶的研制成功	(19)
二、含硼黑金刚石的结构及其合成机理	(22)
三、含硼黑金刚石特殊性能的理论分析	(26)
四、进一步巩固提高和发展新的超硬材料	(30)
第三章 人造金刚石聚晶的粘结机理	(32)
一、引言	(32)
二、表面间的粘合原理	(33)
三、人造金刚石聚晶的粘结机理	(35)
四、粘结剂的选择原则	(39)
第四章 高温高压下石墨变金刚石的结构转化率	(44)
一、引言	(44)

二、石墨和金刚石的晶体结构及相互转化模型.....	(45)
三、石墨变金刚石的直接转化率.....	(47)
四、有触媒作用时石墨变金刚石的直接转化率.....	(50)
五、计算实例.....	(50)
六、结论.....	(53)

第一章 高温高压下石墨变金刚石的 结构转化机理*

作者在本章中从客观事物内部矛盾的斗争及其在特定条件下可以相互转化这一基本观点出发,从分析石墨、金刚石和触媒物质三者的结构和原子间的相互作用入手,提出了一个高温高压下石墨变金刚石的结构转化机理。

作者论证,在一定条件下,石墨中碳原子的 sp^2 π 杂化状态可以转化为 sp^3 杂化状态,从而使石墨变成金刚石。这就是石墨具有在一定条件下可以转变成金刚石的内在矛盾性,也是结构转化机理的理论基础。由此出发,说明在一定条件下,石墨既可以通过溶解扩散过程,又可以通过直接转变过程转变成金刚石。并给出了在无触媒及有触媒作用的情况下,石墨转化为金刚石的微观机理图象;提出了如何选择触媒与石墨的指导原则;同时还提出了一个在目前生产金刚石常用的合成方法中,如何进一步提高晶粒度和强度的途径。

一、引言

自从人们发现石墨和金刚石都是由碳组成以后,就对如何使石墨向金刚石转化,发生了极大的兴趣,大力探索以石墨为原料来合

*本章的主要内容曾于1972年9月在北京152厂报告过^[1],并于1973年6月在一机部在郑州召开的“人造金刚石晶体生长机理和提高质量座谈会”上报告。后又写成论文发表予《吉林大学学报》自然科学版,1974, 2期。

成金刚石。经过长期的探索，终于在本世纪五十年代，在高温高压条件下，利用某些熔融金属触媒，成功地实现了由石墨结构向金刚石结构的转化。但是，在高温高压条件下和金属触媒的作用下，石墨是如何向金刚石转化的，这个结构转化机理问题过去长期没有搞清楚。

关于人造金刚石的合成机理，目前国际上比较流行的有溶剂说，催化说及固相转化说等。但是，这些学说都没有深入到微观机理的具体模型，有的作者在解释人造金刚石的合成机理时，甚至有意避开微观的具体过程，因而也就不能从本质上来进行说明，不能从理论上预言石墨转化为金刚石的一些规律性和如何有效地指导实践。

我们知道：“事物发展的根本原因，不是在事物的外部而是在事物的内部，在于事物内部的矛盾性。任何事物内部都有这种矛盾性，因此引起了事物的运动和发展。”（毛泽东语）。毫无疑问，石墨之所以能够在一定条件下转变成金刚石，是因为石墨的内部具有这个内在矛盾性。但是，无论是溶剂说、催化说还是固相转变说，都没有能接触到石墨变金刚石的这个内在矛盾性，因而只能局限在各自所观察到的个别现象的描述上。这些学说的倡导者们更没有注意到各自所观察到的现象之间的内在联系，而常常是各执己见，甚至出现了各学说之间的相互否定。本章的目的就是要从事物的内部矛盾、矛盾的斗争及其在特定条件下可以相互转化这一基本观点出发，从分析石墨、金刚石和触媒物质三者的结构和原子间的相互作用入手，提出一个高温高压下石墨变金刚石的结构转化机理。根据这样的机理，我们能够从理论上掌握一些从石墨转变成金刚石的规律性，从而对指导生产实践有所帮助。

我们研究的对象是石墨和金刚石，都是固体。它们的性质由其组成的原子结构及其相互作用力的性质决定。我们不但可以从碳原子的结构和它们的相互作用的观点出发，来分析石墨结构和金刚石结构的形成，而且还可以探讨，在高温高压条件下，石墨是如何变成金刚石的结构转化机理。

石墨到金刚石的转化过程，有两种可能的方式：一种是石墨先

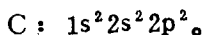
分裂为单个的碳原子，然后重新组成金刚石结构。例如，用晶种法生长大颗粒单晶的情形就是如此。这种转化有一个石墨碳原子键发生断裂的过程，溶剂说就是基于这种假设。另一种方式是石墨碳原子之间的键不发生断裂而直接转变成金刚石。例如，爆炸法及生产中一般常用的静压触媒法的合成过程，主要就是属于这种方式。当然静压触媒法中还含有碳原子的溶解和扩散过程。某些持溶剂说观点的学者不承认有上述第二种转化方式^[2]。这是不全面、不正确的。我们可以从理论上说明，石墨不需要经过把原子拆散就能直接转变成金刚石，而且在一般磨料级金刚石合成方法中，加温加压时间不长，这一种转变方式还是主要的。这时石墨的碳原子也可能有一部分被溶解在金属触媒中，经过扩散可以沉积在已形成的金刚石晶粒上，从而使晶粒长大，但这不是主要的，只有延长时间，这种过程才可以起显著作用。实际上石墨中的碳原子，溶解在触媒金属中后，已转变成类似金刚石中的碳原子结构，相互结合容易形成金刚石。

石墨和金刚石都是由碳原子组成的。按理说，只要是碳原子在一定条件下组织起来，都可以形成金刚石，世界上碳原子的存在形式是多种多样的，但因目前人造金刚石绝大多数是由石墨转化而来的，所以我们这里只限于讨论以石墨为原料的转化机理。

二、石墨和金刚石的原子结构状况

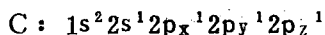
为了便于说明石墨变金刚石的结构转化机理，我们先要了解石墨和金刚石的原子结构状况。

由原子结构理论得知，碳原子的基态电子层结构是



量子力学的研究结果指出：2s态电子的电子云对原子核是球形对称的。2p态电子的电子云呈哑铃形状，按角动量量子化条件可在空间

取三个相互垂直的方向（即X、Y、Z轴的方向）。因此， $2p$ 态电子有三个取向不同的轨道，可分别记为 $2p_x$ 、 $2p_y$ 、 $2p_z$ 。由于两个 $2p$ 态电子之间存在排斥作用，它们要尽可能占据在两个不同的轨道上。当碳原子对外发生作用时，往往要发生一个 $2s$ 电子激发到 $2p$ 态的情形。这时碳原子的电子层结构可变为：



这时有四个未成对的电子，都可以对外成键。根据杂化轨道理论，这些电子对外成键时，不一定按原有的轨道，而往往把它们的轨道“混合”起来，重新组合成新的所谓“杂化”轨道，然后对外成键。

当碳原子构成石墨时， $2s$ 、 $2p_x$ 、 $2p_y$ 三个轨道将组合成三个 sp^2 杂化轨道，这三个杂化轨道的对称轴在同一平面上，并指向三角形的三个顶角，相互间成 120° 的夹角。另一未参加杂化的 $2p_z$ 轨道，则与此平面垂直。当相邻的碳原子靠近时，每个碳原子有三个价电子沿三个 sp^2 杂化轨道与相邻三个碳原子构成三个共价键，称为 σ 键，其方向在同一平面上，结果将使各碳原子形成正六边形的网状结构。这使得石墨晶体呈层状。此外，每个碳原子还多余一个 $2p_z$ 电子，它们的轨道都与层平面垂直，因此互相平行，从侧面上彼此联系形成大 π 键，具有金属键的性质（因 $2p_z$ 电子在层内可以较自由地活动）。有时称这样的电子为 π 电子。为简单起见，我们可以称石墨中的碳原子处于 $sp^2 \pi$ 杂化状态。层与层间靠范得瓦耳力结合。这表明，石墨是由共价键、金属键及范得瓦耳键结合而成的。这里我们可以看到，由于 $2p_z$ 电子在层中较自由地活动，使得碳原子间每一个共价键上平均相当于还有 $2/3$ 个自由电子来回进行联系形成 π 键，好象在每个共价键外还套上有 $2/3$ 个电子的电子云管。由此可见，石墨平面层上的键比单纯碳的共价键还要强一些。因此，石墨平面层上的碳原子间距 ($1.42 \text{ \AA}$) 比金刚石中的碳原子间距 ($1.54 \text{ \AA}$) 还要短，因为金刚石中的键是单纯碳的共价键。这就是石墨为什么能耐高温，而且是电的良好导体的原因。石墨层间的垂

直距离为 $3.35\text{\AA}$ ，由于层与层间靠范德瓦耳力结合，比较弱，故层间距要比层内原子间距大很多，且层与层间很易滑移。层与层之间的原子不是正对着，而是依次错开六方格子对角线长的一半(等于一个边长 $1.42\text{\AA}$)，以使结构更加紧密。这相似于密堆积球层间相互错开半个球的情形。

按各层错开的情况不同，石墨又可分为 I II III I 型和 I II I 型两种。每隔两层，原子位置在垂直方向投视相重合的，称为 I II III I 型，这种石墨在天然石墨中约占10—20%；每隔一层，原子位置投视相重合的，称为 I II I 型，它在天然石墨中约占80—90%。两种石墨的结构如图1.1所示，层间距皆为 $3.35\text{\AA}$ 。

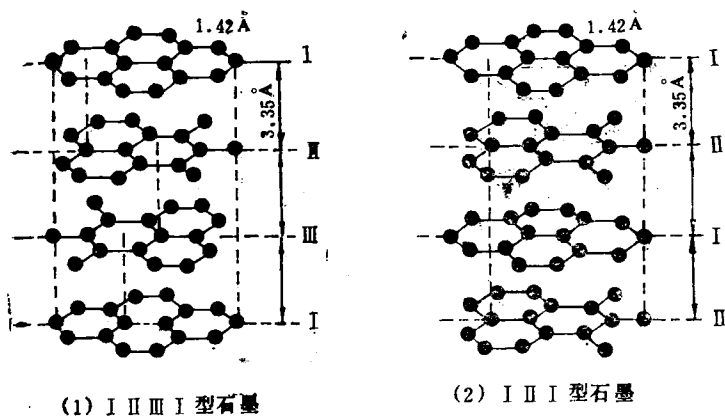


图 1.1 石墨的两种晶体结构

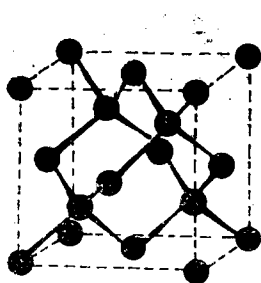
实验发现，经过研磨等机械处理，可使 I II III I 型石墨的比重大大增加，在浓硫酸中煮后又可使 I II III I 型石墨变成 I II I 型石墨。因为石墨层与层之间的相互作用力很弱，所以在研磨挤压等机械作用下，石墨各层间容易滑移，可使 I II I 型向 I II III I 型转化^[3]。

我们将在下面说明，在一定的高温高压条件下，I II III I 型石墨可以直接转变为金刚石。I II I 型石墨经挤压滑移转变为 I II III I 型石墨。

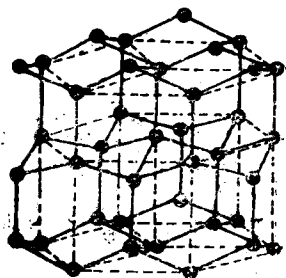
I 型后，就能直接转变为金刚石。

金刚石的碳原子结构与石墨有所不同。这时碳原子的 $2s$ 、 $2p_x$ 、 $2p_y$ 、 $2p_z$ 四个轨道将形成四个 sp^3 杂化轨道，它们的对称轴指向四面体的四个顶角。每个碳原子用这种杂化轨道与相邻的四个碳原子形成的共价键是饱和的，键长为 $1.54 \text{ \AA}$ ，方向性很强，分别指向以碳原子为中心的正四面体的四个顶角，键间的夹角为 $109^\circ 28'$ 。由于这种结构中键的方向性和结合力都很强，使得金刚石具有很大的硬度。

结晶格子中，四个相邻原子具有四面体结构，存在立方晶系和六方晶系两种可能性。金刚石也存在这两种晶系，分别称为立方金刚石与六方金刚石。两种金刚石的结构如图 1.2 所示。



(1) 立方金刚石晶胞



(2) 六方金刚石的晶胞

图 1.2 金刚石的两种晶体结构

从以上的分析可以看出，碳原子既可以 $sp^2\pi$ 杂化状态相互作用而形成石墨结构，又可以 sp^3 杂化状态相互作用而形成金刚石结构。石墨与金刚石的结构和性能之所以不同，就是由于它们内部碳原子的杂化状态和相互作用的规律不同造成的。我们将在下面说明，在一定条件下，石墨结构中的碳原子的 $sp^2\pi$ 杂化状态可以转化为 sp^3 杂化状态，从而使石墨变成金刚石。这就是石墨所具有的在特定条件下能够转变成为金刚石的内在矛盾性，也是结构转化机理的理论基础。

三、无触媒作用时石墨变金刚石的 结构转化机理

在比较了石墨和金刚石的原子结构状况和相互作用的规律以后，我们就可从这个原子间相互作用的变化规律来探索石墨变金刚石的
结构转化机理。现在先讨论无触媒存在时，石墨在低于熔点的一定温度和一定压力下转变为金刚石的
结构转化机理。这是一种固相转变过程。

若把石墨层中六边形网状上的碳原子依次编上号数，则从ⅡⅡⅠ型石墨的结构图（如图1.3所示）可以看出，每层上的单号原子与相邻上一层的双号原子正对准，而其双号原子则与相邻下一层的单号原子正对准，这些对准的原子对之间都用虚线相联。由图上可以看出，石墨层上每个碳原子都有三个近邻的碳原子与它形成三个共价键。另外在相邻的石墨层上还有一个碳原子与它对准，由于距离较远，没有能与它形成共价键。若创造条件，使这个相距较远的碳原子能与它靠近而形成
一个共价键，则每个碳原子就有四个近邻碳原子与它相互作用而形成以四个共价键相联结的结构，从而使整个晶体转变成金刚石结构。在高压高温作用的条件下，可以实现这种转变。在高压下，石墨的层间距被压缩，层与层间相对应的原子间距将缩小。在高温下，碳原子的振动加剧，由于单双号原子分别受到上下两个原子所施的两个相反的作用力，容易产生相反的横振动，如图1.3的箭头所示。这是一种强迫振动。当各层越来越靠近时，上下相互作用的力越来越强，振幅将越来越大，振动周期将越来越长，最后将停止这种振动，而使层与层间相对应的原子有规律地上下靠近。原来处在一个平面上的六边形格子，这时就有规律地扭曲起来，变成
为扭曲的六边形格子，三个单号原子所处的三个顶角向上歪，三个双号原子所处的三个顶角向下歪。同时由于上下靠近的各对原子的吸引，要使原来比较自由的 $2p_z$ 电子（即 π 电子）

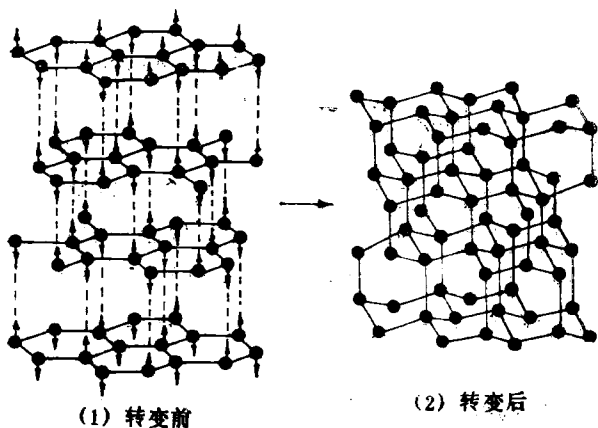


图 1.3 石墨变金刚石前后的晶体结构

分别向这些原子对的联线上集中，最后在层与层之间的这些联线上建立起新的垂直于层方向的共价键，从而使每个碳原子与四个相邻的碳原子都以四个共价键相联结，形成具有四面体结构的状态。这样，在高温高压的作用下，整个晶体就由石墨结构直接转变成了金刚石结构（如图1.3所示）。

比较转变前后的结构变化，可以看出，石墨层间距缩小了 $1.31 \text{ \AA}$ ，石墨每层中的相邻原子分别相对于层平面垂直向上和向下位移了 $0.25 \text{ \AA}$ ，而成为相距 $0.50 \text{ \AA}$ 的双层。双层中原子间的共价键形成了扭曲的六边形格子，原子间距伸长为 $1.54 \text{ \AA}$ 。这样，上双层的下层与下双层的上层，其中的原子都相对应，而相距 $1.54 \text{ \AA}$ 。只要原来自由的 $2p_z$ 电子成对地集中到这些对应的原子对间，形成键长为 $1.54 \text{ \AA}$ 的垂直的共价键，最后就变成了金刚石结构。

必须特别指出，石墨层间距的缩短和原子的垂直位移，以及最后金刚石的形成，绝不是主要靠加温加压，而是主要靠内部原子间的相互作用力。当加温加压使石墨层间距缩小到一定程度，同时使各层间相对应的原子对靠近到一定程度后，它们就要相互吸引，自动使石墨层间距与原子间距继续缩小，并使原来自由的 $2p_z$ 电子向相