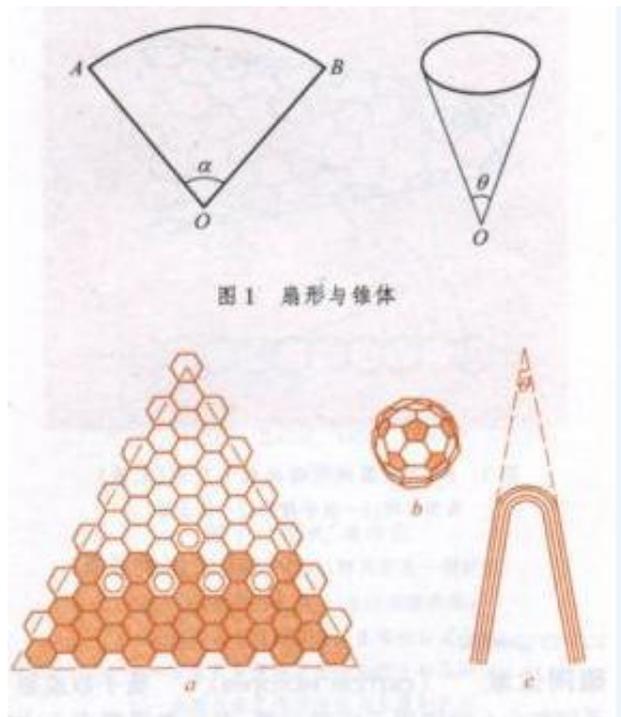


碳纳米锥



简介

碳原子组成的锥状结构，碳的同素异形体大家族中的一个新的成员。在制备碳纳米管时，常常出现纳米锥。纳米锥可构成纳米管的封头，也能单独存在。单体纳米锥，其底部具有拱形封盖，也可看到没有封盖、底部是敞开的锥体。把一个扇形卷起来，使其侧边OA和OB重叠就成为一锥体。锥角的大小取决于扇形的张角。把图2中的一个张角为60°的扇形六角碳网层卷起，使其两侧边互相重叠就构成了一个碳纳米锥。有小圆圈的网眼，如果换成五员环，涂有阴影的部分就自动卷成一个纳米锥，其锥角的理论值为19.2°，锥顶呈拱形。其中有5个五员环。这个扇形的两个侧边连接起来，六角碳网的连续一致性仍然保存，完整无缺。这样的两个侧边称为可互相匹配。六角碳网层中由5个五员环诱发而生成纳米锥出现的频率最高，观察到的锥角约为20°。与理论值相符。在电弧火花放电所产生的碳蒸气中，纳米锥的形成过程，实际是首先生成拱形顶盖，围绕顶盖的周边，六角碳网再逐渐生长延伸。

碳纳米管的结构为管的直径和螺旋角所决定，碳纳米锥的结构则只由锥角这一个参数所决定。把六角碳网层组成的扇面卷起，为了使扇形的两个侧边能互相匹配，锥角只能取某些特定的数值，不然扇形两边的重合不能产生完整无缺的六角网。锥角的大小为构成锥顶的五员环的数目n所决定，即

$$\theta = 180 - 2\cos^{-1}(1 - n/6)$$

n为5, 4, 3, 2, 1时，锥角 分别为：19.2°，38.9°，60°，83.6°，112.9°。

上图为锥角 $\theta = 19.2^\circ$ 的单层纳米锥的正面结构，通过上、下两侧中心线的平面将锥体分为正面和背面两个部分，这两部分对这一剖面互为镜像。当纳米锥沿着锥轴逐渐延伸，其横断面随之逐渐增大，其拱形顶部是零维的富勒碳，中部类似于一维的纳米管，锥体延伸得很长时，其端部则逐渐接近于二维的石墨层面，因此碳纳米锥具有从富勒碳连续地过渡到石墨的结构。这点十分特殊。纳米锥应具有相当复杂的能带结构。从结构上看，碳纳米锥从绝缘性的顶部逐渐连续地变化到金属性的底部，具有梯度材料的特性，因此可望在分子级电子器件中得到重要的应用。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/baike/2277.html>