

科学家发现碳家族单晶新材料

碳是我们这个星球上最重要的元素之一，碳原子具有极轻的原子质量和极强的共价键。碳是元素周期表中最多样化的元素之一，它可以与自身或者几乎所有的元素以多种杂化方式成键，获得结构丰富的碳网络，很多碳分子具有独特的 π 电子共轭体系，并展现出优异的力、热、光、电等属性。

碳材料一直被认为是一种未来材料，甚至有的材料学家认为人类社会将由现今的“硅基电子时代”迈入到未来的“碳基电子时代”。通过调节碳材料的带隙，可以使其表现出迥异的电学性质（如金属、半导体和绝缘体），从而在晶体管、能源存储器件、超导等领域具有广泛应用。碳材料的性能与其拓扑结构密切相关，因此，研究新的二维碳同素异形体，特别是具有带隙的新型结构，建立结构与物性之间的关联，具有重要意义。制备新型碳材料一直是材料领域的前沿科学问题，以富勒烯、碳纳米管、石墨烯、石墨炔为代表的新型碳材料的每一次发现都引发了材料学家的研究热潮。1985年，Robert F. Curl, Jr、Harold Kroto和Richard E.

Smalley发现C₆₀（获1996年诺贝尔化学奖）；2004年，Andre Geim和Konstantin

Novoselov成功地从石墨中分离出石墨烯（获2010年诺贝尔物理学奖）。

同一种元素构成的物质，由于原子排列不同，展现出不同的物理化学性质，称之为同素异形体。碳有多种同素异形体，包括金刚石、石墨、富勒烯、碳纳米管、石墨烯和石墨炔。

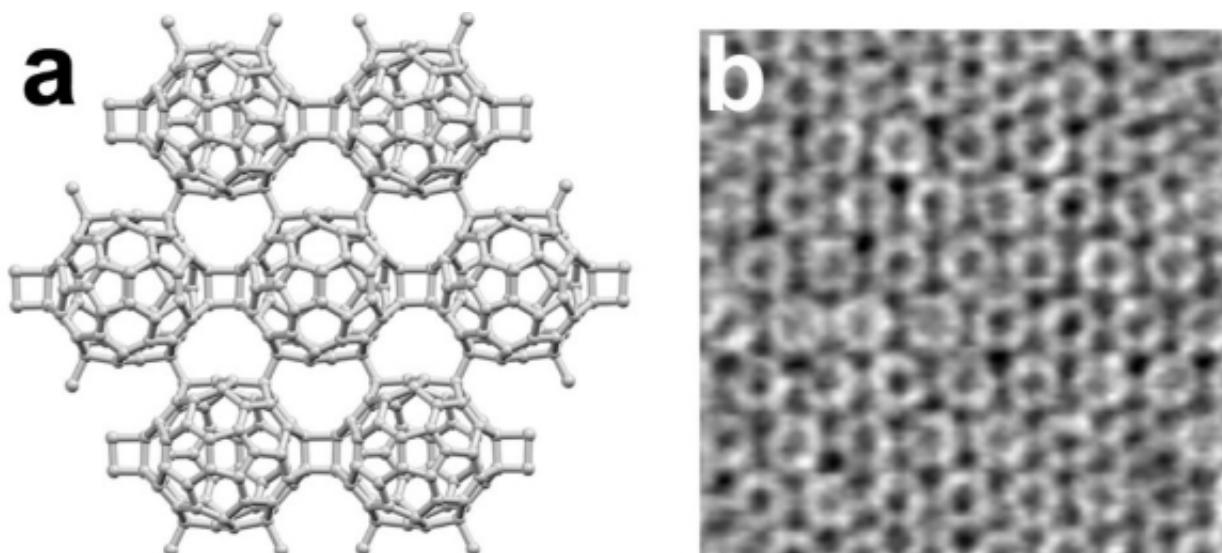
6月15日，中国科学院化学研究所研究员郑健团队在国际学术期刊《自然》（Nature）上发表了题为Synthesis of a monolayer fullerene network的新成果。该工作在常压下通过简单的反应条件，创制了一种新型碳同素异形体单晶——单层聚合C₆₀。这是一种全新的簇聚二维超结构，由C₆₀簇笼在平面上通过C-C键相互共价键合形成规则的拓扑结构。这种新型碳材料具有较高的结晶度和良好的热力学稳定性，并具有适度的禁带宽度，为碳材料的研究提供了全新思路。

迄今为止构筑二维材料的最小单元是单个原子，被称为人造原子的纳米团簇作为基本单元构筑更高级的二维拓扑结构一直未能实现。由于碳碳成键的反应收率不是100%且反应不可逆，因此使用传统化学反应自下而上通过分子“垒砖头”的方法制备二维团簇碳材料单晶几乎无法完成。郑健课题组历时5年，利用掺杂聚合-剥离两步法，成功制备了单层二维聚合C₆₀单晶，获得了确凿的价键结构。

通过调节镁（Mg）和C₆₀的比例，他们在常压条件下制得了两种紧密排列的准六方相和准四方相的Mg插层聚合物单晶，通过新的有机阳离子切片策略，使用四丁基水杨酸铵作为切割试剂，从准六方相结构中剥离得到单层C₆₀聚合物。研究人员利用单晶X射线衍射（XRD）和扫描透射电子显微镜（STEM）对该单层C₆₀聚合物进行了结构表征，结果显示C₆₀之间通过C-C桥连单键和[2+2]环加成的四元环桥连键在平面内连接形成了一种全新的二维拓扑超结构。单层聚合C₆₀的带隙约为1.6 eV，是典型的半导体，预示其在光/电半导体器件中具有潜在应用。此外，该结构具有良好的热力学稳定性，在约600K（326.85℃）下仍旧稳定存在。

由于不对称成键结构，单层聚合C₆₀中每个C₆₀单元被拉伸成方向一致的椭球形，从而使得这种新的碳材料具有显著的平面各向异性，如各向异性声子模式和电导率，这意味着该材料在非线性光学和功能化电子器件方面可能具有应用前景。此外，由于其独特的共轭碳结构、巨大的超晶格和多孔骨架结构，该二维簇聚碳材料或在超导、量子计算、自旋输运、信息及能量存储、催化等领域也具有潜在应用价值。

该研究工作由中科院化学所有机固体实验室独立完成。该工作得到科技部国家重点研发计划纳米科学专项、国家自然科学基金、中科院战略性先导科技专项和北京分子科学国家研究中心的支持。



图a：准六方聚合C60的单晶结构示意图，每个C60与周围6个C60通过C-C共价键相连。图b：单层聚合C60的STEM图片，C60笼簇在STEM图片中显示为圆环。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/183176.html>