

物理所提出一种新型拓扑Node-Line半金属碳烯结构

$\text{C}-\text{CH}_3$) 碳碳单键、乙烯 ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$)

) 碳碳双键、乙炔 ($\text{HC}-\text{CH}$) 碳碳三键以及苯基大 π 键结构。苯基大 π 键结合构成稳定的二维石墨烯，烷基碳碳单键结合构成三维金刚石，炔基碳碳三键结合形成碳原子链。近年来，零维C60富勒烯球、一维碳纳米管以及二维石墨烯的发现和合成更加激发了人们探索新的碳晶体结构的兴趣。但是长期以来有关三维all-sp²碳烯(或石墨烯的三维版本)晶体结构的研究始终未取得满意的进展。2012年以来,科学家致力于通过一维碳炔链的折叠与重构来设计构建三维碳烯晶体结构。基于乙烯型碳碳双键结合,研究人员先后提出了由三折、四折和六折螺旋碳原子链重构而成的三维碳烯晶体结构模型[Sci. Rep. 3, 03077 (2013); Sci. Rep. 4, 04339 (2014)],发现三折cR6和四折cT8三维晶体结构由反向手性碳链组成、六折Rh6三维碳烯晶体结构由可单一手性碳链组成,分别具有R-3m, I41/amd和R-3m对称性。能带计算表明这些手性碳烯晶体结构呈现半导体特性,带隙分别为2.95 eV, 2.41 eV和0.47 eV。最近的实验表明,Rh6及其致密相Rh6-II碳晶体结构可通过研磨含富勒烯球碎片的非晶炭灰来合成【Carbon 102, 288 (2016)】。

基于以上工作,最近,中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室(筹)研究员王建涛、副研究员翁红明、博士研究生聂思敏、研究员方忠与日本东北大学教授川添良幸和美国内华达大学教授陈长风合作,通过第一性原理计算,提出了一个新的由六折反向手性碳原子链构成的三维碳烯晶体结构(图1a)。该结构具有体心正交对称性,单位晶胞含16个碳原子,因此简称为BCO-C16碳。同时其反向手性碳原子链通过乙烯型碳碳双键结合形成苯环直链,因此,BCO-C16碳也可以视为是由苯环直链通过乙烯型碳碳双键结合而成的“石墨烯的三维版本”或“三维石墨烯”。其结构特征与cR6、cT8和Rh6碳类似,包含2/3碳碳单键和1/3碳碳双键。但是由于其特有的共轭反向手性结构,能量上BCO-C16比Rh6更加稳定,与固体C60的能量大致相当(图1b)。

详细的能带计算表明这个新的三维石墨烯碳结构呈现Node-Line半金属特性(见图2)。在二维石墨烯中,费米能级附近的能带形成交叉点(Dirac点),但是在三维BCO-C16晶体中,能带交叉点(图2a)在动量空间形成连续闭合的曲线(红色圆环,图2b)。并且这个曲线投影到材料的(100)表面上时出现受体态拓扑保护的能隙非常小的鼓膜状二维表面平带(红色曲线,图2c,2d)。通过和以往报道的X-线衍射实验数据的详细比对分析发现这种由苯环或苯环直链构成的三维石墨烯晶体结构可能存在于燃烧或爆炸生成的炭灰中,在30度附近存在一个显著的衍射峰(图3)。三维手性石墨烯晶体结构的发现,形成了一个从零维富勒烯球、一维碳纳米管、二维石墨烯以及三维碳烯的完整碳烯结构系列。这些结果对全面理解碳晶体构型及有关物性具有重要的科学意义,并将激发有关实验工作的开展。相关研究结果发表在5月11日出版的Phys. Rev. Lett. 116, 195501 (2016)。

该工作得到了国家自然科学基金委(批准号11274356,11274359,11422428)、中国科学院先导B项目和科技部“973”项目的支持。

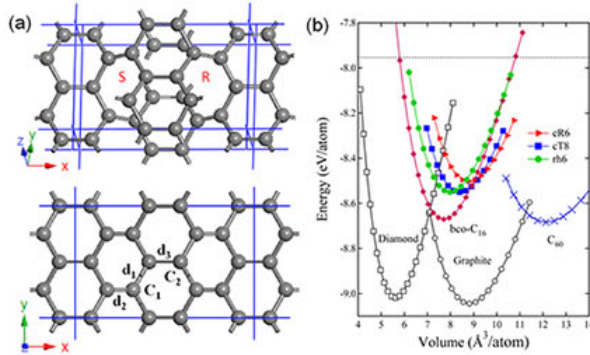


图1: (a) 手性体心正交 $bco-C_{16}$ 碳烯晶体结构 (I_{2mm} , No. 74)。S和R分别代表左右手性碳螺旋。单位晶胞含16个碳原子由苯环直链通过乙烯型碳碳双键结合而成, 含2/3碳碳单键和1/3碳碳双键。晶格常数 $a = 7.8061 \text{ \AA}$, $b = 4.8772 \text{ \AA}$, $c = 3.2372 \text{ \AA}$, 占据8i (0.3231, 0.25, 0.1258) 和 8f (0.0885, 0.5, 0.5) 晶格位置。(b) 计算得到的各种碳结构的能量-体积曲线。

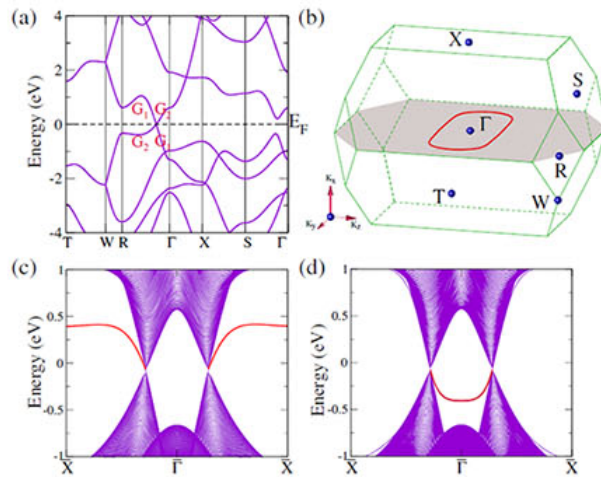


图2: (a) 电子能带结构。 G_1 和 G_2 指示在费米能级近旁的两个交叉能带; (b) 能带交叉点在布里渊区中形成的Node-Line环。(c, d) 表示不同(100)表面终端态形成的表面态电子结构, 表面平带。

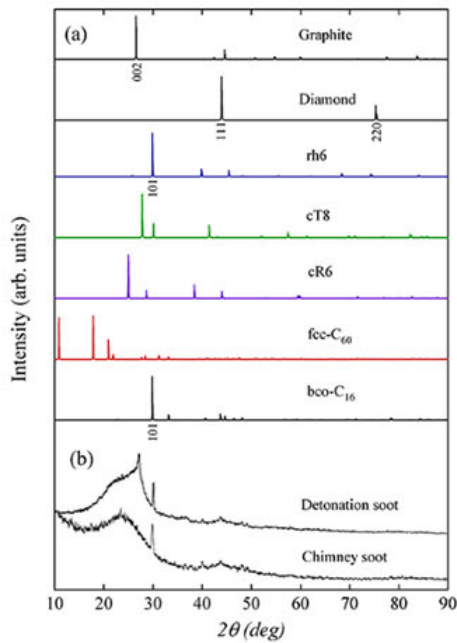


图3: X-线衍射峰。(a) 计算得到的X-线衍射峰; (b) 实验得到的X-线衍射峰。26.5度附近的峰值对应于石墨(002)衍射峰; 43.7度附近的峰值对应于金刚石(111)衍射峰; 30度附近的峰值对应于 $bco-C_{16}$ 的(101)衍射峰。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/93565.html>