
科学家提出纳米石墨带合成新方法

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11304.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家提出纳米石墨带合成新方法。北京高压科学研究中心李阔、郑海燕团队与北京大学鞠晶团队合作发现，高压下1,4-二苯基丁二炔分子晶体可发生拓扑控制的脱氢狄尔斯—阿尔德反应，生成晶态纳米石墨带。该研究为纳米石墨带的可控合成提供了新思路。相关成果日前发表于《美国化学会志》。

石墨烯是零带隙材料。这极大地限制了其在半导体器件上的应用。打开其带隙的一种有效方法是将二维的石墨烯转变为准一维的纳米石墨烯带。纳米石墨烯带的带隙可以通过控制其宽度、骨架结构、边缘结构以及杂原子掺杂来实现调控，从而在下一代电子学器件上展现出巨大的应用前景。目前，纳米石墨烯带的精准可控合成主要采取自下而上的策略，即由小分子通过溶液反应或表面反应合成，但这些方法存在样品量少、提纯困难以及结构不均一等缺点。

高压（大于1万个大气压）可以有效改变分子的堆积方式，压缩分子间的距离，改变原子的成键方式。几乎所有的不饱和有机小分子都可以在高压下发生聚合，高压因此成为开发新型聚合反应、自下而上合成新型碳基材料的有效途径。高压诱导的固相聚合反应，无需使用溶剂、催化剂、引发剂，是新的绿色、原子经济的合成方法。

在常压下，二炔类分子主要通过光激发或热激发进行1,4-加成拓扑聚合反应，其反应活性主要取决于晶体中分子的堆积方式。而1,4-二苯基丁二炔在常压下由于晶体中分子间的距离过大，因此无法进行类似反应。研究人员最初希望利用压力来压缩其分子间距离，从而诱导1,4-加成反应。然而，原位拉曼光谱和红外光谱研究表明，1,4-二苯基丁二炔在高压下以苯基和炔基共同参与的拓扑化学反应路径进行反应，而非传统的1,4-加成反应。

为进一步研究反应机理，研究人员利用原位高压中子衍射谱仪，研究了1,4-二苯基丁二炔分子在反应临界压力（约10万个大气压）下的晶体结构，由此确定了反应是从苯基炔与苯基之间的脱氢狄尔斯—阿尔德反应（DDA）开始，且反应的临界距离为3.2 \AA 。

该团队进一步综合利用电子衍射等一系列表征手段与理论计算手段，分析了反应产物的晶体结构，发现产物为两种不同氢含量的纳米石墨带。最后，研究人员比较了临界反应压力下1,4-二苯基丁二炔分子晶体中其他可能路径的反应距离，提出拓扑聚合反应是由距离选择所主导的观点，这与由官能团活性选择所主导的溶液反应不同。

该研究首次发现了分子晶体中拓扑化学控制的脱氢狄尔斯—阿尔德反应，为晶态纳米石墨带的合成提供了一种新的原子级可控的自下而上的合成方法。研究者提出的距离选择性规律将为拓扑聚合反应的设计与合成提供重要参考。（来源：中国科学报 闫洁）

相关论文信息：<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.0c08274>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：李阔 来源：JACS

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发