
中国科大提出全新内嵌金属富勒烯形成机制

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/20230.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！

中国科大提出全新内嵌金属富勒烯形成机制。

中国科学技术大学教授杨上峰课题组合成了两种新型的基于过渡金属钒的内嵌金属富勒烯，结合这两种分子结构上的关联性，提出一种全新的内嵌金属富勒烯形成机制——自驱动单原子碳注入机制，在内嵌金属富勒烯领域取得新进展。研究成果近日发表于美国《国家科学院院刊》。审稿人认为，这两种金属富勒烯的结构很新颖。

内嵌金属富勒烯因其结构的多样性在近20年间得到了飞速的发展，迄今为止已经有超过50种金属团簇被报道嵌入到富勒烯碳笼中，然而它们的形成机理却是长期困扰科学家的一个难题。揭示内嵌金属富勒烯的形成机理不仅有助于深入理解金属富勒烯结构的稳定性，还对于实现金属富勒烯材料的可控、高产率合成具有重要指导意义。

目前报道的三种内嵌金属富勒烯形成机制（碳团簇插入、脱去机制，以及Stone-Wales机制）都侧重于外部碳笼骨架的转变，然而对于内嵌金属团簇之间的转变机制则从未被报道过。因此，对内嵌金属富勒烯中内嵌金属团簇的形成机理的深入研究是富勒烯领域极其重要且富有挑战性的工作。

杨上峰团队在前期工作的基础上，合成并分离出两种新型的基于过渡金属钒的内嵌金属富勒烯。并与中国科大李群祥教授课题组、厦门大学谢素原院士团队合作，利用单晶X射线衍射技术精确表征了它们的分子结构，结合DFT理论计算对其电子结构进行了系统研究，发现这两种内嵌金属富勒烯的分子结构和电子结构存在极大的相似性。

在此基础上，杨上峰课题组提出它们之间存在一种全新的内嵌金属富勒烯形成机制——自驱动单原子碳注入机制。该机制可以分为两个过程，包括：独碳团簇金属富勒烯对单原子碳的吸附；单原子碳注入到碳笼形成双碳团簇金属富勒烯。所内嵌的过渡金属钒上存在的单电子对于促进单原子碳吸附到碳笼上起着至关重要的作用。

不同于之前通过高压法或离子注入法实现将非金属原子（如氮）嵌入到中性富勒烯碳笼的报道，通过单原子碳注入机制可以实现将非金属原子原位嵌入到带负电的碳笼中，而且由于内嵌钒原子的存在，该过程可以认为是自驱动的，相比于以往的合成方法大大降低了反应能耗。

因此，该结果对于深入理解内嵌金属富勒烯的形成机理以及合成新结构内嵌金属富勒烯具有重要意义。（来源：中国科学报王敏）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1073/pnas.2202563119>

作者：杨上峰等 来源：《国家科学学院院长刊》

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