

十年磨一剑！我国科学家获得新型人工碳晶体

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/21569.html>

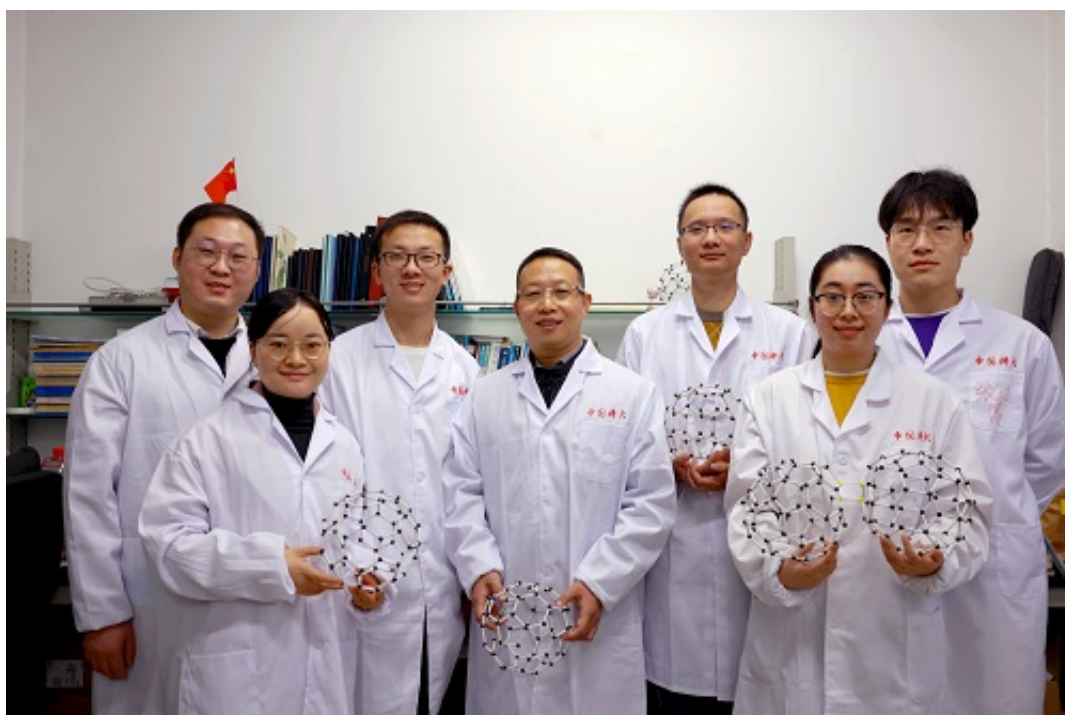
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

十年磨一剑!我国科学家获得新型人工碳晶体。

不断发现新结构、新性质，实现新应用，一直是材料学家的研究主题。在碳材料研究领域，寻找石墨和金刚石之外的新型晶体结构，对获得具有更新性质和更优性能的碳材料具有重要意义，因此吸引了研究人员的广泛兴趣。

1月12日，国际学术期刊《自然》刊登中国科学技术大学(以下简称中国科大)材料科学与工程系教授朱彦武团队的研究成果。历经十年的努力和探索，他们发现了一种对富勒烯C60分子晶体进行电荷注入的新技术，在常压条件下构建了C60聚合物晶体以及长程有序多孔碳晶体，并实现了其克量级制备。

长程有序多孔碳晶体是一类全新的人工碳晶体，此前尚未报道过。得到它的过程，就像把富勒烯分子当成一块块‘乐高积木’，其关键是设计出将富勒烯‘卡’在一起的方法，也就是该研究中发展的电荷注入技术。实际上，电荷注入技术具有相当的普适性，有望成为在原子级精度上调控晶体结构的新手段。论文通讯作者朱彦武向《中国科学报》介绍。



中国科大朱彦武教授(一排中)研究团队部分成员合影 代蕊 摄

乐高式新型碳材料构建方法

碳是自然界最常见的元素之一，碳原子之间通过不同排列方式，能够形成多种结构，比如我们熟悉的石墨、金刚石和无定型碳，已经广泛应用于各个领域。

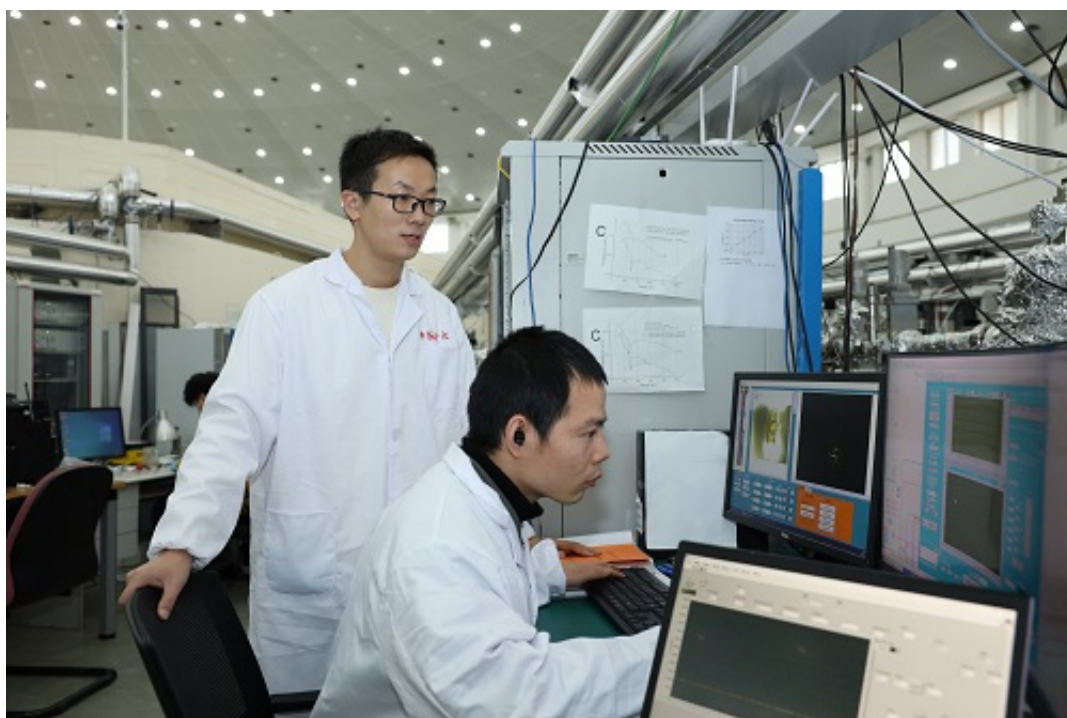
近年来，富勒烯、纳米碳管、石墨烯和石墨炔等新型碳材料的发现和发展，引起了广泛的关注与研究热潮。进一步的，如果我们可以利用上述纳米材料作为基本单元排列成有序的结构，‘搭建’出新型碳晶体材料，可能会发掘更多新奇性质、发挥更大应用潜力。朱彦武说。

事实上，此前已有理论预测这类碳材料可以稳定存在，可能是半导体甚至具有超导特性，具备丰富可调的电子学性质。但是一直以来，要想对这类碳材料进行宏量制备，并对其进行深入表征、系统探索其应用范围，仍然存在巨大挑战。

挑战主要来源于，此前制备这类碳材料的报道中，研究人员要么是利用高温高压等极限条件，要么是采用紫外光、电子束辐照等难以规模化的微观处理技术，而导致产率很低、产物不纯，阻碍了人们对该类材料做更加深入、系统的探索。

此次研究中，朱彦武团队创造性地利用氮化锂对富勒烯C60分子晶体进行电荷注入，并在适当温度下进行热处理，最终得到了C60聚合物晶体以及长程有序多孔碳晶体，并且实现了其克量级制备。

《自然》审稿人认为，论文中给出的结果令人信服，对晶体学和材料科学领域具有重要意义。



在国家同步辐射实验室实验线站上，论文第一作者、中国科大特任副研究员潘飞(左一)与测试人员正在采集样品的X射线吸收谱 代蕊 摄

电荷让分子温柔牵手

一个富勒烯C60分子中有60个碳原子，想要以其为结构单元得到新的碳结构，就要让相邻分子之间既形成稳定连接，又不能严重破坏富勒烯具有的笼状结构主体特征，而需要实现：C60分子中部分碳原子与相邻分子中的碳原子之间形成一定数量的共价键。

为了稳定获得大量的这类碳结构，团队尝试了各种能想到的办法。一次偶然机会，他们注意到了一种叫做氮化锂的材料。这种材料化学性质活泼，遇水会产生明火，具有很强的失电子能力。进一步研究发现，该材料能够在大约400 °C条件下对石墨进行电荷注入，诱导其快速发生堆叠形态相变。

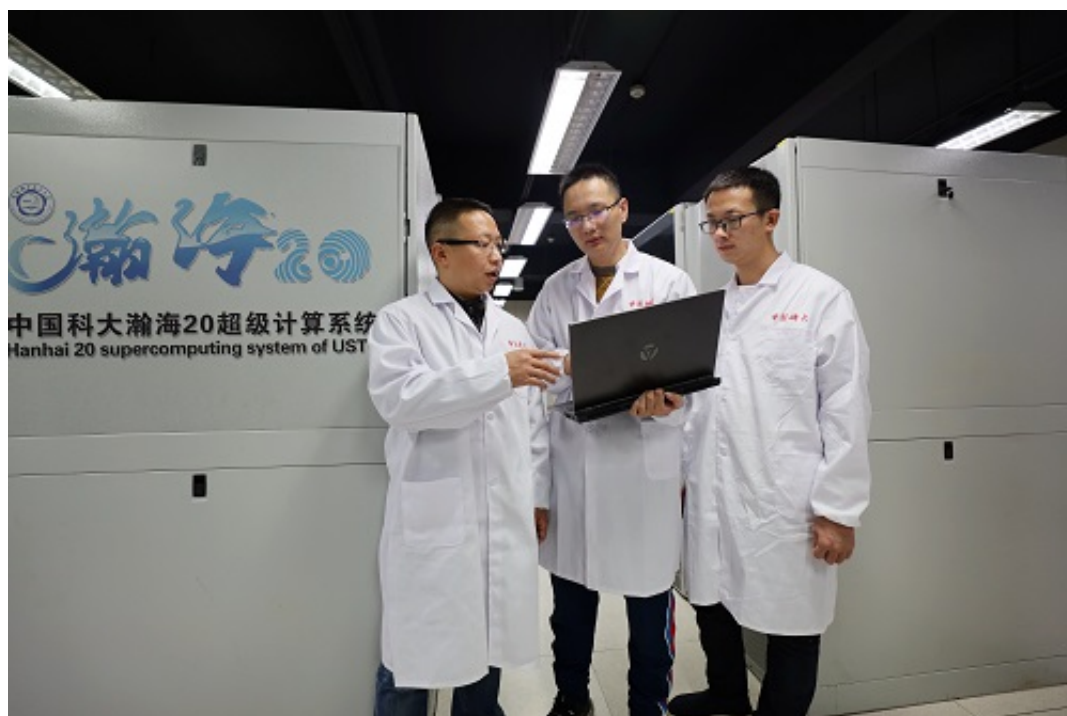
研究中，论文第一作者、中国科大特任副研究员潘飞主要负责新型碳晶体的制备条件摸索和结构表征。他说，电荷注入是在物理学研究中常用的方法，一般用来改变材料的电子学性质(例如电子能级)，但很少用来改变、调控材料的微观结构。

在上述研究基础上，他们将该方法拓展至富勒烯C60分子晶体的结构调控中。我们发现在适当温度下，电子会从氮化锂转移至富勒烯C60分子中实现电荷注入，这些额外的电荷会改变C60分子的电子结构，使得相邻分子之间容易形成共价键，两个分子更容易成功‘牵手’。潘飞说。

值得一提的是，该工作实现了理论模拟与实验研究的深度融合。将60个碳原子作为一个单元组成晶体的组合可能性非常多。我们采用神经网络势函数并结合机器学习方法，广泛搜索了从富勒烯到其他碳结构的衍化路径，得到了30多万个可能的中间态结构，再将这些中间态结构特征和实验结果进行对比，帮助我们进一步明确了实验上调控制备条件的方向，提高了实验工作的精准度和效率。论文共同第一作者、中国科大特任副研究员倪堃介绍。

为什么在这样的实验条件下能得到这样的晶体结构?在研究过程中，他们也利用理论计算对实验结果的机理同步进行了解释，认为电荷注入未来可能是一个非常有用的微观结构调控技术。

值得一提的是，更加详细的结构搜索表明，长程有序多孔碳基晶体代表了一大类从富勒烯分子晶体到石墨类碳晶体转变过程中的亚稳态晶体结构，有望得到碳材料领域的持续关注和跟进研究。



论文共同第一作者、中国科大特任副研究员倪堃(中)与导师、同事讨论理论计算方案 代蕊 摄

发展中国人的碳材料体系

事实上，早在2011年，朱彦武在美国德州大学奥斯汀分校进行博士后研究时，就找到一种化学活化的方式激活石墨烯，成功将石墨烯片层重构成为兼具高比表面积、高电导率和负曲率结构的活化石墨烯，作为超级电容器电极材料表现出优异性能。该研究成果发表在《科学》杂志上。

当时我就开始考虑，利用具有明确结构的碳基纳米单元作为积木，我们中国人自己是否可以发展出一类新的碳材料体系。带着这样的目标，朱彦武回国加入中国科大，2012年成立先进碳材料研究组，集中精力研究新型碳材料的制备与应用。十年间，尽管团队将相当大一部分的精力用于研究石墨烯材料的应用及其相关产业化技术，并取得了重要进展，但从未忘记制备新型碳晶体材料这一基础研究目标。

十年攻关终于有了回报，长程有序多孔碳基晶体正是他们团队想要得到的新型人工碳晶体之一。

大家常说十年磨一剑。其实刚开始，我们没有‘剑’，甚至连‘剑’长什么样也不清楚，仅仅是一个朦胧的梦想。朱彦武坦言。但在探索的道路上，他们从未忘记目标，一想到新的方法和技术，立马回到了初心。他们认为，新材料的结构调控从简单走向复杂、从单一功能走向多层次梯度功能，是一个必然趋势，需要一个长期的研究过程。

研究中，朱老师给予了非常宽容的探索空间，这是孕育一些能够产生原创性发现的基本条件。如果都是规定好了，今天必须做这个，明天必须做那个，可能很难得到现在我们稍微觉得满意的一个结果。潘飞也提到，科研中遇到难题时，不要一味死磕，最好能短期调整研究方向或外出放松，看看其他研究领域的文献，也许会有意外收获。

同样，倪堃认为基础研究也需要一个相对宽容的环境，不能因为一些短期因素就着急出成果。他

认为，做基础研究，做一件有更大价值的事要比做十件重复性的工作更有意义，往往问题的突破点可能就来源于一个即时的灵感或者多学科交叉。只要做到这个‘1’，后面就会有更多的‘0’。而如果抓不住‘1’，做再多的‘0’也还是‘0’。

朱彦武认为，团队在这个方向能坚持这么久，得益于中国科大相对宽松的科研环境。同时，他说，做基础研究一定要有自己深度思考和多学科交流的时间，不能陷于短期目标的繁忙之中。

谈及长程有序多孔碳晶体的应用，朱彦武表示，该类晶体未来可能在能量存储、离子筛分、催化负载等领域具有潜在应用，但这需要长时间的深入研究和工程化的努力。接下来，团队将深入系统地研究这一新型碳基晶体的性质，期望通过进一步实验参数调控得到具有原子级别精度周期性的晶体结构，探索更多的性质与应用。(来源：中国科学报 王敏)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-022-05532-0>

作者：朱彦武等 来源：《自然》

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