
中国科大等在新型碳基晶体研究方面取得重要进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/21588.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！

中国科大等在新型碳基晶体研究方面取得重要进展

。1月12日，中国科学技术大学化学与材料科学学院材料科学与工程系、合肥微尺度物质科学国家研究中心朱彦武团队在《自然》杂志上发表研究论文，报道了在常压条件下通过化学电荷注入技术，将富勒烯 C_{60} 分子晶体转变为聚合物晶体和长程有序多孔碳（LOPC）晶体的相关进展。LOPC晶体是由 C_{60} 分子之间通过共价键连接而成的新型人工碳晶体，既具有多孔特性又保留了 C_{60} 分子晶体的长程有序特征。在该研究中，研究人员实现了上述材料的克量级制备，系统表征了其微观结构、谱学特征、结构衍化和电学性质；发展了电荷注入方法辅助实现 C_{60} 分子间界面的原子级精度调控，为碳基晶体材料研究提供了一种“拼乐高”式的制备技术。

碳原子通过不同轨道杂化方式，形成石墨、金刚石等具有不同性质和应用的碳基晶体； sp^2 杂化的碳原子通过维度、曲率等变化，可形成富勒烯、纳米碳管和石墨烯等碳基纳米结构，体现出独特性质。碳材料研究领域近年来的诸多进展表明，从富勒烯这一具有明确结构的纳米单元出发，有望得到具有新奇性质和应用潜力的新型碳基晶体材料。然而，在已经报道的制备研究中，产物的产率通常较低且多为混合相，难以获得具有明确结构和可调性质、可用于深入表征及广泛应用探索的碳基晶体。

朱彦武团队长期致力于发展碳材料规模化制备技术，特别集中于从石墨烯、富勒烯等纳米碳基单元出发、通过调控单元界面得到新型碳材料的研究。该团队曾利用氢氧化钾对微波剥离的还原氧化石墨烯进行活化处理，将石墨烯片层重构为兼具高比表面积和高电导率、具有负曲率结构特征的“活化石墨烯”，作为超级电容器电极材料体现出优异性能，并实现了对活化产物结构的进一步精细调控。团队近期研究发现，将氮化锂（ $a-$

Li_3

N ）和石墨接触时，其部分电子会转移至石墨的电子云，导致石墨层间距异常增大、层间滑移能垒降低，从而使得3R相（ABC堆叠）石墨可在比此前报道低得多的温度下转变为2H相（AB堆

叠)。

在上述研究基础上，团队利用氯化锂对富勒烯C₆₀分子晶体进行电荷注入，在常压条件下和440-600

范围内将面心立方堆积的C₆₀分子晶体转变为聚合物晶体及LOPC晶体，实现了其克量级制备。在来自东南大学、中国散裂中子源、国家同步辐射实验室、南方科技大学、中国科学院半导体研究所、韩国基础科学研究所等研究团队的合作帮助下，系统地表征了其微观结构、谱学特征、电子结构和电学性质。研究表明，电荷注入C₆₀分子导致的电偶极矩可在邻近的分子间传递，降低了在反应过程中C₆₀笼间的加成反应势垒；更进一步的反应（更高处理温度、更多电荷注入量、更长反应时间）使得笼间连接部分转变为弯曲的sp²结构，但分子主体位置仍保持良好的长程有序特性。从分子晶体到聚合物晶体和LOPC晶体的结构转变过程中，其室温电导率逐渐升高；电子从局域在单个分子上逐渐发展为远程离域特性。值得注意的是，该团队通过基于机器学习和神经网络的结构搜索进一步研究发现，长程有序多孔碳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，其具体结构种类可能是一个非常庞大的数目。

综上，该研究利用化学电荷注入技术，基于结构明确的C₆₀分子晶体，实现了包含巨大数量碳原子体系的热力学状态和动力学过程的精确调控，在常压条件下获得了克量级的长程有序多孔碳晶体，系统地表征了其微观结构和相关性质，为新型碳基晶体结构构建、性质研究及应用探索提供了新的视野。

该工作获得科技部重大研究计划、国家自然科学基金等的支持。

[论文链接](#)

微观结构表征

理论模拟和原位MAS-SSNMR测试

电子态密度、X射线吸收精细结构谱和电学性质测试

研究团队单位：中国科学技术大学

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](http://iikx.com)转发