科学家揭示纳米碳和超薄二维硅酸盐复合新机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/25745.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！

高效多功能先进新材料的开发是信息、航天、能源化学等高科技领域取得突破性进展的关键。由于不同材料的异质性，复合材料在形成过程中常常面临均一性和稳定性等问题，尤其是在如纳米和分子尺度的微观层面，问题变得更为突出。因此，开发有效方法将不同优良特性的材料进行有机结合，是该领域亟待解决的科学问题。

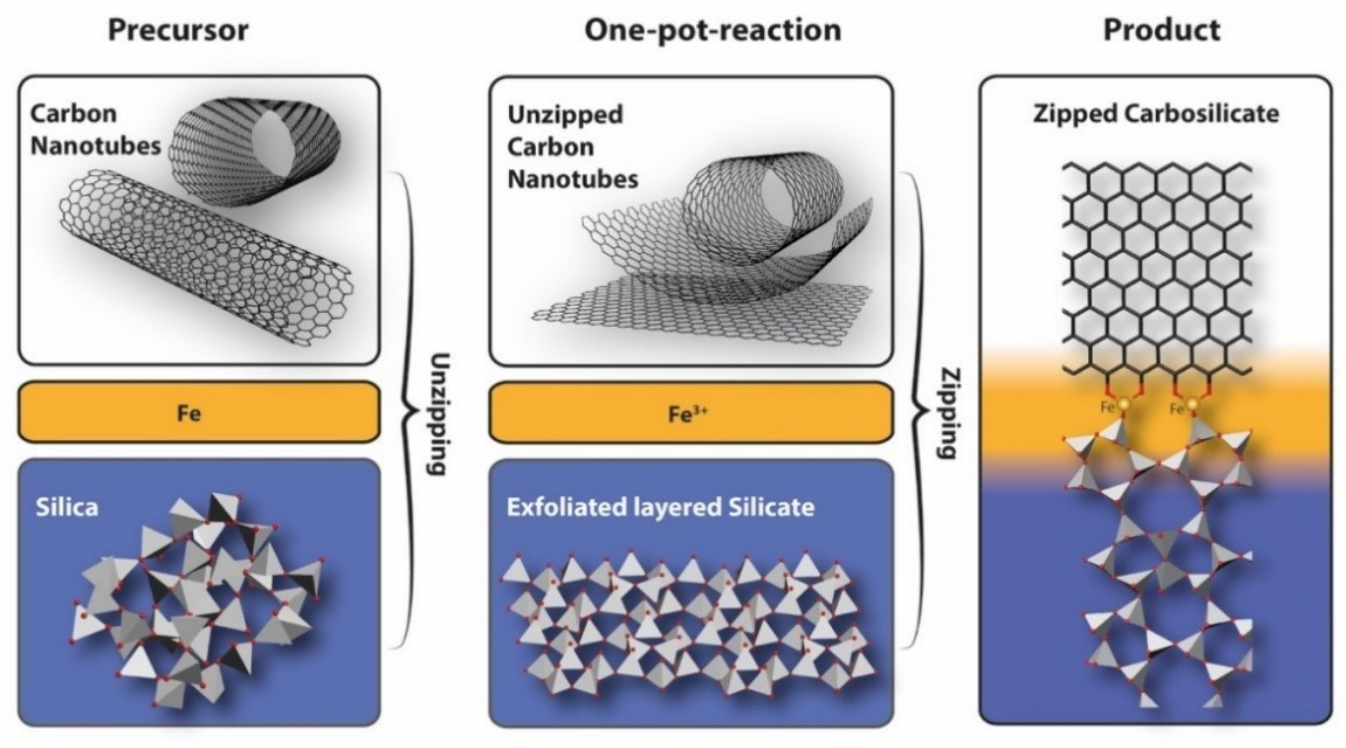
高性能纳米碳材料和超薄二维硅酸盐材料因其可设计性和广泛的性能调节空间在高端材料领域引起了关注。将这两类具有截然不同性能的纳米材料进行可控复合，无疑是拓展新材料以获得新性能的有效途径。碳材料存在化学惰性，因此之前的尝试多是通过物理复合的方式将这两种材料结合，以获得具有二者性能的复合材料。虽然这种方法相对简单，但在微尺度上难以保证均一性和复合程度，从而限制了其在高端领域的应用前景。如何通过稳定的化学键合实现这两种材料的化学复合，成为解决上述问题的关键。近日，中国科学院青岛生物能源与过程研究所等研究人员通过弱制氢反
应驱动创造性地制备了
一类新的碳和硅酸盐二维超薄复合材料，并命
名为
carbosilicate（碳硅酸盐
），相应材料在电解水制氢过程中展示出优于
商业IrO_x
的效果。通过协同作用，三种自身不能持续发生的反应（铁与水反应制氢，碳管形成石墨烯带，块体氧化硅分解重排形成二维硅酸盐层）在温和的水热条件下持续发生并化学键合，最终形成新的复合材料。

为了进一步探究反应机理，研究人员以AIMD模拟为主要手段，结合相应静态计算，研究了碳纳米管在含铁离子溶液中的“裂解”机理。结果表明铁离子的存在对碳纳米管的裂解具有重要促进作用，特别是在初步碳-碳键裂解过程中，有铁离子参与的第一个碳-碳键裂解能量（0.06 eV）比没有铁离子参与的裂解能量（3.3 eV）低了5倍。同时计算结果还表明溶液中氧（或氢氧根）的参与对碳纳米管的持续裂解起到关键作用。这些计算结果与实验结果相吻合，为实验提供了有力验证。

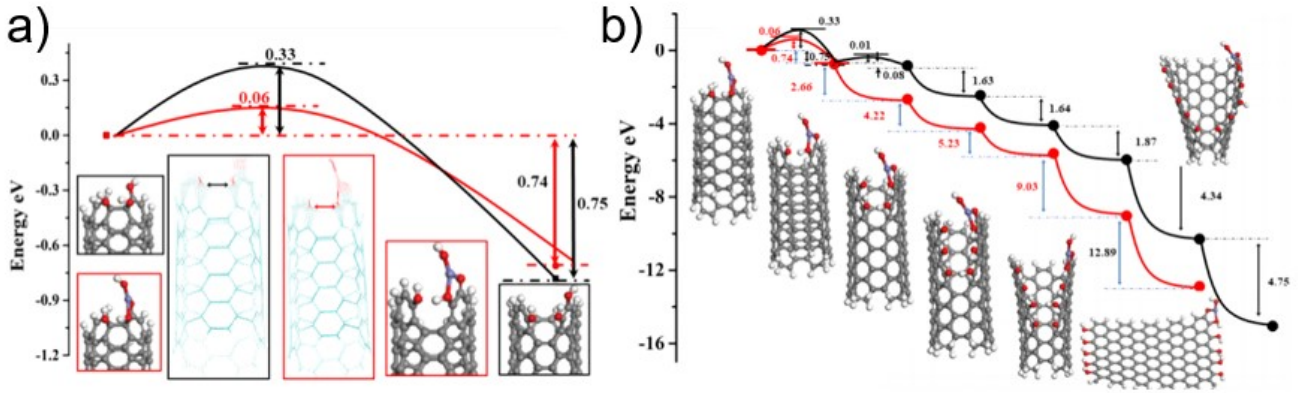
这种新的化学复合材料家族，结合了纳米碳和超薄二维硅酸盐的优势，兼具二者无法单独提供的特殊性能。同时，广泛的可调节性和经济性，为该材料家族的应用拓展提供了广阔空间。这项研究揭示了三种本身无法持续发生的反应如何通过协同促进作用得以持续进行，展示了协同化学的新机制。协同作用机制的提出为相关新材料和新过程的开发提供了更简单的思路和更广泛的可能性。

相关成果发表在《德国应用化学》上。研究工作得到国家自然科学基金等的支持。

论文链接



碳硅酸盐可能的“ 解开和连接 ”合成过程的示意图



通过AIMD模拟计算反应机理

研究团队单位：青岛生物能源与过程研究所

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转发