
碳纳米环单分子器件对称性调控研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36737.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！

碳纳米环单分子器件对称性调控研究取得进展

。单分子器件为探索纳米尺度电荷传输与化学反应提供了重要平台。长期以来，单分子器件依赖在分子末端引入锚定基团，以实现与电极的连接，从而形成以线性结构为主的器件架构，一定程度上限制了器件结构与功能的拓展。

中国科学院化

学研究所等团队基于碳纳米

环带分子，构筑了环形架构的单分子器件

。该体系无需传统锚定基团，利用碳骨架

曲率诱导的轨道极化，形成Au -

键合，降低了接触电阻。

在外加电场作用下，器件可实现单分子C - C

键的可控断裂与开环。这为分子电子学引入了新的环形架构，拓展了单分子器件在几何构型与功能设计上的空间。

团队进一步研究了分子几何对称性对电子学与化学性质的调控作用，通过调控碳纳米环的对称性构建分子内曲率梯度，以“水滴形”碳纳米环为模型，提出“曲率调控反应位点”策略。研究表明，分子内部曲率差异可决定C - C键的断裂位置，为单分子反应在温和条件下的精确控制和器件设计提供了新思路。

团队还在碳纳米环主链中嵌入苊单元，构建了低对称性环形结构。该设计打破了原有体系的电子等效性，使分子轨道在空间上发生局域化，实现了室温下稳定的三态电导特性。理论计算进一步表明，对称性降低导致电子传输通道离散化，实现了室温下的三值逻辑功能。

该研究为分子电子学由二值向多值体系的拓展提供了可行路径，揭示了分子几何对称性与曲率在电子与化学行为调控中的作用规律，为构筑具有复杂几何与拓扑特征的新型分子材料和器件拓宽了新思路。

相关研究成果分别发表于J. Am. Chem. Soc.和Angew. Chem. Int.

Ed.上。研究工作得到国家自然科学基金委等的支持。

论文链接：[1](#)、[2](#)

曲率诱导的C-C键选择性断裂与单分子器件构筑

对称性调控实现单分子器件室温三态开关

研究团队单位：化学研究所

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](http://www.iikx.com)转发