[Preface]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201803232

www.whxb.pku.edu.cn

石墨炔：从合成到应用

刘鸣华¹, 李玉良²

¹国家纳米科学中心, 北京 100190

²中国科学院化学研究所, 北京 100190

Graphdiyne: from Synthesis to Application

LIU Minghua¹, LI Yuliang^{2,*}

¹ National Center for Nanoscience and Technology, Beijing 100190, P. R. China.

² Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

Email: liuminghua@nanoctr.cn (L.M.); lily@iccas.ac.cn (L.Y.).

石墨炔是一种新型碳的同素异形体, 是由 sp 和 sp^2 两种杂化形式的碳原子组成的二维层状材料¹。具有中国自主知识产权的石墨炔自 2010 年被首次成功合成以来, 吸引了全世界来自化学、物理、材料、生物和电子等学科的科学家对其进行探索²。石墨炔独特的纳米级孔隙、二维层状共轭骨架结构及半导体性质等特性, 使之在能源、电化学、光催化、光学、电子学等诸多领域优势显著³。石墨炔的基础和应用研究已取得了重要成果, 并迅速形成了一个新领域。本专辑中收集了我国部分科学家在相关领域的研究成果, 文章将展示石墨炔的理论研究, 实验合成、修饰、结构表征、性质研究与应用方面的最新进展。

帅志刚等⁴对石墨炔, 以及锡烯等层状体系的电子结构、形变势、电声耦合和电荷输运性质进行了回顾。指出具有独特电子结构和高迁移率的石墨炔能成为继石墨烯之后未来的纳米电子器件材料。此外他们还分析了形变势方法对石墨烯和石墨炔等二维材料研究的适用性。张胜利等⁵使用第一性原理计算研究了单层石墨炔的纳米带电子输运性质和及石墨炔对小分子的吸附。从能带、载流子浓度等方面全面探讨了 Sc、Ti 掺杂石墨炔对甲醛分子(HCHO)的响应。研究了石墨炔与氨基酸分子间相互作用, 研究了吸附氨基酸对石墨炔电子输运的影响, 探讨石墨炔在生物传感方面的潜在应用。

张锦等⁶总结了石墨炔合成方法的研究进展, 包括有机全合成、表面在位化学反应和溶液相聚

合反应等几个方面。石墨炔中炔键单元的高活性为其化学修饰与掺杂提供了良好的平台, 李玉良等⁷介绍了石墨炔的非金属杂原子掺杂、金属原子修饰以及表面改性, 并深入探讨掺杂与衍生化对石墨炔材料的电子性质的影响及其对光电化学催化性能的协同增强。崔晓莉等⁸以碳化钙和三溴苯为原料, 通过机械化学方法合成了氢取代石墨单炔, 发现其为 p 型半导体, 带隙为 2.30 eV, 在催化产氧和光催化方面具有应用潜力。

石墨炔结构的表征, 对于指导石墨炔合成, 探索石墨炔结构与其物理化学性能之间的构效关系等方面都具有非常重要的意义。鲁统部等⁹总结了表征石墨双炔形貌、厚度、晶体结构以及碳的成键形式的方法。

王丹等¹⁰基于石墨炔的电子转移增强特性, 概述了石墨炔及其电子转移增强特性的新研究进展, 包括金属氧化物/石墨炔、金属纳米颗粒/石墨炔、聚合物/石墨炔以及染料分子/石墨炔等多种石墨炔基材料。文章从理论和实验研究两个方面详细阐述了石墨炔的电子转移增强特性、石墨炔与不同材料的相互作用以及相关的应用。而王吉政等¹¹通过石墨炔修饰, 大幅提高了 ZnO 紫外探测器的性能, 并发现石墨炔修饰的 ZnO 探测器性能的提高归因于石墨炔良好的空穴传输特性。

石墨炔宽的层间距、大的比表面积、独特的三维孔隙结构和好的导电性使其在能源存储器件电极材料应用中具有巨大的潜力。黄长水等¹²详细介绍了近年来石墨炔在储能方面的理论分析和实

验进展。石墨炔作为电极材料在储钠储锂方面的容量与理论值相近。此外石墨炔作为电极材料成功应用于超级电容器和金属-硫电池,并表现出了优异的容量存储性能。石墨炔纳米形貌的调控、石墨炔的热处理,以及异原子的掺杂等均可以有效地提高石墨炔在这些储能器件中的性能。而刘辉彪等¹³发展了基于超分子化学的新方法对石墨炔进行原位氮掺杂,通过利用石墨炔与有机共轭分子间强的 π - π 作用,原位制备了石墨炔/吡吩复合材料薄膜,为可控制备掺氮石墨炔复合材料提供了新的思路。

石墨炔自成功合成以来引起了研究者极大的兴趣和关注。目前为止,石墨炔的基础和应用研究方兴未艾,显示了巨大广阔的空间。石墨炔的可控制备方法、系统表征方法、可控结构等仍然需要不断去探索。另外,石墨炔在电子、能源、催化、信息技术等方面的研究在未来五年将展示无限的创新空间。

References

- (1) Li, Y. J.; Xu, L.; Liu, H. B.; Li, Y. L. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 2572. doi: 10.1039/C3CS60388A
- (2) Li, G. X.; Li, Y. L.; Liu, H. B.; Guo, Y. B.; Li, Y. J.; Zhu, D. B. *Chem. Commun.* **2010**, *46*, 3256. doi: 10.1039/b922733d
- (3) Jia, Z. Y.; Li, Y. J.; Zuo, Z. C.; Liu, H. B.; Huang, C. S.; Li, Y. L. *Acc. Chem. Res.* **2017**, *50*, 2470. doi: 10.1021/acs.accounts.7b00205
- (4) Xi, J. Y.; Nakamura, Y.; Zhao, T. Q.; Wang, D.; Shuai, Z. G. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 961. [奚晋扬, 中村悠马, 赵天琦, 王冬, 帅志刚. 物理化学学报, **2018**, *34*, 961.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201802051
- (5) Chen, X.; Zhang, S. L. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 1061. [陈熙, 张胜利. 物理化学学报, **2018**, *34*, 1061.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201801311
- (6) Zhou, J. Y.; Zhang, J.; Liu, Z. F. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 977. [周劲媛, 张锦, 刘忠范. 物理化学学报, **2018**, *34*, 977.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201801243
- (7) Li, Y. J.; Li, Y. L. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 992. [李勇军, 李玉良. 物理化学学报, **2018**, *34*, 992.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201801302
- (8) Lee, J.; Li, Y.; Tang, J. N.; Cui, X. L. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 1080. [李乔丹, 李永, 唐佳宁, 崔晓莉. 物理化学学报, **2018**, *34*, 1080.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201802262
- (9) Lu, X. L.; Han, Y. Y.; Lu, T. B. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 1014. [卢秀丽, 韩莹莹, 鲁统部. 物理化学学报, **2018**, *34*, 1014.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201801171
- (10) Zhao, Y. S.; Zhang, L. J.; Qi, J.; Jin, Q.; Lin, K. F.; Wang, D. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 1048. [赵亚松, 张丽娟, 齐健, 金泉, 林凯峰, 王丹. 物理化学学报, **2018**, *34*, 1048.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201802281
- (11) Huang, Z. J.; Yu, Z. N.; Li, Y.; Wang, J. Z. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 1088. [黄志娟, 喻志农, 李言, 王吉政. 物理化学学报, **2018**, *34*, 1088.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201801251
- (12) Shen, X. Y.; He, J. J.; Wang, N.; Huang, C. S. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 1029. [神祥艳, 何建江, 王宁, 黄长水. 物理化学学报, **2018**, *34*, 1029.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201801122
- (13) Chen, Y. H.; Li, J. F.; Liu, H. B. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2018**, *34*, 1074. [陈彦焕, 李教富, 刘辉彪. 物理化学学报, **2018**, *34*, 1074.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201801231