

一种新的分子结晶碳 C₆₀

早在 1970 年,为了解释已经观察到的关于星际间未知射线的吸收和发射现象,苏联理论化学家 D. A. Bochvar 等提出了 C₆₀ 的结构及存在的假设。尔后,这一理论假设一直吸引着众多的学者。

到目前为止,只有石墨碳和金刚石二种碳的结晶形态被很清楚地了解。它们都是以碳原子为重复单元。然而 C₆₀ 则不同,它是以分子单元为重复单元,每个分子单元是由 60 个碳原子按一定规律组成的空心球(图 1)。这一空心球由 32 个面,即 12 个等五边形和 20 个等六边形组成。作为一分子结晶碳家族,除 C₆₀ 外还存在 C₇₀、C₈₄,很可能还有 C₁₈₀、C₂₄₀ 等。C₆₀ 的吸收光谱和观察到的星际性未知光谱相似。这证明了苏联科学家的假设并可以设想在宇宙间存在着大量这样的分子。

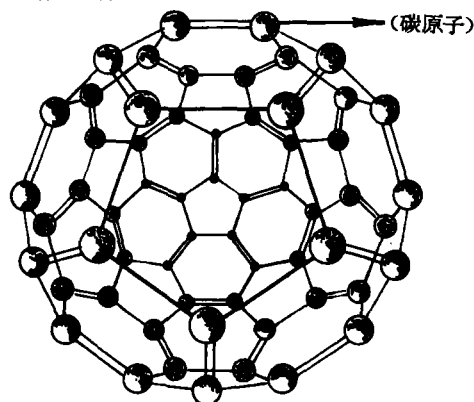


图 1 C₆₀ 结构示意图
(碳原子间的单键或双键联法)

第一次合成 C₆₀ 是在 1980 年,美国科学家 R. E. Smalley 利用一激光束冲击浸泡在液氮中的石墨电极。从石墨电极表面被剥离下来的碳原子重新结合成新的分子,其中就有 C₆₀。现在人们可合成足够的 C₆₀ 供基础及应用基础研究。1990 年底,西德和美国科学家合作发展了一种新的简单有效的合成工艺:在一个反应器内注满液氮,然后在二石墨棒间加压使其放电产生电弧,在这样的反应产物中包含有 C₆₀、C₇₀ 等。产物可利用溶剂萃取提纯。利用这一方法可得到纯度达化学纯的大量产物。质量谱的研究允许科学家们测定其产物的质量,从一部分产物的分子量为 720,另一部分大约为 840 来看,科学家们确定这二者各自包含有 60 和 70 个碳原子,它们主要由 ¹²C 组成,¹³C 的含量极少。使用红外光谱、X 射线、核磁共振等技术可确定 C₆₀ 中每个碳原子的物理化学特性。由于 C₆₀ 具有高度的对称性,实验结果出乎意料地简单明了。例如当应用 ¹³C 核磁共振技术,由于在 C₆₀ 中只有一个碳同位素具有磁性,就可以此为原位来测量各个碳原子间可能的键结形式。C₆₀ 的共振谱图仅由一条很细的曲线组成,这表明在 C₆₀ 中不同的碳原子位置是相互对称的。红外光

材料工程

谱和 Raman 光谱也可用来研究分子间原子的不同振动。这里只有很窄的吸收带被观察到,而这种情况在一个如此大的分子间很少见,原因仍是 C₆₀ 具有高度的有序对称性。

对于 C₇₀ 情况就有所不同,它不再是球形而是橄榄球形(图 2)。由于结构的变化,各种光谱结果就明显不同于 C₆₀。理论预测 C₇₀ 中碳原子间存在 5 种不同的键已经由核磁共振谱得到证明。另外,红外和 Raman 谱图也表明 C₇₀ 较 C₆₀ 有宽的吸收带。

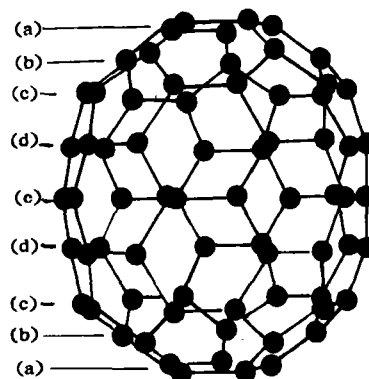


图 2 C₇₀ 结构示意图(碳原子间有 5 种不同的键结形式,从 a 到 e)

具有特殊性能的 C₆₀ 将给碳化学工业带来一个新的发展。球形分子或准球形分子特性有许多优点,它具有特殊的相,互反应性、可移动性及稳定性。C₆₀ 的磁性能似乎和所包含的碳原子数目有关,例如,和励磁响应有关的磁化率 C₇₀ 二倍于 C₆₀。

关于 C₆₀ 的应用。由于 C₆₀ 分子具有球形结构,因此在润滑领域中,它的作用如同一微滚珠。C₆₀ 的氢化物和氟化物的研究正在开展。已经发现 C₆₀H₃₆ 和 C₆₀F₃₆ 具有很高的稳定性(直到 400~500℃)。C₆₀ 的金属化合物 C₆₀M 也正在研究中(例如 M 为镧(La)或钾(K))。选择不同的金属元素可以得到不同性能的新材料。此外,C₆₀ 特有的电磁性及高度稳定性也可以在电池及高能电容领域一显身手。作为电极材料,C₆₀ 可以极容易地改善其转化率及特性。另外在催化领域,任何一个功能化后的碳原子都可以作为一个光学、化学反应的活化点。再则,由于 C₆₀ 掺杂极为方便,因此,有人设想将来在微电子技术领域以 C₆₀ 取代镓和硅。

(陈祥宝)

(上接第 51 页)

参考文献

1. 王振清,微机在金属材料工程中的应用,上册,1989,12,北航印刷
2. 周自强等,北航学报,1988,2,P22
3. 唐振廷等,兵器材料科学与工程,1990,1,P41
4. 张建华等,热处理自动化第三届学术会,1987,7
5. 刘福顺等,全国 X 射线衍射计算机软件会议论文集,P73