**5. “二维碳石墨炔可控制备与性质”重大项目指南**

合成、分离新的不同维数碳同素异形体是过去二三十年物质科学领域的研究焦点，科学家们先后发现了三维富勒烯、一维碳纳米管和二维石墨烯等新的碳同素异形体，这些材料均成为了国际学术研究的前沿和热点。石墨炔作为具有中国自主知识产权的新材料，在国际上产生重要影响，正在形成一个新的研究领域。本重大项目将通过深入研究二维碳石墨炔新的合成方法学、大面积高质量石墨炔单层膜、少数层薄膜的可控生长新方法、建立适合二维石墨炔单层膜和体材料表征的新方法、以及石墨炔物理、化学新性质等，取得一系列具有重要影响、具有我国自主知识产权的成果，形成有特色的研究体系，引领国际上该领域的发展。

　　一、科学目标

　　本项目拟选择建立有特色的表征与计算机模拟的新方法指导石墨炔性质与功能研究，以获得高质量石墨炔少数层薄膜及单层石墨炔薄膜生长为突破点，理解石墨炔的本征性质，并在化学修饰和掺杂研究的基础上拓展石墨炔的基础和应用研究，实现如下科学目标：建立高质量二维碳石墨炔基材料大面积、高取向薄膜的可控制备方法学；实现二维碳石墨炔单层膜的可控合成及原子相分辨结构探测；研究二维碳石墨炔材料的能带与结构调控机制、性质与应用；发展二维碳石墨炔的模拟、表征与理论计算的方法。通过上述研究推动石墨炔科学研究的快速发展。

　　二、研究内容

　　（一）石墨炔化学合成新方法。

　　发展石墨炔高效、低成本、重复性好的合成方法和可控石墨炔大面积薄膜的生长和自组装新技术，获得宏量石墨炔体材料和大面积、高质量、厚度以及层数可调的石墨炔薄膜；探索制备单层石墨炔薄膜的可控生长新方法和技术。

　　（二）二维碳石墨炔的模拟、表征与理论计算。

　　发展和利用第一性原理和分子动力学计算理论模拟方法研究并揭示石墨炔的形成和生长机理及其规律，指导设计和优化合成反应及新性质、新功能研究，实现对单层石墨炔薄膜和少数层石墨炔结构、电子结构、微区结构以及单层石墨炔本征物理和化学性质的模拟计算和表征。

　　（三）二维碳石墨炔动态过程研究。

　　研究二维石墨炔有序结构中载流子、能量以及光子的转移和传输过程，探索在复杂、极端化学反应下物质演变的过程和规律（包括结晶化、有序化等），阐明二维石墨炔的化学结构、电子结构和聚集态结构对其性能的影响，揭示二维石墨炔及其聚集态的形成机理、生长机制和动力学过程。

　　（四）石墨炔的功能化。

　　发展重复性好、可大尺寸组装高有序、高取向石墨炔薄膜和聚集态结构的新技术和新方法，研究二维石墨炔小尺寸、不同维数的新效应，探索石墨炔新应用；发展石墨炔基复合材料，研究石墨炔基复合材料表面和界面微结构，实现对其结构和功能的调控。

　　三、申请注意事项

　　（一）申请书的附注说明选择“二维碳石墨炔可控制备与性质”（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

　　（二）申请人申请的直接费用预算不得超过1700万元/项（含1700万元/项）。

　　（三）本项目由化学科学部负责受理。