

单壁碳纳米管精准结构调控及在能源电子领域应用进展

朱烨[†], 宋丽秀[†], 延卫^{*}

西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 712046

[†] 同等贡献

^{*} 联系人, E-mail: yanwei@xjtu.edu.cn

2025-08-27 收稿, 2025-11-03 修回, 2025-11-05 接受, 2025-11-06 网络版发表

云南省新能源材料创新联合体项目(202302AB080018)资助

摘要 单壁碳纳米管(single-walled carbon nanotubes, SWCNTs)因其独特的电子、力学和热学性能,在能源、电子和生物医学等领域展现出巨大应用潜力。然而,其性能的充分发挥依赖于对其手性、直径及表面化学状态的精准调控。本文系统梳理了在SWCNTs水平或垂直生长模式下,精准调控制备所涉及的催化剂设计、生长条件动态优化、衬底与碳源对SWCNTs的结构调控作用及新型制备方法等技术,这些方法实现了对SWCNTs手性和直径等的精准调控;同时,探讨了SWCNTs在能源和电子领域的应用;最后,分析了其规模化制备面临的成本、纯度、分散性等挑战,展望了低成本催化剂开发、AI优化工艺及跨学科融合等对SWCNTs合成的影响,为SWCNTs的规模化制备及应用提供了参考。

关键词 单壁碳纳米管, 催化剂, 手性, 直径, 能源, 电子

1991年, Ijima在高分辨透射电子显微镜下首次观察到一维多壁碳纳米管^[1]。1993年, Ijima^[2]和IBM公司的Bethune等人^[3]利用电弧放电法分别制备出了单壁碳纳米管(single-walled carbon nanotubes, SWCNTs)。其因独特的结构特性与优异的性能优势,多年来在材料科学、电子学、纳米技术等众多领域引发了广泛研究与关注。SWCNTs可以看作是由单层石墨烯以一定角度卷曲而成的螺旋管状结构,独特的卷曲方式使SWCNTs的结构呈现出高度的手性特征。手性作为核心结构特性可直接决定SWCNTs的电子属性。单壁碳纳米管的手性可以用一对手性指数(n, m)来表示^[4,5],当满足 $n - m = 3q$ (n 和 m 为非负整数, $n \geq m$, q 为整数)时, SWCNTs呈现金属性,金属性单壁碳纳米管(metallic single-walled carbon nanotubes, m-SWCNTs)可以承载超过 10^9 A cm^{-2} 的电流密度^[6],比Cu高出2~3个数量级^[7],是微型互连电缆、纳米导线和柔性电子器件的理想材料;不满足该

条件时,则展现半导体性,在特定条件下(如长纳米管、高质量晶体管),半导体性单壁碳纳米管(semiconducting single-walled carbon nanotubes, s-SWCNTs)载流子迁移率可达 $7.9 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$,比硅基电子器件高3个数量级^[8,9],这种特性使其在半导体器件制造中极具潜力,例如作为高性能场效应晶体管的沟道材料,有望推动下一代集成电路技术的革新。

除电子特性外, SWCNTs还具备多项突出性能。纳米级管径与中空结构使SWCNTs的比表面积理论值高达 $1315 \sim 1800 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ ^[10]。在气体传感器领域,大比表面积可以充分接触目标气体,从而大幅提升传感器灵敏度^[11];用于超级电容器的电极材料时,有助于电荷快速存储与释放,优化电容器性能^[12]。单壁碳纳米管的理论导热系数可达 $6600 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ^[13],未来有望应用于热界面材料中。在力学性能上,单壁碳纳米管的杨氏模量可达 1 TPa 左右^[14],抗拉强度约为 100 GPa ^[15],比钢高2个

引用格式: 朱烨, 宋丽秀, 延卫. 单壁碳纳米管精准结构调控及在能源电子领域应用进展. 科学通报, 2026, 71: 1562–1575

Zhu Y, Song L, Yan W. Progress in the precise structural regulation of single-walled carbon nanotubes and their applications in energy and electronics fields (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 1562–1575, doi: [10.1360/CSB-2025-5427](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5427)

数量级, 将其添加到聚合物或金属等基体中, 可显著增强复合材料的力学性能^[16,17], 在航空航天、汽车制造、生物医学等对材料轻量化与高强度有需求的领域展现出了广阔的应用前景^[18]。

尽管SWCNTs的各项性能优异, 但在实际应用中受限于结构调控难题。手性控制是SWCNTs结构调控的关键。电子器件的开关比与能带结构高度依赖SWCNTs的手性, 如场效应晶体管需半导体性SWCNTs作沟道材料才能实现高开关比^[19]。然而, 现有的制备方法, 如化学气相沉积(chemical vapor deposition, CVD)、电弧放电法等制备得到的SWCNTs多为多种手性混合物, 分离提纯单一手性SWCNTs不仅难度大, 且成本高昂。开发高效手性控制合成与分离技术, 是实现其在电子器件大规模应用的必由之路。管径调控同样影响SWCNTs的性能。管径变化会改变SWCNTs材料的量子限域效应, 管径越小, 材料的能带间隙越大^[20,21], 在纳米光学和量子计算等领域应用价值显著; 同时, 管径也影响SWCNTs的化学修饰活性, 小直径使其表面原子活性更高, 利于材料的功能化^[22]。但目前制备方法难以精准控制管径, 探索新的合成方法以实现直径精准调控, 是拓展其应用领域的关键。此外, 规模化制备与成本控制是SWCNTs产业化的瓶颈。实验室制备虽能产出高质量产品, 但需严格控制反应条件。昂贵的设备、原料以及低产量, 使SWCNTs从实验室到工业的规模化应用存在巨大鸿沟, 优化SWCNTs制备工艺、改进催化剂体系、探索新制备技术, 是降低成本、提高产量, 实现SWCNTs产业化的重要方向。

本文旨在梳理近年来SWCNTs结构精准调控制备技术及其在能源与电子领域应用的研究进展, 总结在不同生长模式下, 催化剂设计、生长条件动态优化、衬底与碳源对SWCNTs的结构调控作用以及新型制备方法, 揭示各类技术对SWCNTs结构参数的影响机制。同时, 探讨近年来SWCNTs在能源领域及电子领域中的应用, 并分析其结构调控与性能提升之间的联系。结合当前研究现状, 对SWCNTs规模化制备过程中面临的成本控制、产量提升以及纯度控制等挑战进行深入剖析, 并对未来研究方向提出展望, 以期为推动SWCNTs从实验室研究迈向工业化应用提供参考。

1 SWCNTs的结构调控制备技术

单壁碳纳米管的生长模式是其结构精准调控的基础前提, 主要分为水平生长(含水平定向生长)与垂直生

长两大类, 二者因产物空间排布特性差异, 适配不同应用场景且调控逻辑各有侧重。其中, 水平生长模式(尤其是水平定向生长)是近年研究的核心突破方向, 该模式可实现SWCNTs的有序排列与手性/直径精准控制, 为电子器件集成(如场效应晶体管沟道)提供关键材料基础; 而垂直生长模式则侧重构建高比表面积三维阵列, 在能源电极等场景中展现优势。本文将从催化剂设计、生长条件动态优化、衬底与碳源的结构调控作用及新型制备方法四个维度, 系统阐述针对不同生长模式的SWCNTs结构调控技术。

1.1 催化剂设计

催化剂是单壁碳纳米管结构可控生长的核心因素。研究表明, 金属催化剂的尺寸、电子结构、熔点和稳定性直接影响SWCNTs的产率、纯度、直径及手性分布^[23~25]。近年来, 研究者通过催化剂设计实现了对SWCNTs的手性和直径的精准调控^[26,27]。

催化剂的熔点和结构稳定性影响着SWCNTs的生长, 传统液态催化剂因结构不稳定难以实现对SWCNTs的手性控制。Zhang等人^[28]首次通过气溶胶法合成近单分散难熔金属纳米颗粒(钨、钼、铼)作为固体催化剂, 直径范围为1~5 nm, 浓度达 $10^5 \sim 10^7$ 个/ cm^3 。经尺寸选择和还原处理后, 生长的SWCNTs手性角度可控制在 $19^\circ \pm 5^\circ$ (图1(a)), 手性纯度超过93%。北京大学张锦研究组^[29]合成结构稳定的碳化钼(Mo_2C)和碳化钨(WC)固体催化剂, 成功合成具有特定手性的水平排列SWCNTs阵列。通过对碳管成核效率的热力学控制和生长速度的动力学控制, 最终实现了结构为手性指数($2m, m$)类碳纳米管阵列的富集生长, 不仅得到了具有高手性选择性的SWCNTs水平阵列, 同时也提供了一种基于固体催化剂的控制碳纳米管结构的新思路。

催化剂的尺寸影响着SWCNTs的直径分布, 双金属体系可以通过一方对另一方的稳定分散、限制团聚来实现对催化剂尺寸的精确控制。Forel等人^[30]系统研究了双金属催化剂铁钌、钴钌、镍钌(FeRu 、 CoRu 、 NiRu)在SWCNTs选择性生长中的调控机制。研究表明, Ru的引入显著抑制了纳米颗粒的凝聚过程, 使催化剂颗粒在1.2~1.8 nm范围内保持稳定的直径分布。这种尺寸稳定性可归因于Ru原子对Fe基纳米颗粒的电子结构调控作用。密度泛函理论(density functional theory, DFT)计算表明Ru的加入通过降低碳扩散能垒, 实现了SWCNTs直径的可控生长。Brian等人^[31]研究了Ru对

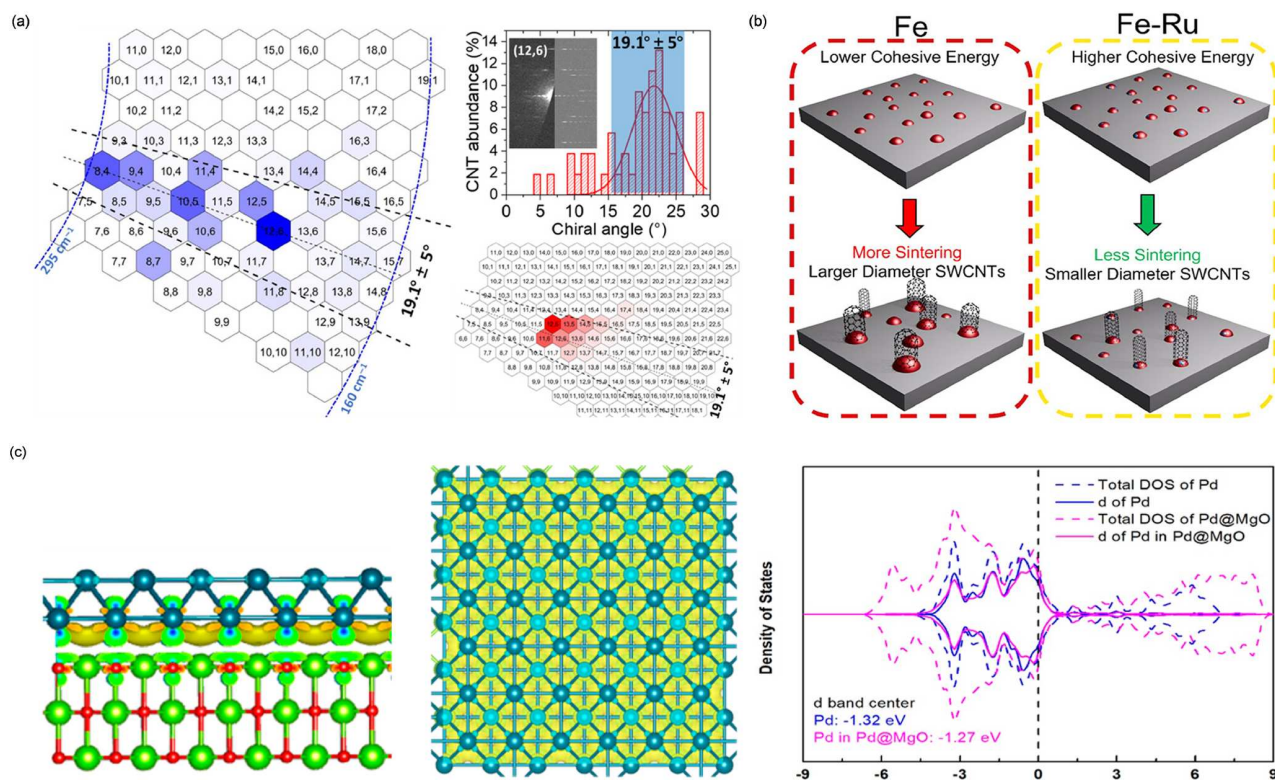


图 1 (a) Kataura图显示生长的SWCNTs手性角度可控制在 $19^\circ \pm 5^\circ$ ^[28]. (b) 纯Fe及Fe-Ru催化剂生长不同直径SWCNTs的原理示意图^[31]. (c) Pd@MgO的电荷密度差异、Pd@MgO和Pd(100)的总态密度(DOS)和Pd d电子态密度, 以及d带中心^[32].
Figure 1 (a) The Kataura plot indicates that the chirality angle of synthesized SWCNTs can be precisely controlled within $19^\circ \pm 5^\circ$ ^[28]. (b) Schematic diagram of the mechanism for growing SWCNTs with different diameters using pure Fe and Fe-Ru catalysts^[31]. (c) The charge density difference for Pd@MgO, the density of states (DOSs) of total and Pd d electron in Pd@MgO and Pd(100), as well as the d-band center^[32].

Fe催化生长小直径单壁碳纳米管的促进作用. 结果显示, Fe-Ru催化剂相较于纯Fe, 能显著提高直径小于1.1 nm的SWCNTs的选择性. DFT计算表明, Ru的加入提高了Fe 纳米颗粒的内聚能, 抑制了高温下的烧结现象, 从而维持了小尺寸催化剂颗粒的稳定性(图1(b)).

催化剂的电子结构直接影响其对碳前驱体分子的吸附能力, 从而影响SWCNTs的生长. Qin等人^[32]研究了非磁性钯(Pd)催化剂在氧化镁(MgO)载体上生长SWCNTs的机制及手性分布. 研究发现, 非磁性钯催化剂通过与氧化镁载体的电子相互作用, 使钯的d带中心上移(图1(c)), 从而增强碳前驱体的化学吸附和解离, 促进SWCNTs的生长. 结果显示, 产物为高质量SWCNTs, 直径0.7~1.6 nm, 主要为近扶手椅型(如(7, 5)、(6, 5))和(2n, n)手性, 锯齿型占比低. Chao等人^[33]通过环境透射电子显微镜观察了钯催化剂在SWCNTs生长中的相变行为, 并结合DFT计算模拟了催化剂与碳纳米管界面的相互作用. 研究发现, 催化剂表面的电子结构(如晶

格畸变、界面黏附力)会直接影响碳纳米管的成核和生长模式, 进而调控其手性和直径分布.

1.2 生长条件动态优化

除了催化剂的设计之外, 单壁碳纳米管的生长条件也与其结构调控密切相关, 主要通过改变反应压力、生长温度、添加刻蚀剂(氢气比例影响直径分布)等方法实现定向控制. 这些手段共同作用于成核动力学与生长机制, 从而实现对直径、手性及导电属性的精确调控. 例如, 通过改变压力、温度、刻蚀剂浓度^[34,35]等参数, 可以从动力学层面解决SWCNTs结构(如管径及手性)的随机性问题.

Li等人^[36]研究了不同温度对单金属层状双氢氧化物(layered double hydroxide, LDHs)催化生长SWCNTs的手性选择性与直径分布的影响. 实验表明, Co/Mg/Al LDHs催化剂在较低的600℃下即可活化, 生长出直径较小、窄手性分布、富集(6, 5)手性的SWCNTs, 700℃

时其生长的SWCNTs直径小于1.5 nm, 手性分布变宽(图2(a)). 而Ni/Mg/Al LDHs需在700℃以上才能活化, 且高温导致Ni纳米粒子团聚, 生成SWCNTs的直径分布较宽、手性选择性差. 研究表明, 低温是该实验中实现高手性选择性SWCNTs生长的关键因素.

Wang等人^[37]通过调控碳源(乙烯, C_2H_2)分压与水蒸气分压来影响SWCNTs的成核、生长效率及质量. 结果表明, 在850℃下, 当 C_2H_2 的分压为0.5~1 Pa时, 利于SWCNTs的帽结构成核; 而提高碳源分压(2.5~5 Pa)则会提前触发管体延伸, 导致缺陷增多(图2(b)). 在SWCNTs的帽结构形成后, 注入分压为0.15 Pa的水蒸气可有效去除无定形碳; 而当水蒸气的分压超过0.15 Pa时则会破坏SWCNTs的结构、降低质量. 通过精确控制压力参数, SWCNTs的产率(G带观测率)从4%提升至40%, 且保持高结晶度, 无需金属杂质后处理, 为无杂质高结晶SWCNTs的精准合成提供可行路径.

青岛科技大学何茂帅教授团队与北京大学张锦院士团队^[38]合作, 通过改变刻蚀剂浓度实现了(2*n*, *n*)手性的SWCNTs选择性生长. 研究进一步揭示了刻蚀剂浓度

对SWCNTs生长速率的影响, 当刻蚀剂(如 H_2)浓度较高时, SWCNTs的生长速率与催化剂表面的活性位点数成正比; 而在缺乏刻蚀剂时, 生长速率则取决于催化剂表面积与SWCNTs管径比(图2(c)). 通过实验验证在高碳通量且低刻蚀剂条件下, 只有活性位点多的(2*n*, *n*) SWCNTs能存活, 选择性可达82.3%. 该方法为手性SWCNTs的可控合成提供了新策略.

表1展示了不同生长条件下制备的SWCNTs的差异.

1.3 衬底与碳源的结构调控作用

实现单壁碳纳米管的结构可控生长, 不仅依赖于催化剂的设计和生长条件的优化, 更受到其生长环境中物理界面(衬底)与化学前驱体(碳源)的影响. 衬底作为SWCNTs生长的载体, 通过表面相互作用引导催化剂的尺寸分布与碳管的定向组装; 而碳源作为化学反应的原料, 其分解与供碳行为直接决定了生长的动力学过程与最终产物的结构特征.

在衬底调控方面, 表面工程是引导SWCNTs有序生

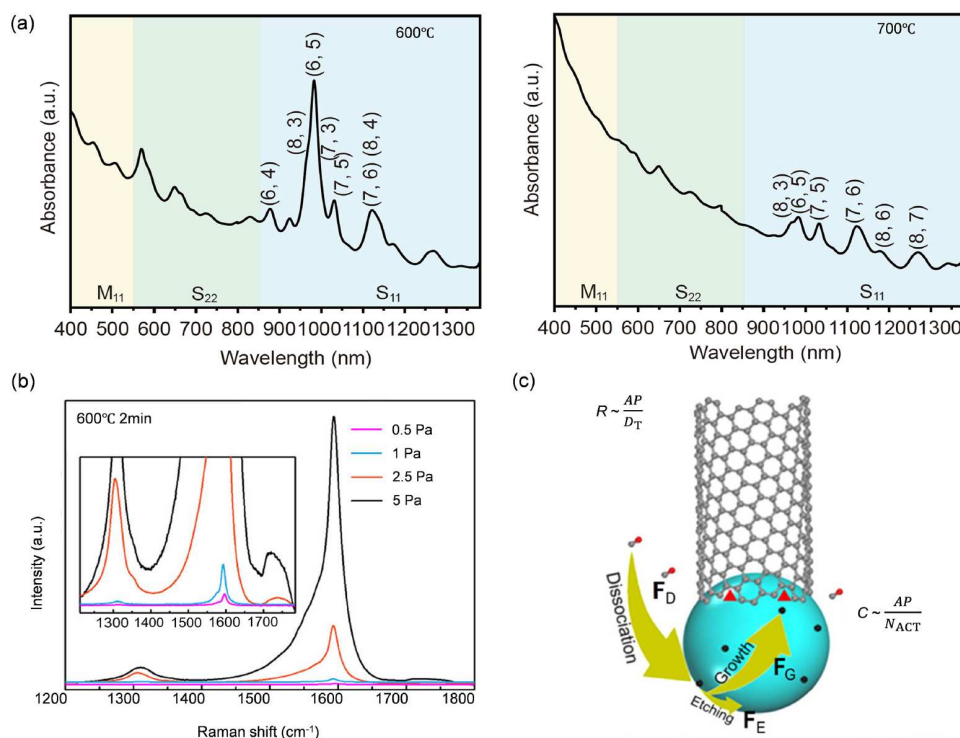


图2 (a) Co/Mg/Al LDHs催化剂在不同温度下生长SWCNTs的UV-vis-NIR吸收光谱^[36]. (b) 生长温度为850℃, 生长时间为2分钟时, 在不同碳源分压下制备的SWCNTs的拉曼光谱^[37]. (c) 刻蚀剂不足的情况下SWCNTs的生长模型^[38]

Figure 2 (a) UV-vis-NIR absorption spectrum of the as-obtained SWCNTs on Co/Mg/Al LDHs at different temperatures^[36]. (b) Raman spectra of SWCNTs grown at different carbon source partial pressures. The growth temperature is 850℃, and the growth time is 2 min^[37]. (c) Growth model for SWCNT growth in the absence of sufficient etching agents^[38]

表 1 不同生长条件下制备SWCNTs的差异

Table 1 Differences in the preparation of SWCNTs under different growth conditions

文献	催化剂	气氛	时间(min)	温度(℃)	手性	管径(nm)	$I_G/I_D(532\text{ nm})$
[28]	WC, Mo ₂ C, Re	Ar, C ₂ H ₅ OH, H ₂	—	850	19°±5°占比>93%	0.81~1.53	—
[29]	Mo ₂ C	Ar, C ₂ H ₅ OH	15	850	(12, 6)手性富集	1.21±0.26	22
[30]	FeRu	H ₂ , CH ₄ (27 mbar)/H ₂	30	700	—	<1.3(75%)	—
[31]	Fe-Ru	Ar, 乙烯	持续监测至生长停止	790±20	—	~1.14	—
[32]	Pd	Ar, CO	30	900	(7, 5)手性最多	0.7~1.6	19.2
[33]	Co/Mo	C ₂ H ₂ (0.005~0.02 Pa)	实时观察	700~900	—	—	—
[36]	Co/Mg/Al LDHs	Ar, CO	35	600	(6, 5)手性富集	<1	28.5
[37]	纳米金刚石(ND)衍生的固体碳纳米颗粒	初始生长: C ₂ H ₂ (1 Pa)/Ar、H ₂ /Ar; 二次生长: C ₂ H ₂ (0.5 Pa)/Ar、H ₂ /Ar、H ₂ O(0.15 Pa)	初始生长: 1; 二次生长: 30	初始生长: 850; 二次生长: 1000	—	0.83~1.72	52
[38]	Co	H ₂ , CO, Ar	还原10, 生长15	650	(2 <i>n</i> , <i>n</i>)占82.3%	—	—

长的有效策略. Wang等人^[39]提出一种“播种策略”, 通过对石英衬底进行可控氢氟酸蚀刻, 在其表面构建均匀分布的缺陷位点(如空位与台阶), 作为锚定氯化钾(KCl)纳米催化剂的“种子坑”(图3(a)). 该方法实现了尺寸均一(约1.4 nm)的KCl催化剂在衬底上的均匀分布, 进而催化生长出密度高达每微米10根、直径约1.3 nm的SWCNTs阵列. 电学测试与拉曼光谱分析进一步表明, 所得阵列中约85%的SWCNTs呈现金属性. 进一步地, 衬底的本征物理特性对SWCNTs的高级有序结构形成具有关键作用. Zhang等人^[40]利用六方氮化硼(hexagonal boron nitride, hBN)衬底的原子级平整表面与极低滑动摩擦特性, 实现了SWCNTs的二维范德华晶体生长(图3(b)). 分子动力学模拟表明, hBN的低摩擦特性使SWCNTs在生长过程中可自由滑动, 并在管间范德华力驱动下自发折叠、对齐, 形成间距恒定(0.33 nm)的紧密堆积阵列. 此外, hBN的晶格对称性诱导SWCNTs优先沿特定晶向排列, 最终形成具有单一手性的规整阵列(图3(c)).

在碳源选择方面, 其种类与反应特性对SWCNTs的直径与导电属性调控至关重要. Zhang等人^[41]研究了碳源种类对FeCo/MgO催化剂生长SWCNTs直径的影响. 实验对比了甲烷与乙醇这两种碳源, 发现相同条件下, 乙醇作碳源时, SWCNTs的拉曼光谱径向呼吸模(radial breathing mode, RBM)峰更集中于高波数, 对应直径更小. 因乙醇分子更易裂解, 供碳速率更高, 能让催化剂更快达到溶碳量饱和并开始成核生长, 因此缩短了催化剂颗粒团聚、长大的时间, 从而减小了SWCNTs的平均直径. 西北工业大学赵廷凯团队^[42]通过改变循环

生长时使用的碳源提高了产品中s-SWCNTs的含量. 将Fe_{0.01}Mg_{0.99}O作为催化剂主体, 第一次生长时以甲烷(CH₄)为碳源, 在H₂的还原下, 催化剂释放出晶格氧形成水蒸气, 原位刻蚀后主要得到m-SWCNTs. 通过催化剂再生策略, 在第二次生长时选择乙醇(C₂H₅OH)作为碳原料, s-SWCNTs的含量提高到93.2%, 收率为1.34%. 该成果为大规模选择性生长高纯度半导体性单壁碳纳米管提供了有效手段和新思路.

1.4 新型制备方法

单壁碳纳米管的结构精准调控(如电学属性、空间排布)是其应用的关键瓶颈. 为突破传统方法局限, 外场辅助调控(电场、等离子体)、数据驱动策略(机器学习)以及模板法等新型技术在SWCNTs合成方面的应用已取得显著进展^[43~47]. 这些方法通过定向诱导、智能优化和空间约束, 分别解决了电学纯度控制、多参数协同优化及超精密排布等核心挑战, 为定制化SWCNTs材料的开发提供了新的策略.

传统合成方法难以控制SWCNTs的电学属性. Zou等人^[45]提出电场辅助等离子体增强化学气相沉积技术(electric field-assisted plasma-enhanced chemical vapor deposition, EF-PECVD), 利用等离子体鞘层的负电荷富集特性, 选择性降低半导体型SWCNTs的能级, 使其成为热力学优势产物. 通过垂直电场同步调控带电碳碎片分布(图4(a)), 成功合成了96%纯度、密度达12根/μm的水平定向s-SWCNTs阵列, 为碳纳米管基电子器件的发展奠定了材料基础.

气溶胶化学气相沉积法的多参数调控(催化剂、温

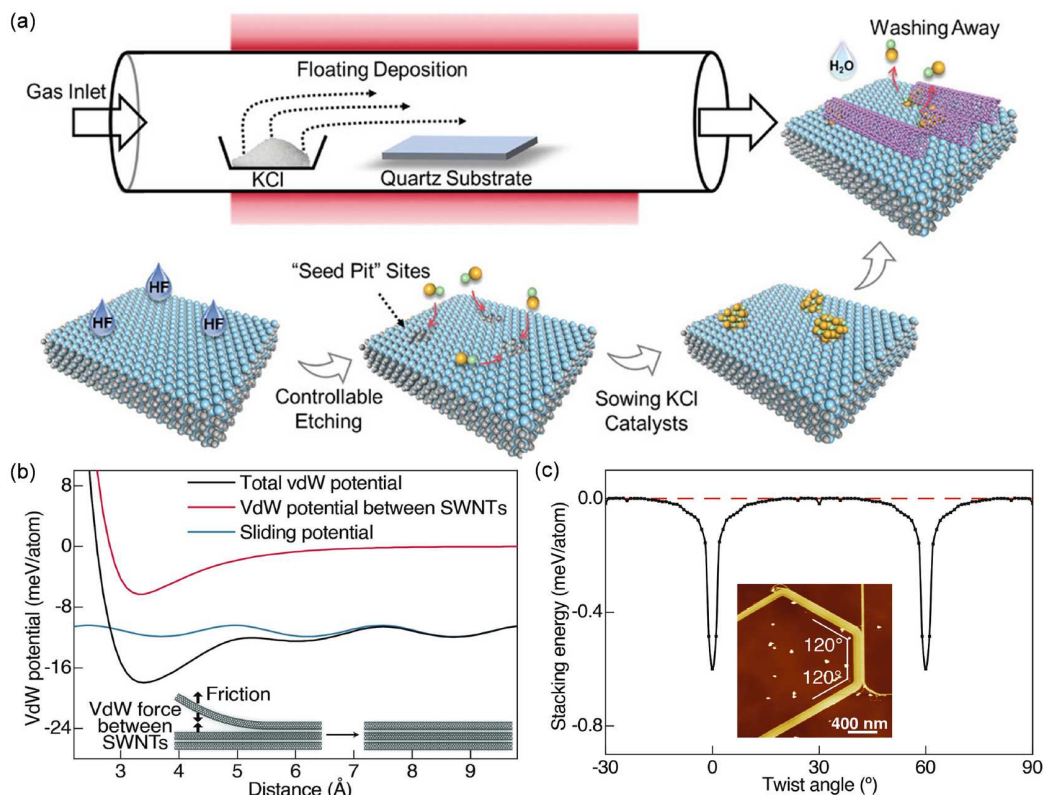


图 3 (a) 通过播种策略制备的KCl催化剂生长出水平排列的SWCNTs阵列的示意图^[39]. (b) 单壁碳纳米管段之间的范德华势能、滑动势能以及SWCNTs段之间的滑动势能和范德华势能之和。插图为由低摩擦hBN衬底提供的范德华吸引力使相邻SWCNTs相互靠近的示意图^[40]SWCNT. (c) (20, 0) SWCNT和hBN衬底之间的堆叠能随扭转角的变化。插图AFM形貌图像显示了SWCNTs在堆叠方向上的选择性^[40]

Figure 3 (a) Schematic illustration of the growth of horizontally aligned SWCNTs arrays from KCl catalysts prepared through a sowing strategy^[39]. (b) The vdW potential between SWCNTs segments, sliding potential energy, and the sum of the sliding potential energy and vdW potential between SWCNTs segments. The Inset shows the schematic of neighboring SWCNTs approaching together arising from the vdW attraction enabled by the low-friction hBN substrate^[40]. (c) The stacking energy between a (20, 0) SWCNT and hBN substrate as a function of the twist angle. The inset AFM topography image shows the selectivity in the stacking direction^[40]

度、碳源比例)长期依赖经验试错。Krasnikov等人^[46]系统评估了6种机器学习算法对气溶胶化学气相沉积法合成SWCNTs的预测性能。基于369组实验数据(涵盖催化剂用量、温度、碳源流量等参数),发现人工神经网络(artificial neural network, ANN)在预测透明导电膜品质因子(R_{90})、产率及结构质量(I_G/I_D)时表现最优,平均绝对百分比误差为22%~27%(图4(b))。该策略为开发“按需定制”SWCNTs的自主合成系统提供了新思路。

传统薄膜法合成的SWCNTs间距不均、朝向分布宽,限制了其在超微尺寸器件的应用。Sun等人^[47]提出了一种基于DNA折纸术的空间位阻集成技术(steric hindrance-induced nanomaterial efficient integration, SHINE),实现了SWCNTs间距24.1~10.4 nm的精确调控(图4(c))。利用DNA砖晶体(DNA brick crystals)模板构建三维纳米沟槽,通过DNA杂交(DNA hybridization)将

碳纳米管包裹在DNA链中,并引导其定向排列于沟槽内。该方法结合静电排斥与杂交特异性,使SWCNTs阵列角度偏差 $<2^\circ$ 、组装率 $>95\%$,其间距均匀性(inter-distance consistency, IDC值低至0.001)远超薄膜法。这种自下而上的组装策略为SWCNTs在超缩微电子器件的应用奠定了基础。

综上所述,与传统方法相比,上述新型制备方法在控制SWCNTs的电学属性、空间排列及优化效率等方面展现出显著优势,表2对此进行了对比。

2 SWCNTs在能源与电子领域的应用

2.1 能源领域应用

SWCNTs独特的物理、化学性质使其在高性能锂离子电池、超级电容器及下一代固态电池等前沿方向

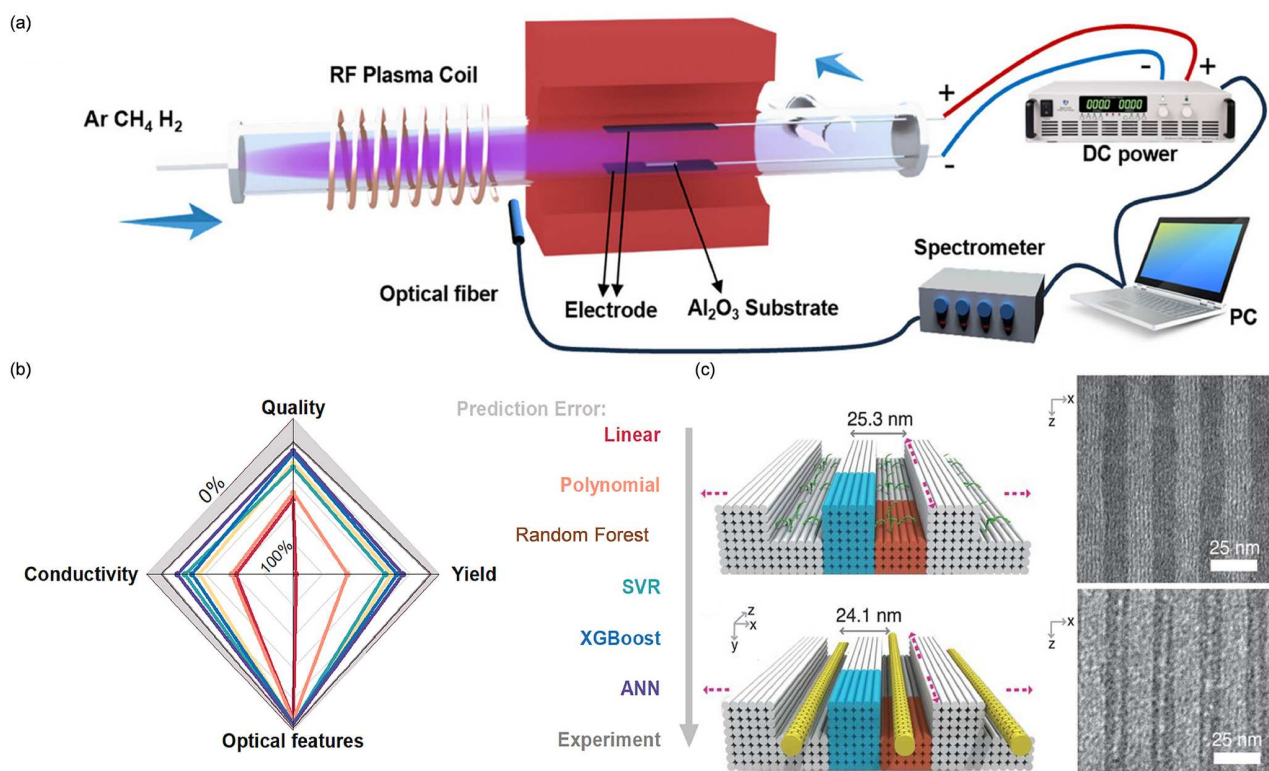


图 4 (a) 电场辅助PECVD生长s-SWCNTs示意图^[45]. (b) 通过机器学习搭建的人工神经网络对SWCNTs的4个输出特征的预测误差^[46]. (c) 组装间距为24 nm的碳纳米管阵列的设计图和TEM图像^[47]

Figure 4 (a) Schematic diagram of electric field-assisted PECVD growth of s-SWCNTs^[45]. (b) Prediction error of four output features of SWCNTs by the artificial neural network built through machine learning^[46]. (c) Design diagram and TEM image of the carbon nanotube array with an assembly spacing of 24 nm^[47]

表 2 单壁碳纳米管新型制备方法与传统方法的核心优势对比

Table 2 Comparison of key advantages between novel and traditional SWCNT preparation methods

对比维度	传统方法(如CVD、电弧放电法)	新型制备方法
电学属性控制	产物为多种手性混合物, 电学纯度低	高纯度选择性生长, 如EF-PECVD可实现>96%半导体性SWCNTs ^[45]
空间结构调控	有限, 难以实现精准、有序的排列	精密空间排布, 如DNA模板法可实现纳米级间距与取向控制 ^[47]
工艺优化效率	依赖经验试错, 周期长、成本高	智能化优化, 利用机器学习快速预测并锁定最优生长参数 ^[46]
技术路径创新	主要依赖催化剂与热力学控制	引入外场(电/等离子体)、模板约束及数据驱动等新机制

备受瞩目^[12,48]. 其在提升电极导电性、构建高效电子/离子传输通道、增强结构稳定性以及引入新型氧化还原活性位点等方面发挥着不可替代的作用, 为解决当前能源器件面临的容量、倍率、循环寿命及能量密度等核心挑战提供了创新思路.

在锂离子电池(lithium-ion battery, LIB)正极材料领域, 传统的LIB正极材料(如LiCoO₂和LiFePO₄)受限于理论容量低(<200 mA h g⁻¹)、资源稀缺及功率密度不足等问题, 而利用纳米碳材料可实现高性价比、高功

率的LIB正极设计. Park等人^[49]通过改性Brodie法制备的高剥离度氧功能化SWCNTs成功突破了容量与导电性的权衡困境(图5(a)): 表面引入的C=O基团作为氧化还原活性位点贡献了344 mA h g⁻¹的高可逆容量(0.1 A g⁻¹下), 而未氧化的SWCNTs内核构建了快速电子通路; 结合超声剥离(比表面积达1075 m² g⁻¹)和氢热还原后处理, 该材料在1000次循环后容量保持率超过99%, 并在超高功率密度(10⁵ W kg⁻¹)下仍保持100 Wh kg⁻¹的能量密度, 为快充场景提供了创新解决方案.

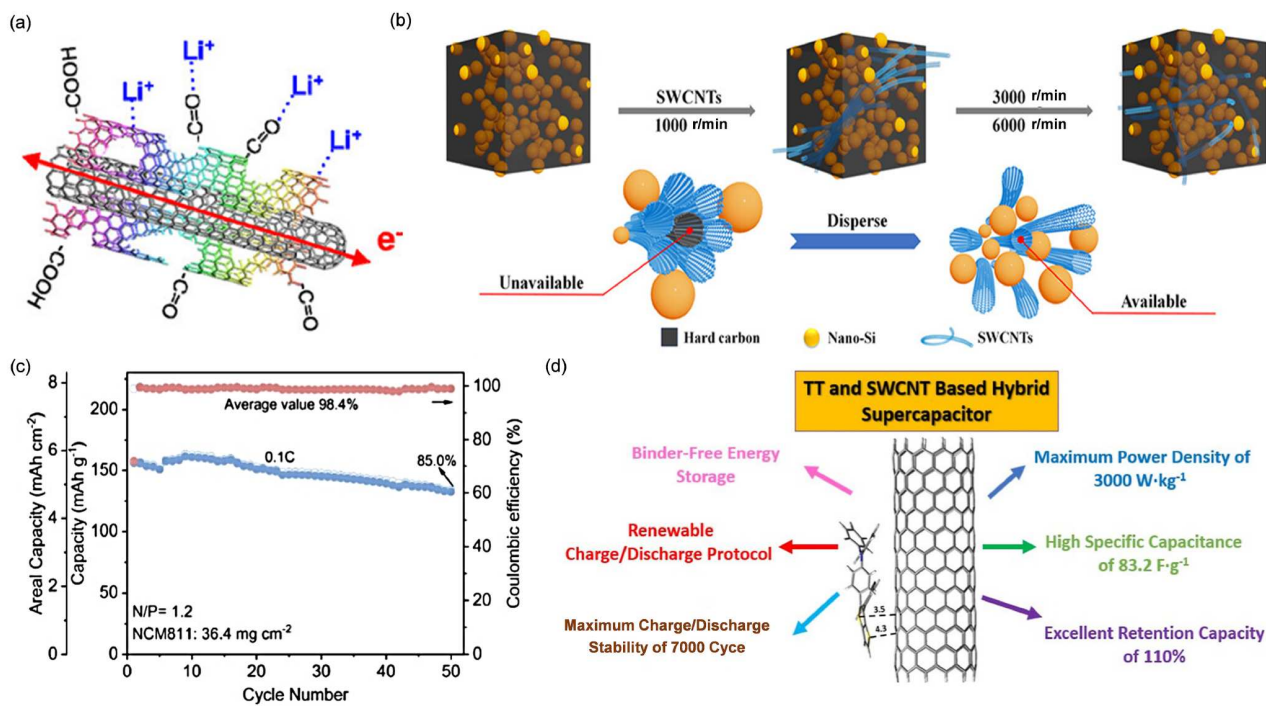


图5 (a) 高度剥离和功能化的SWCNTs示意图^[49]. (b) 掺杂SWCNTs复合材料形成的导电网络^[50]. (c) 在0.1 C条件下, NCM811负载为36.4 mg cm⁻²时, Si-Sn-SWCNT||NCM811电池的循环性能^[51]. (d) TT-TPA-SWCNTs超级电容器的性能优势^[52]

Figure 5 (a) Schematic diagram of highly stripped and functionalized SWCNTs^[49]. (b) Conductive network formed by doped SWCNTs composites^[50]. (c) Cycling performance of the Si-Sn-SWCNT||NCM811 cell with a 36.4 mg cm⁻² high NCM811 loading at 0.1 C^[51]. (d) Performance advantages of TT-TPA-SWCNTs supercapacitors^[52]

对于硅基负极, 尽管硅具有高理论容量(4200 mA h g⁻¹), 但其在充放电过程中400%的体积膨胀会导致颗粒粉化, 且本征电导率低(10⁻⁵ S cm⁻¹). Wu等人^[50]通过液相混合策略将超低含量SWCNTs (0.05 wt%)引入酚醛树脂基硅碳复合物(3000-SSC-5), 实现了负极性能的协同增强: SWCNTs在Si颗粒间形成三维导电网络(图5(b)), 将电导率提升至15 S mm⁻¹(较无碳管样品提升3倍), 同时通过机械互锁作用缓冲Si的体积变化, 使电极膨胀率从130%降至65%. 这种结构设计还减少了硅与电解液的直接接触, 促进形成富含LiF(含量达38.8%)的稳定SEI膜. 最终, 该阳极在4 A g⁻¹高倍率下容量达1114 mA h g⁻¹(较无碳管样品提升56%), 250次循环后仍保持884 mA h g⁻¹容量, 与NCM811配对的全电池经1000次循环后容量保持率达82.3%.

在全固态电池领域, 传统粉末电极中超过30%的非活性组分(固态电解质/导电剂)严重制约电池的能量密度. Chen等人^[51]开发的浆料涂覆型电极(99.8 wt% Si-Sn+0.2 wt% SWCNTs)具有多重协同效应: 半锂化Si-Sn合金兼具高离子电导(1.1×10⁻⁴ S cm⁻¹)与电子电

导(0.096 S cm⁻¹), 有效弥补纯硅电子传导弱和纯锡离子扩散慢的缺陷; SWCNTs替代传统PVDF黏结剂, 通过长程纤维网络维持电极结构完整性(循环后裂纹减少50%), 阻抗增幅可忽略. 该设计实现了创纪录的8.2 mA h cm⁻²面容量(纯硅/锡电极分别为7.2和2.7 mA h cm⁻²), 与高载量NCM811(36.4 mg cm⁻²)匹配的全电池可以输出5.8 mA h cm⁻²面容量, 50次循环后容量保持率为85%(图5(c)), 展现了工业化浆料涂覆工艺的兼容性.

柔性储能器件需兼顾高能量密度与机械耐受性. Isci等人^[52]通过 π - π 堆叠将噻吩并噻吩衍生物(thienothiophene-triphenylamine derivatives, TT-TPA)非共价接枝于SWCNTs, 构建了自支撑电极(TT-TPA-SWCNTs), 将其应用于超级电容器和储能双电极系统(图5(d)). 该设计巧妙融合了二者的优势: SWCNTs网络提供机械支撑与电子高速通路(薄膜弯曲万次电阻变化<5%), 而TT-TPA分子通过可逆氧化还原反应贡献赝电容, 最终使TT-TPA-SWCNTs超级电容器在5 mV s⁻¹下实现83.2 F g⁻¹的高比容, 更突破性地在7000次循环后展现

110%的容量增长。

2.2 电子领域应用

SWCNTs优异的光电性能使其成为突破传统硅基电子学局限的关键候选材料,在构建高速场效应晶体管通道、实现大面积透明导电网络及构筑高响应传感界面等方面具有不可替代的优势,使其在高性能逻辑器件、柔性透明电子器件以及高灵敏度传感器等前沿方向极具潜力。

在构建高性能逻辑器件方面,高纯度单壁碳纳米管阵列作为高性能场效应晶体管(field-effect transistor, FET)的制备提供了关键材料基础^[53-55]。Wang等人^[55]提出了一种通过甲基化反应实现m-SWCNTs向s-SWCNTs可逆转变的方法。该方法利用甲基化反应选择性修饰m-SWCNTs,使其电子结构从金属态转变为p型半导体态,从而显著提升FET性能(图6(a))。实验表明,甲基化后s-SWCNTs占比超过97.5%,s-SWCNTs阵列的开关比可达17543,远超传统硅基器件,且暗电流极低

(0.157 μA),该方法为高密度、高纯度的s-SWCNTs阵列制备提供了新思路,这对于制备基于SWCNTs的高性能FET器件具有重要意义。

在提升柔性透明导电薄膜(flexible transparent conductive films, TCFs)的稳定性和掺杂效率方面,单壁碳纳米管因其优异的导电性和光学透明性,成为关键材料^[56-58]。然而,其实际应用面临稳定性差、掺杂效率低等问题。Zhang等人^[59]提出了一种基于化学掺杂的稳定化方法,通过引入固态酸(如磷钨酸)实现SWCNTs薄膜的高效掺杂,成功将薄膜的片电阻从原始的101 Ω/sq 显著降至50.1 Ω/sq ,同时该磷钨酸(phosphotungstic acid, PTA)掺杂薄膜在环境条件下具有卓越的长期稳定性:储存25天后,片电阻仅从50.1 Ω/sq 增加至53.6 Ω/sq ,即便在超长储存700天后,片电阻仅上升至65.6 Ω/sq ,同时透光率也保持良好,其值在73.5%和77.6%之间(图6(b))。这种优异的稳定性主要归因于PTA作为固体酸的非挥发特性。此方法避免了传统酸处理对器件的损伤,解决了TCFs在长期使用中的性能衰减问题。

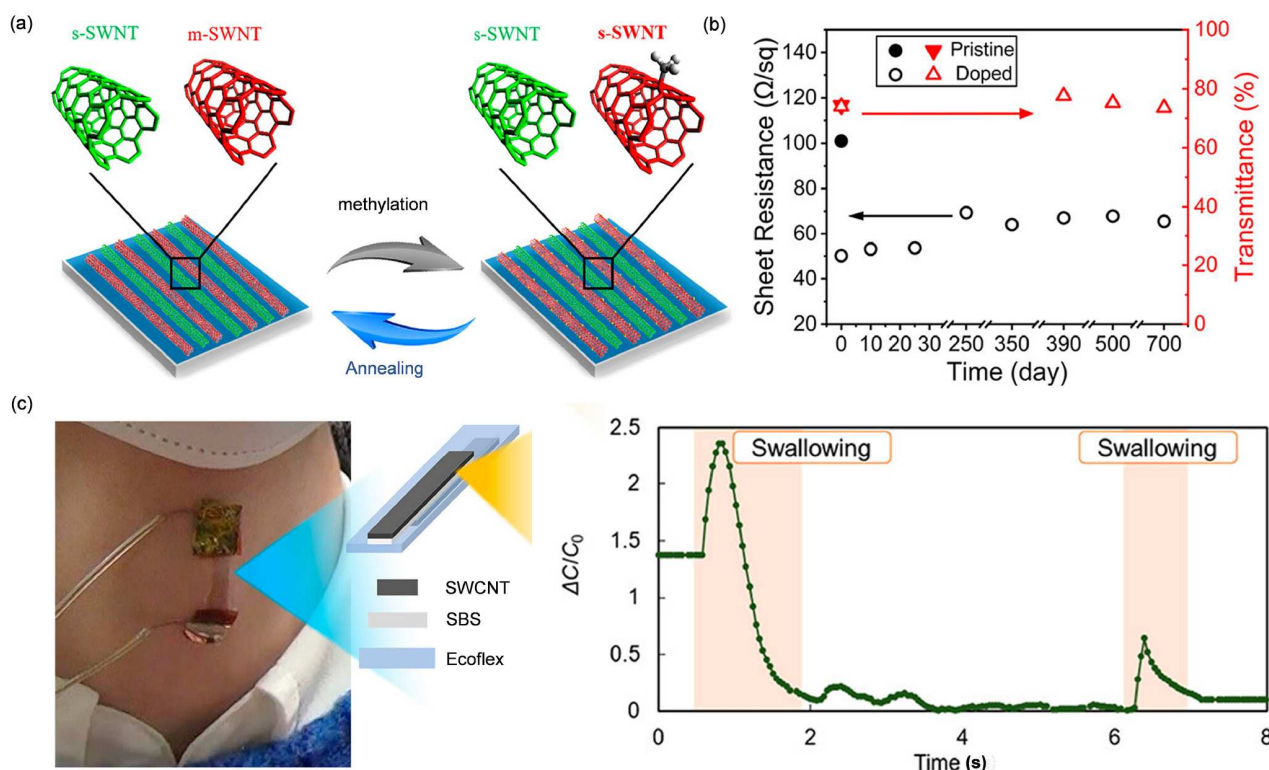


图6 (a) 可逆的SWCNTs甲基化过程示意图^[55]。(b) 掺杂PTA的SWCNTs薄膜在环境条件下放置700天的片电阻和透明度变化^[59]。(c) 以SWCNTs-SB包覆的纳米片为柔性电极的电容式应变传感器以及在吞咽时喉咙变形过程中传感器的 $\Delta C/C_0$ 值变化^[63]

Figure 6 (a) Schematic illustration of the reversible SWCNTs methylation process^[55]. (b) The change of sheet resistance and transparency of a PTA-doped SWCNT film placed under ambient conditions for 700 days^[59]. (c) Capacitive strain sensor with SWCNTs-SB-coated nanosheets as flexible electrodes and the change in the $\Delta C/C_0$ value of the sensor during the process of throat deformation during swallowing^[63]

Kaho等人^[60]进一步探索了质子酸和锂盐作为掺杂剂的可行性,发现其在室温下可实现稳定的p型掺杂,且掺杂后的SWCNTs薄膜在空气中表现出优异的机械柔韧性和环境稳定性。此外,研究还表明,通过调控掺杂浓度和热处理工艺,可优化SWCNTs薄膜的载流子迁移率和界面接触特性,为高性能柔性电子器件(如可穿戴设备、透明电极)提供材料基础。

在实现高灵敏度传感方面,单壁碳纳米管独特的表面敏感特性和优异的机械柔韧性,使其成为构筑先进传感器的理想材料平台^[61,62]。Kei Okada等人^[63]提出了一种基于SWCNTs网络结构的柔性电容式应变传感器。该传感器通过将SWCNTs与苯丁嵌段共聚物(poly-styrene-block-polybutadiene, SB)弹性体结合,形成纳米级薄膜(“纳米片”),并以硅酮弹性体(Ecoflex)作为介电层,实现了对生物体复杂运动的高精度监测。实验表明,该传感器在0~100%应变范围内表现出线性电容响应($\Delta C/C_0$),灵敏度达1.13(GF值),且在无线传感测试中可稳定记录人体手指弯曲、血管扩张和吞咽等动态运动(图6(c))。

3 挑战与未来展望

尽管SWCNTs的精准制备与应用研究取得了显著进展,但其规模化与商业化仍面临着许多挑战,如制备成本高、结构纯度控制难,以及化学修饰与分散性差等。深入分析这些问题并明确攻关方向,是推动SWCNTs产业化应用的关键。

高昂的制备成本严重制约了SWCNTs的规模化应用,主流制备方法(如电弧放电法、化学气相沉积法)普遍存在设备投资大、催化剂成本占比高(超30%)、能耗高等问题。此外,产物中残留的金属催化剂(如Fe、Co)需通过酸洗等后处理步骤去除,进一步增加了环境负担与成本。目前全球采用这些方法合成的SWCNTs年产能不足百吨,且高度依赖少数企业(如OCSiAl占90%市场份额)^[64],高昂的成本严重限制了其应用普及。未来应着力开发低成本、可调控的催化剂(如生物质衍生材料),探索低温/无催化剂合成的新路径(如利用太阳能或激光蒸发法替代传统高温工艺、减少金属污染),并发展环境友好型纯化与回收技术,以降低能耗、减少污染,推动其可持续规模化生产。

纯度控制与单手性分离仍是SWCNTs制备技术的瓶颈,SWCNTs的“聚分散性”(即每批次产物为不同手性与直径的混合物)是影响其性能一致性的核心问题。

现有方法制备的SWCNTs中s-SWCNTs占比通常不足2/3,且大直径(>1.2 nm)单手性SWCNTs的高效分离仍是巨大挑战^[65,66]。电弧放电法等虽能获得高质量SWCNTs,但易导致结构烧结,且杂质(无定形碳、金属颗粒)的存在会给性能测量与应用带来误差。未来需结合密度梯度超速离心、电泳沉积等高效分离技术,优化分散剂体系,在提高分离效率的同时尽量减少对SWCNTs结构的损伤,并建立高精度、无损的纯度定量方法。

化学修饰与分散性影响着SWCNTs的实际加工与应用,因其较强的范德华力,SWCNTs易团聚且难分散于水或常见有机溶剂中,这导致其功能化受限^[64],严重限制了SWCNTs的溶液加工性与复合材料性能。虽然酸处理和氟化等手段可改善其在某些聚合物基体(如环氧树脂)中的分散性,但往往以引入结构缺陷、牺牲SWCNTs性能为代价。此外,SWCNTs与聚合物基体材料的界面结合力弱,易导致应力传递效率低下。未来研究应聚焦于开发高效、无损的非共价修饰策略(如高分子包裹、 π - π 堆叠),并深入理解界面相互作用机制,以实现SWCNTs在保持优异性能前提下的均匀分散与强界面结合。

此外,跨学科融合也是SWCNTs的发展方向之一,如Ji等人^[67]针对SWCNTs生长参数空间庞大、传统试错法筛选效率较低的问题,将高通量方法与机器学习相结合,汇总高通量数据训练机器学习算法,建立生长参数与单壁碳纳米管质量间的关系,并预测了最优参数组合,实现了高质量单壁碳纳米管的制备。未来可利用AI结合机器学习优化催化剂设计、生长条件和分离工艺,加速SWCNTs的可控合成与性能调控^[68];发展多领域融合创新,结合纳米科技、生物医学和信息技术,开发SWCNTs在柔性电子、可穿戴设备和量子计算中的应用。

4 总结

单壁碳纳米管作为21世纪最具潜力的纳米材料之一,其制备技术已从实验室走向初步工业化,但在纯度、成本和手性控制等方面仍需突破。在制备方面,催化剂设计、生长条件动态优化、衬底与碳源的结构调控作用以及新型制备方法的采用使得SWCNTs的手性、直径、长度及排列方式得到了初步的精确控制。在应用层面,SWCNTs因其优异的导电性、热稳定性和机械强度,已在电子器件及能源存储等领域展现出巨大潜力。未来研究将聚焦于多物理场协同调控技术的

优化, 开发高效分离与组装工艺, 并建立高精度、无损的纯度定量方法. 同时, SWCNTs在下一代光电技术(如量子点器件、柔性电子)中的应用潜力将进一步推动

其向产业化迈进. SWCNTs的精准调控与应用研究正处于从基础科学向工程化转化的关键阶段, 其突破将为材料科学和电子技术带来革命性变革.

参考文献

- 1 Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 1991, 354: 56–58
- 2 Iijima S, Ichihashi T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature*, 1993, 363: 603–605
- 3 Bethune D S, Kiang C H, de Vries M S, et al. Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls. *Nature*, 1993, 363: 605–607
- 4 Dresselhaus M S, Dresselhaus G, Saito R. Physics of carbon nanotubes. *Carbon*, 1995, 33: 883–891
- 5 Wang H, Yuan Y, Wei L, et al. Catalysts for chirality selective synthesis of single-walled carbon nanotubes. *Carbon*, 2015, 81: 1–19
- 6 Yao Z, Kane C L, Dekker C. High-field electrical transport in single-wall carbon nanotubes. *Phys Rev Lett*, 2000, 84: 2941–2944
- 7 Schindler G, Steinlesberger G, Engelhardt M, et al. Electrical characterization of copper interconnects with end-of-roadmap feature sizes. *Solid-State Electron*, 2003, 47: 1233–1236
- 8 Dürkop T, Getty S A, Cobas E. Extraordinary mobility in semi-conducting carbon nanotubes. *Nano Lett*, 2004, 4: 35
- 9 Avouris P, Chen Z, Perebeinos V. Carbon-based electronics. *Nat Nanotech*, 2007, 2: 605–615
- 10 Yao Y, Ma C, Wang J, et al. Rational design of high-surface-area carbon nanotube/microporous carbon core-shell nanocomposites for supercapacitor electrodes. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2015, 7: 4817–4825
- 11 Witkiewicz Z, Jasek K, Grabka M. Semiconductor gas sensors for detecting chemical warfare agents and their simulants. *Sensors*, 2023, 23: 3272
- 12 Adedjoja O S, Sadiku E R, Hamam Y. An overview of the emerging technologies and composite materials for supercapacitors in energy storage applications. *Polymers*, 2023, 15: 2272
- 13 Berber S, Kwon Y K, Tománek D. Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes. *Phys Rev Lett*, 2000, 84: 4613–4616
- 14 Yao N, Lordi V. Young's modulus of single-walled carbon nanotubes. *J Appl Phys*, 1998, 84: 1939–1943
- 15 Wang M, Golberg D, Bando Y. Tensile tests on individual single-walled carbon nanotubes: linking nanotube strength with its defects. *Adv Mater*, 2010, 22: 4071–4075
- 16 Shi Y. Investigation on fabrication and mechanical behavior of bioinspired nanolaminated single-walled carbon nanotube reinforced aluminum matrix composites (in Chinese). Doctor Dissertation. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University, 2020 [时岩. 仿生纳米叠层结构单壁碳纳米管增强铝基复合材料的制备和力学行为研究. 博士学位论文. 上海: 上海交通大学, 2020]
- 17 Bi L S, Gao F C, Zhang C Q, et al. Progress on research of construction of carbon nanotubes/carbon fiber cross-scale interface enhancement systems (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2023, 68: 495–509 [毕岚森, 高凡川, 张传琪, 等. 碳纳米管/碳纤维跨尺度界面增强体系构建的研究进展. 科学通报, 2023, 68: 495–509]
- 18 Xiahou X, Wu S, Ye Z, et al. Advances of carbon nanotube adhesive materials (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2024, 69: 2246–2264 [夏侯幸子, 吴思佳, 叶宗麟, 等. 碳纳米管黏附材料研究进展. 科学通报, 2024, 69: 2246–2264]
- 19 Zou J, Zhang Q. Advances and frontiers in single-walled carbon nanotube electronics. *Adv Sci*, 2021, 8: 2102860
- 20 Zhong J, Chiou J, Dong C, et al. Probing quantum confinement of single-walled carbon nanotubes by resonant soft-x-ray emission spectroscopy. *Appl Phys Lett*, 2008, 93: 023107
- 21 Farhana S, Gong H. Novel carbon nanotube model for low energy loss field-effect transistor. *Cogent Eng*, 2017, 4: 1300082
- 22 Elena F S, A. Chernozatonskii L. Broken symmetry approach and chemical susceptibility of carbon nanotubes. *Int J Quant Chem*, 2009, 110: 1466–1480
- 23 Ji Z H, Zhang L L, Tang D M, et al. A review on the controlled growth of single-wall carbon nanotubes from metal catalysts (in Chinese). *Acta Metall Sin*, 2018, 54: 1665–1682 [吉忠海, 张莉莉, 汤代明, 等. 金属催化剂控制生长单壁碳纳米管研究进展. 金属学报, 2018, 54: 1665–1682]
- 24 Li M, Liu X, Zhao X, et al. Metallic catalysts for structure-controlled growth of single-walled carbon nanotubes. *Top Curr Chem (Z)*, 2017, 375: 29
- 25 Yang L, Zhao T, Jalil A, et al. Modulating oxygen vacancy concentration for selective growth of semiconducting single-walled carbon nanotubes with narrow diameters. *J Mater Sci Tech*, 2024, 174: 44–54
- 26 Hao S, Qian L, Wu Q, et al. Subnanometer single-walled carbon nanotube growth from Fe-containing layered double hydroxides. *Chem Eng J*, 2022, 446: 137087
- 27 Lv S, Wu Q, Xu Z, et al. Chirality distribution of single-walled carbon nanotubes grown from gold nanoparticles. *Carbon*, 2022, 192: 259–264
- 28 Zhang X, Graves B, De Volder M, et al. High-precision solid catalysts for investigation of carbon nanotube synthesis and structure. *Sci Adv*, 2020,

6: eabb6010

- 29 Zhang S, Kang L, Wang X, et al. Arrays of horizontal carbon nanotubes of controlled chirality grown using designed catalysts. *Nature*, 2017, 543: 234–238
- 30 Forel S, Castan A, Amara H, et al. Tuning bimetallic catalysts for a selective growth of SWCNTs. *Nanoscale*, 2019, 11: 4091–4100
- 31 Everhart B M, Almkhelfe H, Smith M L, et al. Promoting effect of ruthenium on Fe-catalyzed growth of small-diameter single-wall carbon nanotubes. *ACS Omega*, 2025, 10: 31304–31312
- 32 Qin X, Li D, Feng L, et al. (n, m) distribution of single-walled carbon nanotubes grown from a non-magnetic palladium catalyst. *Molecules*, 2023, 28: 2453
- 33 Chao H Y, Jiang H, Ospina-Acevedo F, et al. A structure and activity relationship for single-walled carbon nanotube growth confirmed by *in situ* observations and modeling. *Nanoscale*, 2020, 12: 21923–21931
- 34 Maruyama T, Kozawa A, Saida T, et al. Low temperature growth of single-walled carbon nanotubes from Rh catalysts. *Carbon*, 2017, 116: 128–132
- 35 Chiang W H, Mohan Sankaran R. Linking catalyst composition to chirality distributions of as-grown single-walled carbon nanotubes by tuning $\text{Ni}_x\text{Fe}_{1-x}$ nanoparticles. *Nat Mater*, 2009, 8: 882–886
- 36 Li Y, Hao S, Xu N, et al. Chirality-selective growth of single-walled carbon nanotubes from layered double hydroxide supported monometallic catalysts (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2023, 69: 2288–2297 [李雅涵, 郝树兰, 徐宁宁, 等. 单壁碳纳米管在单金属层状双氢氧化物上的手性选择性生长. 科学通报, 2024, 69: 2288–2297]
- 37 Wang M, Nakamura K, Arifuku M, et al. Growth of single-walled carbon nanotubes from solid carbon nanoparticle seeds via cap formation engineering with a two-step growth process and water vapor supply. *ACS Omega*, 2022, 7: 3639–3648
- 38 He M, Wang X, Zhang S, et al. Growth kinetics of single-walled carbon nanotubes with a $(2n, n)$ chirality selection. *Sci Adv*, 2019, 5: eaav9668
- 39 Wang X, Yu Y, Li J, et al. Sowing clean-release salt catalyst for the synthesis of contamination-free single-walled carbon nanotube arrays. *Small*, 2025, 21: 2405216
- 40 Zhang Z, Chen Y, Shen P, et al. Homochiral carbon nanotube van der Waals crystals. *Science*, 2025, 387: 1310–1316
- 41 Zhang Z Y, Yao Y X, Li Y. Modulating the diameter of bulk single-walled carbon nanotubes grown by FeCo/MgO catalyst (in Chinese). *Acta Phys-Chim Sin*, 2022, 38: 2101055 [张则尧, 姚艺希, 李彦. FeCo/MgO催化生长体相单壁碳纳米管的直径调控. 物理化学学报, 2022, 38: 2101055]
- 42 Yang L, Zhao T, Jalil A, et al. Catalyst regeneration and multicycle growth of high purity and yield semiconducting single-walled carbon nanotubes. *Chem Eng J*, 2023, 462: 142272
- 43 Wang J, Jin X, Liu Z, et al. Growing highly pure semiconducting carbon nanotubes by electrotwisting the helicity. *Nat Catal*, 2018, 1: 326–331
- 44 Cheng H, Lim T, Yoo H, et al. Fabrication of three-dimensional multilayer structures of single-walled carbon nanotubes based on the plasmonic carbonization. *Nanomaterials*, 2021, 11: 2213
- 45 Zou M, Peng Z, Li Y, et al. Electric-field-assisted PECVD for growth of high-purity horizontally aligned semiconducting carbon nanotube arrays. *Adv Funct Mater*, 2025, 35: 2504150
- 46 Krasnikov D V, Khabushev E M, Gaev A, et al. Machine learning methods for aerosol synthesis of single-walled carbon nanotubes. *Carbon*, 2023, 202: 76–82
- 47 Sun W, Shen J, Zhao Z, et al. Precise pitch-scaling of carbon nanotube arrays within three-dimensional DNA nanotrenches. *Science*, 2020, 368: 874–877
- 48 Zhang Z, Han S, Wang C, et al. Single-walled carbon nanohorns for energy applications. *Nanomaterials*, 2015, 5: 1732–1755
- 49 Park J H, Lee H J, Cho J Y, et al. Highly exfoliated and functionalized single-walled carbon nanotubes as fast-charging, high-capacity cathodes for rechargeable lithium-ion batteries. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2019, 12: 1322–1329
- 50 Wu C, Yang L, Wang S, et al. Phenolic resin-based silicon/carbon composites modified with ultralow-content single-walled carbon nanotubes via liquid-phase mixing method for lithium-ion batteries. *ACS Appl Energy Mater*, 2024, 7: 11910–11920
- 51 Chen Y, Li L, Huang J, et al. Synergy of Si, Sn, and SWCNT enables a superior mixed-conductive slurry-coated anode for all-solid-state lithium batteries. *ACS Appl Energy Mater*, 2024, 7: 8658–8668
- 52 Isci R, Donmez K B, Karatepe N, et al. High-performance thienothiophene and single wall carbon nanotube-based supercapacitor as a free-standing and flexible hybrid energy storage material. *ACS Appl Energy Mater*, 2024, 7: 1488–1494
- 53 Zhao M, Chen Y, Wang K, et al. DNA-directed nanofabrication of high-performance carbon nanotube field-effect transistors. *Science*, 2020, 368: 878–881
- 54 Qu L, Du F, Dai L. Preferential syntheses of semiconducting vertically aligned single-walled carbon nanotubes for direct use in FETs. *Nano Lett*, 2008, 8: 2682–2687
- 55 Wang Y, Liu D, Zhang H, et al. Methylation-induced reversible metallic-semiconducting transition of single-walled carbon nanotube arrays for high-performance field-effect transistors. *Nano Lett*, 2020, 20: 496–501

- 56 Li Y A, Tai N H, Chen S K, et al. Enhancing the electrical conductivity of carbon-nanotube-based transparent conductive films using functionalized few-walled carbon nanotubes decorated with palladium nanoparticles as fillers. *ACS Nano*, 2011, 5: 6500–6506
- 57 Chen W C, Lien H T, Cheng T W, et al. Side group of poly(3-alkylthiophene)s controlled dispersion of single-walled carbon nanotubes for transparent conducting film. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2015, 7: 4616–4622
- 58 Han J T, Kim B G, Yang M, et al. Titania-assisted dispersion of carboxylated single-walled carbon nanotubes in a ZnO sol for transparent conducting hybrid films. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2011, 3: 2671–2676
- 59 Zhang Z, Yan W, Chen Y, et al. Stable doping of single-walled carbon nanotubes for flexible transparent conductive films. *ACS Nano*, 2022, 16: 1063–1071
- 60 Kawasaki K, Harada I, Akaike K, et al. Complex chemistry of carbon nanotubes toward efficient and stable p-type doping. *Commun Mater*, 2024, 5: 21
- 61 Stampfer C, Helbling T, Obergfell D, et al. Fabrication of single-walled carbon-nanotube-based pressure sensors. *Nano Lett*, 2006, 6: 233–237
- 62 Ali S R, Ma Y, Parajuli R R, et al. A nonoxidative sensor based on a self-doped polyaniline/carbon nanotube composite for sensitive and selective detection of the neurotransmitter dopamine. *Anal Chem*, 2007, 79: 2583–2587
- 63 Okada K, Horii T, Yamaguchi Y, et al. Ultraconformable capacitive strain sensor utilizing network structure of single-walled carbon nanotubes for wireless body sensing. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2024, 16: 10427–10438
- 64 Rouse J H. Polymer-assisted dispersion of single-walled carbon nanotubes in alcohols and applicability toward carbon nanotube/sol–gel composite formation. *Langmuir*, 2005, 21: 1055–1061
- 65 Chen Y, Lyu M, Zhang Z, et al. Controlled preparation of single-walled carbon nanotubes as materials for electronics. *ACS Cent Sci*, 2022, 8: 1490–1505
- 66 Ko J, Joo Y. Review of sorted metallic single-walled carbon nanotubes. *Adv Mater Inter*, 2021, 8: 2002106
- 67 Ji Z H, Zhang L, Tang D M, et al. Statistical patterns in high-throughput growth of single-wall carbon nanotubes from Co/Pt/Mo ternary catalysts. *Carbon*, 2023, 210: 118073
- 68 Ji Z H. Statistical patterns and growth mechanism of single-wall carbon nanotubes using a high-throughput method (in Chinese). Doctor Dissertation. Hefei: University of Science and Technology of China, 2022 [吉忠海. 高通量方法制备单壁碳纳米管的统计规律及机制研究. 博士学位论文. 合肥: 中国科学技术大学, 2022]

Summary for “单壁碳纳米管精准结构调控及在能源电子领域应用进展”

Progress in the precise structural regulation of single-walled carbon nanotubes and their applications in energy and electronics fields

Ye Zhu[†], Lixiu Song[†] & Wei Yan^{*}

School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 712046, China

[†] Equally contributed to this work

^{*} Corresponding author, E-mail: yanwei@xjtu.edu.cn

Single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) possess exceptional electronic, mechanical, and thermal properties, making them highly promising for applications in energy storage and conversion, electronics, and biomedical engineering. However, fully unlocking their potential relies heavily on precise control over their core structural characteristics—such as chirality, diameter, and surface chemistry—which are largely determined during synthesis. This review systematically summarizes recent advances in the precise structural regulation of SWCNTs and explores their applications in key fields, aiming to bridge the gap between laboratory research and industrial implementation.

The structural control of SWCNTs focuses on four main aspects: catalyst design, dynamic optimization of growth conditions, the influence of substrates and carbon sources, and innovative preparation methods. In catalyst design, researchers have developed various advanced catalyst systems to tailor the chirality and diameter of SWCNTs. These include refractory metal nanoparticles and their carbides, which provide high structural stability and overcome limitations of traditional liquid catalysts; bimetallic systems that leverage synergistic effects to stabilize catalyst particle size and modulate electronic structure; and low-melting-point catalysts that interact with specific supports to enhance the adsorption and decomposition of carbon precursors.

Dynamic optimization of growth conditions further refines structural control by tuning parameters such as temperature, carbon source partial pressure, and etchant concentration. These adjustments influence the nucleation kinetics and growth mechanisms of SWCNTs, enabling targeted regulation of diameter distribution and chirality selectivity. Substrates and carbon sources also play essential roles: substrate surface engineering—such as introducing defect sites or using atomically flat surfaces—guides the ordered growth and alignment of SWCNTs, while the choice of carbon source affects growth kinetics, thereby influencing the diameter and electronic properties of the nanotubes.

Innovative synthesis methods have overcome limitations of conventional techniques. Examples include electric field-assisted plasma-enhanced chemical vapor deposition (PECVD) for selective growth of high-purity SWCNTs with defined electronic properties; machine learning approaches that accelerate the identification of optimal growth parameters by predicting structure–property relationships; and DNA origami-inspired spatial confinement techniques, which enable ultra-precise control over the spatial arrangement of SWCNTs.

In terms of applications, SWCNTs demonstrate outstanding performance in energy and electronics due to their structural advantages. In energy storage, they enhance the performance of lithium-ion batteries by improving capacity retention and power density, boost the energy density and cycling stability of all-solid-state batteries, and reinforce the mechanical durability and energy storage capacity of flexible devices. In electronics, SWCNTs serve as key materials for high-performance field-effect transistors (FETs) with high on/off ratios, flexible transparent conductive films (TCFs) with excellent long-term stability, and highly sensitive strain sensors capable of detecting subtle biological motions.

Despite these advances, the large-scale industrialization of SWCNTs faces challenges such as high synthesis costs, difficulties in achieving high purity, and poor dispersibility due to strong van der Waals interactions. Future efforts should focus on developing low-cost and sustainable catalysts, integrating artificial intelligence to optimize synthesis processes, and fostering interdisciplinary collaboration across nanotechnology, biomedicine, and information technology. Such initiatives will help transition SWCNTs from basic research to real-world industrial applications.

single-walled carbon nanotubes, catalyst, chirality, diameter, energy, electronics

doi: [10.1360/CSB-2025-5427](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5427)