硅烯和锗烯的生长及其机制研究取得重要进展

硅烯和锗烯分别是由硅原子和锗原子组成的具有类似石墨烯结构的二维材料。与石墨烯,硅烯和锗烯的两个子晶格上的原子在垂直于材料所在平面的方向 上有位移,因而形成 low buckle 的结构。硅烯和锗烯的可控制备近年来一直是研 究热点。

目前,硅烯已在不同的基底如 Ag(111)、ZrB₂(0001)和 Ir(0001)等表面上成功 制备。其中,对于硅烯的研究主要集中于 Ag(111)基底上的生长。然而,在 Ag(111) 基底上制备出来的硅烯有多种畴,畴与畴之间的晶界无疑会影响到器件的性质, 这也是目前基于硅烯的场效应晶体管的电子迁移率远远低于理论预期值的原因 之一。因此,研究硅烯的生长机制、探索合适的基底生长大面积、高质量的硅烯 对于基础研究和应用探索都具有十分重要的意义。

中国科学院物理研究所高鸿钧院士领导的研究团队在新型二维原子晶体材 料的制备与物性研究等方面开展了多年的探索研究,取得了一系列重要研究成果。 最近,该研究组的博士生黄立、张艳芳和杜世萱研究员等利用分子束外延、扫描 隧道显微学和第一性原理计算等,系统地研究了硅烯在 Ru(0001)基底上的生长 及其机制,在新型硅二维材料的研究方面又取得了重要进展。

在 Ru(0001)基底上, 硅原子首先沉积在基底的 HCP hollow 位置, 形成线性 结构。因为受到具有三重对称性的基底调制, 硅原子并不会形成无限长的链状结 构, 而是形成一种之前从未被发现过的硅鱼骨结构(图1)。随着硅原子沉积量 的增加, 硅增原子会优先吸附于硅鱼骨的 elbow 位置, 在 elbow 位置形成硅的六 元环。继续增加硅原子的沉积量,这些六元环会作为成核点在硅鱼骨结构的 elbow 区域转变成小片的硅蜂窝状结构(硅烯纳米带),最初形成的鱼骨结构从而演变 成鱼骨和蜂窝状结构共存的二维超结构(图 2, 图 3)。进一步增加硅原子的沉 积量, 硅鱼骨结构消失, 整个基底被硅蜂窝状结构——即硅烯——所覆盖(图 4)。 他们研究了在 Ru(0001)基底上不同的硅二维结构, 观察并解释了硅烯在 Ru(0001) 表面的生长过程,发现了新的硅二维结构。这一成果发表于 Nano Lett. 17, 1161 (2017)上。 另外,该研究组的潘金波博士生和杜世萱研究员与中国科学院武汉物理与数 学研究所秦志辉副研究员合作,首次在 Cu(111)基底上成功制备出双层锗烯,并 开展了结构特性研究。高分辨 STM 图像结合第一性原理计算证实,Cu(111)上的 双层锗烯为 AB 堆垛,与基底形成(√3×√3) R30°的超结构(图5)。由于底层锗 烯有效屏蔽掉了来自基底的相互作用,双层锗烯在费米能级附近呈现完美对称的 "V"形 dI/dV 电子态(图6),表现出自由锗烯才有的二维狄拉克费米子线性能 带色散特征。这一成果发表于 Adv. Materi. 29,1606046(2017)上。

这些研究结果对以硅和锗为基础的二维原子晶体材料及其实际应用具有重要意义。该项研究获得了国家自然科学基金委、科技部和中国科学院的支持。

原文链接:

http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.nanolett.6b04804

http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/adma.201606046/full



图1 硅烯的生长示意图和硅鱼骨结构。



图 2 Si 鱼骨和类硅烯纳米带的二维超结构。



图 3 Si 鱼骨到类硅烯纳米带的演变示意图。



图 4 Ru(0001)基底上硅烯的 STM、LEED、结构以及 STM 模拟图。



图 6 Cu(111)上锗烯的扫描隧道谱,其中双层锗烯在费米能级附近呈现完美对称的 "V"形 dI/dV 电子态。