
上海微系统所等在六方氮化硼合成新机制研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11313.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院上海微系统与信息技术研究所副研究员吴天如研究团队和华东师范大学教授袁清红研究团队，基于原位合成、表征研究与第一性原理计算方法，提出铁硼（ Fe_2B ）合金表面高质量多层六方氮化硼（h-BN）原子空位辅助生长新机制。相关研究成果以Vacancy-Assisted Growth Mechanism of Multilayer Hexagonal Boron Nitride on a Fe_2B Substrate为题，在线发表在《物理化学快报》上。

h-BN以原子级平整表面、无悬挂键、高导热性和良好的理化稳定性等优势，成为具有潜力的二维晶体器件的介质衬底和封装材料。近年来，上海微系统所聚焦于二维晶体理论研究、器件工艺、规模化应用面临的难题，在单层h-BN单晶生长、异质结构筑及高质量多层h-BN制备等领域开展研究（Nature Communications, 2015, 6, 6160；Advanced Science, 2017, 4, 1700076；Nature Communications, 2020, 11, 849）。由于h-BN先进合成技术发展较慢，缺乏对传统方法生长机制的研究，限制了大尺寸、高质量h-BN可控合成与实际应用。

吴天如研究团队基于 Fe_2B 合金体系实现高质量h-BN可控制备，通过快速冷却淬火技术结合飞行时间二次离子质谱（ToF-SIMS），分析h-BN合成过程中 Fe_2B 浅表层B原子和N原子分布规律。

袁清红研究团队采用第一性原理计算方法，研究 Fe_2B 表面h-BN的生长机制，提出 Fe_2B 表面h-BN的空位辅助合成机制。研究发现，B-N二聚体产生使合金表面形成大量B空位，对B、N原子的迁移起到较大的促进作用。 Fe_2B 基底中B和N原子的扩散仅需克服小于1.5 eV的能垒，使得N原子在催化表面附近大量溶解。此外，通过对不同尺寸B-N团簇的形成能和吉布斯自由能的计算和拟合，研究发现 Fe_2B 表面h-BN成核能垒约2 eV。因此，在相对较低温度（700 K）下合成h-BN成为可能。该研究提出的“空位辅助”生长新机制，解决传统方法合成多层h-BN长久以来缺乏高N溶解度和扩散速率的催化剂的难题，为h-BN在二维纳米电子学及新兴微电子器件领域的应用提供空间。

华东师范大学与上海微系统所联合培养硕士姜忍、上海微系统所博士时志远和华东师范大学硕士

赵威为论文共同第一作者，吴天如与袁清红为论文共同通讯作者。研究工作获得国家重点研发计划、国家自然科学基金面上项目、中科院战略性先导科技专项（B类）、中科院青年创新促进会、上海超级计算中心、上海市青年科技启明星计划、上海市青年科技英才扬帆计划以及上海市科学技术委员会的资助。

[论文链接](#)

图1.Fe₂B合金表面多层h-BN合成机制示意图及近表面N原子扩散能量曲线

图2.基于飞行时间二次离子质谱 (ToF-SIMS) 的Fe₂B合金浅表层B原子和N原子分布规律研究
研究团队单位：上海微系统与信息技术研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发