
物理所利用硅烯插层打开外延生长的双层石墨烯能隙

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12468.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！

石墨烯因其独特的晶格结构而具有诸多优异性能，但其零能隙特征极大地限制了它在电子学器件上的应用。近年来，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心纳米物理与器件重点实验室研究员、中科院院士高鸿钧带领的研究团队在石墨烯及类石墨烯二维原子晶体材料的制备、物性调控及应用等方面开展研究，取得了一系列重要研究成果。他们采用分子束外延生长方法制备出了多种大面积、高质量的石墨烯及类石墨烯二维原子晶体材料，如外延石墨烯、三分之一氢化石墨烯、硅烯、锗烯、二硒化铂与铜硒二维原子晶体等；2) 实现了石墨烯的多种单质元素的插层；3) 揭示了单晶表面上石墨烯插层的普适机制；4) 构建空气中稳定的硅烯/石墨烯异质结等。

不同堆垛方式的双层石墨烯由于其丰富奇异的物理性质，备受关注。其中，AB堆垛的双层石墨烯不仅分享了单层石墨烯的优异性质，而且在破坏两层石墨烯反演对称性的情况下可诱导出非零能隙，促进了它在电子学及光电子学器件方面的应用。双层石墨烯中能隙的打开可通过外加电场、应力或者在两层石墨烯表面吸附原子/分子进而构建电势差等方式实现。理论计算表明，将两种不同的方式结合起来，可实现更大的能隙。因此，通过不同的方式协同实现双层石墨烯中较大能隙的打开对石墨烯的应用具有十分重要的意义。

近日，该研究团队在大面积、高质量AB堆垛双层石墨烯的可控制备及其能隙调控方面取得研究进展。他们此前在Ru(0001)表面实现了厘米尺寸、单晶、AB堆垛双层石墨烯的可控生长。在此基础上，通过硅插层技术在双层石墨烯和Ru衬底的界面处实现了硅烯的插层生长（图1）。硅烯的插层有效地削弱了底层石墨烯与Ru基底之间的相互作用，使得双层石墨烯的本征性质得以恢复；此外，拉曼（Raman）光谱中石墨烯的2D特征峰出现较大的蓝移，预示着在双层石墨烯中存在压应力（图2）。进一步角分辨光电子能谱（ARPES）研究发现，双层石墨烯受到电子掺杂，并在K点处打开了一个0.2 eV的较大能隙（图3(a)）。但是，自由的AB堆垛双层石墨烯是没有能隙的。为了理解这一能隙产生的机制，研究人员利用密度泛函理论计算发现，基于Ru上双层石墨烯与硅烯形成的异质结构的能带显示，在费米面附近打开了0.2 eV的能隙（图3(b), (c)），与实验结果完全吻合。但是，在这个体系中石墨烯同时存在压应力及电子掺杂，0.2 eV能隙产生的原因并不明朗。进一步计算发现，如果施加与实验同等大小的掺杂浓度（或应力），只能使AB堆垛双层石墨烯打开小于0.06 eV的能隙（图4(a), (b)），远小于实验观测值。研究进一步考虑了在具有应力的双层石墨烯上同时进行电子掺杂，其可以在低浓度电子掺杂下打开一个大的带隙（图4(c)）。这一能隙的打开并不是由单纯应力与单纯掺杂分别引起的能隙的简单加和，而是电子掺杂和压应力协同作用的结果。该工作提供了一种调控石墨烯能带结构的新方法，对功能石墨烯器件的构造具有重要价值。

相关成果发表在Nano

Letters上。该工作得到了科学技术部、国家自然科学基金委和中科院的资助。

[论文链接](#)

图1 双层石墨烯/Ru界面处硅烯的插层。(a)-(b) 硅烯插层过程示意图；(c)-(d) 硅烯插层前后的LEED图像；(e)-(f) 硅烯插层前后STM图像。

图2 硅烯插层前后双层石墨烯的Raman光谱分析。(a)

Ru表面硅烯插层前后单层石墨烯及双层石墨烯的Raman光谱对比；(b)
硅烯插层前后双层石墨烯的2D特征峰的分析拟合。

图3 硅烯插层后双层石墨烯的电子结构。(a) 双层石墨烯的ARPES谱；(b) 优化后的起伏双层石墨烯/硅烯/Ru的原子结构模型；(c)基于(b)中结构模型计算的能带结构，红点组成了投影到双层石墨烯上的能带结构。

图4 分别考虑掺杂或应力时双层石墨烯的能带分析。(a)

仅考虑来自硅烯/Ru衬底的掺杂效应时双层石墨烯的能带结构；(b)
仅考虑双层石墨烯起伏/应力情况下的能带结构；(c)
同时考虑掺杂和起伏/应力时双层石墨烯的能带结构。

研究团队单位：物理研究所

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