

原子尺度调节镓锌混合氮氧化物纳米线能带结构研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12491.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，中国科学院国家纳米科学中心研究员宫建茹与南京航空航天大学教授宣益民、中科院高能物理研究所研究员张静合作，在原子尺度调节 $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ 固溶体纳米线能带结构研究方面取得新进展，1月21日，相关研究成果以 Atomic arrangement matters: band-gap variation in composition-tunable $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ nanowires 为题，在线发表在 Matter 上。

$(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$

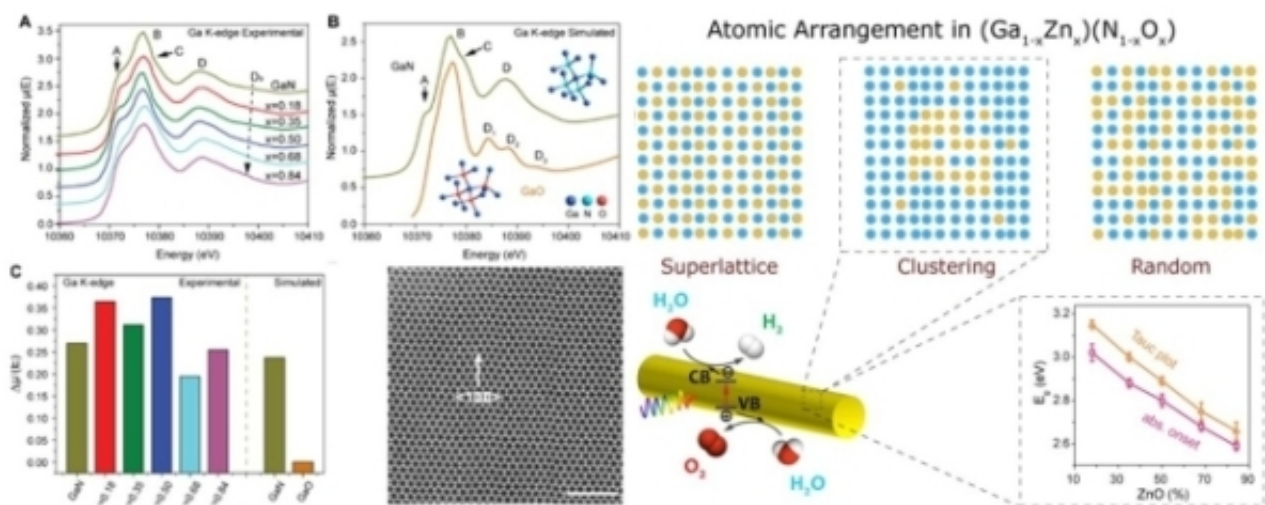
固溶体由日本东京大学教授 Domeni 课题组首次发现，迄今仍是可见光下效率最高的光催化纯水分解催化剂之一。然而，由于原子尺度下组成元素的排布规律并不明确，该材料禁带结构随其组分变化的规律以及内在机理尚不明确。

为解决上述问题，研究团队精心设计出一种独特的化学气相沉积工艺，以商业化试剂作为前驱体，制得化学组分连续可调的单晶 $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ 纳米线。该工艺将 $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ 制备时间缩短至1小时以内，相比传统高温氮化方法需要数天反应时间，效率明显提高。

借助同步辐射X射线精细结构分析，研究人员对纳米线的原子排布规律进行了深入研究，结合第一性原理计算模拟，揭示了纳米线X射线近边吸收谱的细微变化与其内部原子排列规律有直接关联，并证实了 $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ 固溶体中价态匹配的Ga-N和Zn-O原子存在团簇化趋势，即短程有序。

基于上述发现，研究人员提出短程有序原子排布导致纳米线内部Ga-N或Zn-O原子团簇与ZnO或GaN主体材料形成大量晶内异质结，晶内异质结的II型能带排列进一步决定了 $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ 固溶体的能带结构，导致其带隙随ZnO含量增加持续减小。

该研究解决了 $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ 体系中长期困扰科研工作者的关键难题，并显示出原子排列调控在调节多元固溶体半导体能带结构方面的巨大潜力，为新型高效光催化材料的设计开发提供了新的思路。研究工作得到中科院战略性先导科技专项（B类）、国家自然科学基金委员会基础科学中心项目和国家重点研发计划重点专项等的资助。



微观原子排列调控固溶体半导体能带结构

研究团队单位：国家纳米科学中心

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](https://www.iikx.com)转发