中国科学家成功制备高质量大面积双层硼烯

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/16564.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！

中国科学家成功制备高质量大面积双层硼烯。近日，中国科学院物理研究所吴克辉、陈岚研究员实验课题组和中国科学技术大学化学与材料科学学院武晓君教授理论计算课题组合作，率先成功利用超高真空分子束外延（MBE）的方式在Cu（111）表面成功地合成了高质量大面积双层硼烯，揭示了双层硼烯的结构及其与衬底的相互作用、电荷分布以及电子结构等性质，确定了双层硼烯在Cu（111）表面生长的主要因素。

北京时间11月12日零时，相关成果以Synthesis of Bilayer Borophene为题在线发表在Nature Chemistry期刊上。陈彩云博士和吕海峰博士为共同第一作者，陈岚研究员、吴克辉研究员和武晓君教授为共同通讯作者。

二维材料因有着原子尺度的厚度和独特的性能，被认为在纳米电子器件中有极大的应用潜力而受到关注。硼烯是指由硼元素构成的二维平面结构，由于硼原子相对于碳原子缺少一个价电子，使得硼原子之间的化学键较为复杂，理论上所形成的平面结构是以三角形密堆积晶格为基础的孔洞型结构，而根据孔洞不同的排列方式，导致了多样化的硼烯原子结构，因此被认为结构最丰富的单元素二维材料。然而，虽然关于硼烯的理论研究早就已经开始，2012年，武晓君教授、曾晓成教授、杨金龙教授等理论预言了包括ß12，χ3等在内的34种稳定的硼烯单层结构（ACS Nano 6, 7443 (2012)）。但是由于硼烯没有对应的层状体材料，不能像石墨烯那样通过机械剥离获得，且硼具有高熔点、低蒸汽压的特点，因此硼烯的合成一直面临着挑战。

经过长期的探索和积累，2016年，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心表面实验室SF09组吴克辉研究员、陈岚研究员、冯宝杰博士等率先利用超高真空分子束外延的手段直接进行单原子层构筑的方法在Ag(111)衬底上获得了理论上期待已久的硼烯（Nature Chemistry 8, 564 (2016)），完成了硼纳米结构的最后一块重要拼图，并证实了硼烯结构的多样性。而且，通过衬底相互作用的精确调控，他们还成功制备出蜂窝状结构（Science Bulletin 63, 282(2018)）和准一维链状混合相的硼烯（Advanced Materials 32, 205128 (2020)），以及硼烯纳米带（Physical Review Materials 1, 021001(R) (2017)）。

硼烯具有很多优越的性质，包括机械柔韧性、透光性、超高的热电导、一维近自由电子态、金属性狄拉克费米子以及超导性，表明硼烯具有在未来高速低散耗纳米尺度器件中广阔的应用前景。此外，多层二维材料因其优异的物理化学性质引起了研究者的关注，比如魔角双层石墨烯（超导-绝缘可调控）、少数层过渡金属硫族化合物（更高的超导特性、射频性能）以及其异质结（非对称自旋耦合、莫尔激子）等，相比于其单层结构具有更多的显著物理特性。对于硼烯也是如此，计算表明双层硼烯比单层结构具有更高的稳定性，这是因为双层结构硼原子之间存在层间共价相互作用。而且不同的双层硼烯结构被预言为狄拉克节线半金属、超导体以及优异的锂电池阳极

材料，有巨大的应用潜能。然而由于金属表面的钝化作用，超越单层的硼烯（比如双层、三层）的结构很难在金属表面上被制备出来。

最近吴克辉研究员和陈岚研究员实验团队率先利用超高真空分子束外延（MBE）的方式在Cu(111)表面成功地合成了高质量大面积双层硼烯。武晓君教授理论计算课题组对双层硼烯体系进行了第一性原理研究，揭示了双层硼烯的结构、稳定性，以及其与衬底的相互作用、电荷分布和电子结构等相关性质。

扫描隧道显微镜（STM）的实验表征和第一性原理计算相结合，可以得到Cu(111)衬底上单层、双层硼烯均是由锯齿状（zig-zag）硼链组成的层状结构，且具有金属性。双层硼烯层间硼-硼原子形成了共价键，提高了双层硼烯的稳定性，能量上的分析可以发现Cu(111)表面双层结构模型的热稳定性均显著高于单层硼烯。电荷密度分布的计算表明，Cu(111)衬底可以将更多的电子转移到第一层硼。更近一步，第一层硼上明显的正负电荷积累区也揭示了剩余电子可以从第一层转移到第二层硼，从而导致双层中面内电子的再分布。Cu衬底与硼之间独特的电荷转移无疑是双层硼烯能在Cu(111)表面成功生长的最主要原因。

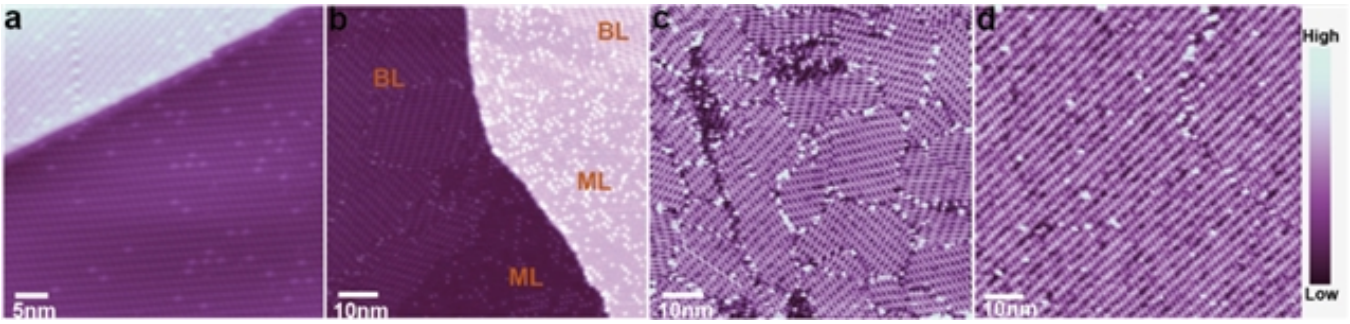


图1：单双层硼烯在Cu(111)衬底上随覆盖度的变化

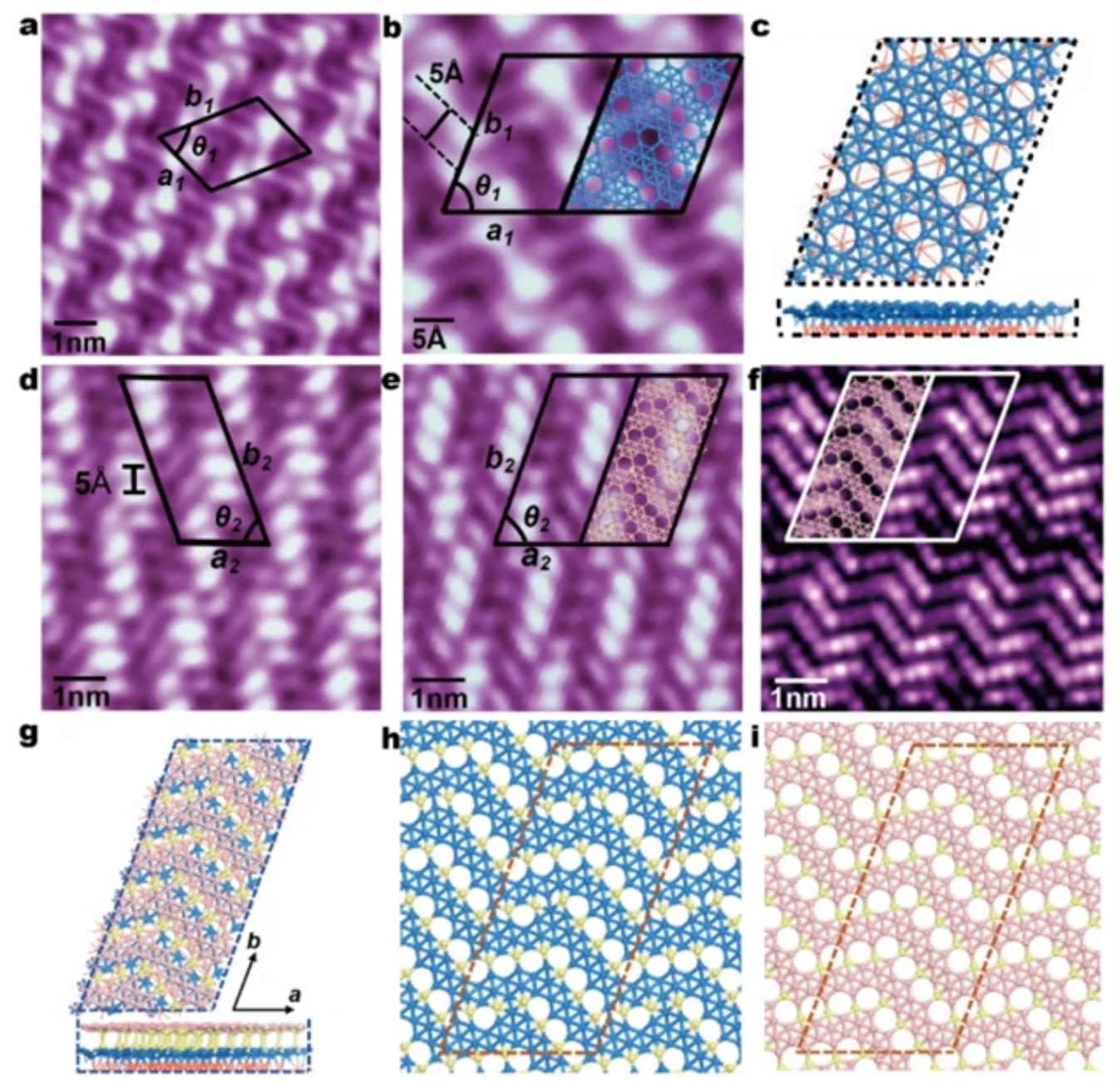


图2：Cu(111)表面单双层硼烯的高分辨STM图和原子结构模型

更重要的是，非原位的X射线光电子能谱（XPS）实验表明，Cu(111)表面双层硼烯在大气下比单层要稳定得多，仅有少部分被氧化，而单层硼烯全部氧化。双层硼烯的高质量制备及其高稳定性，为将来其他实验手段比如输运测量的研究提供了可能性，也表明其具有在器件领域的潜力与应用前景。同时，实现双层硼烯的生长开启了对少层硼烯的实验研究，开拓了硼烯研究领域的新方向。

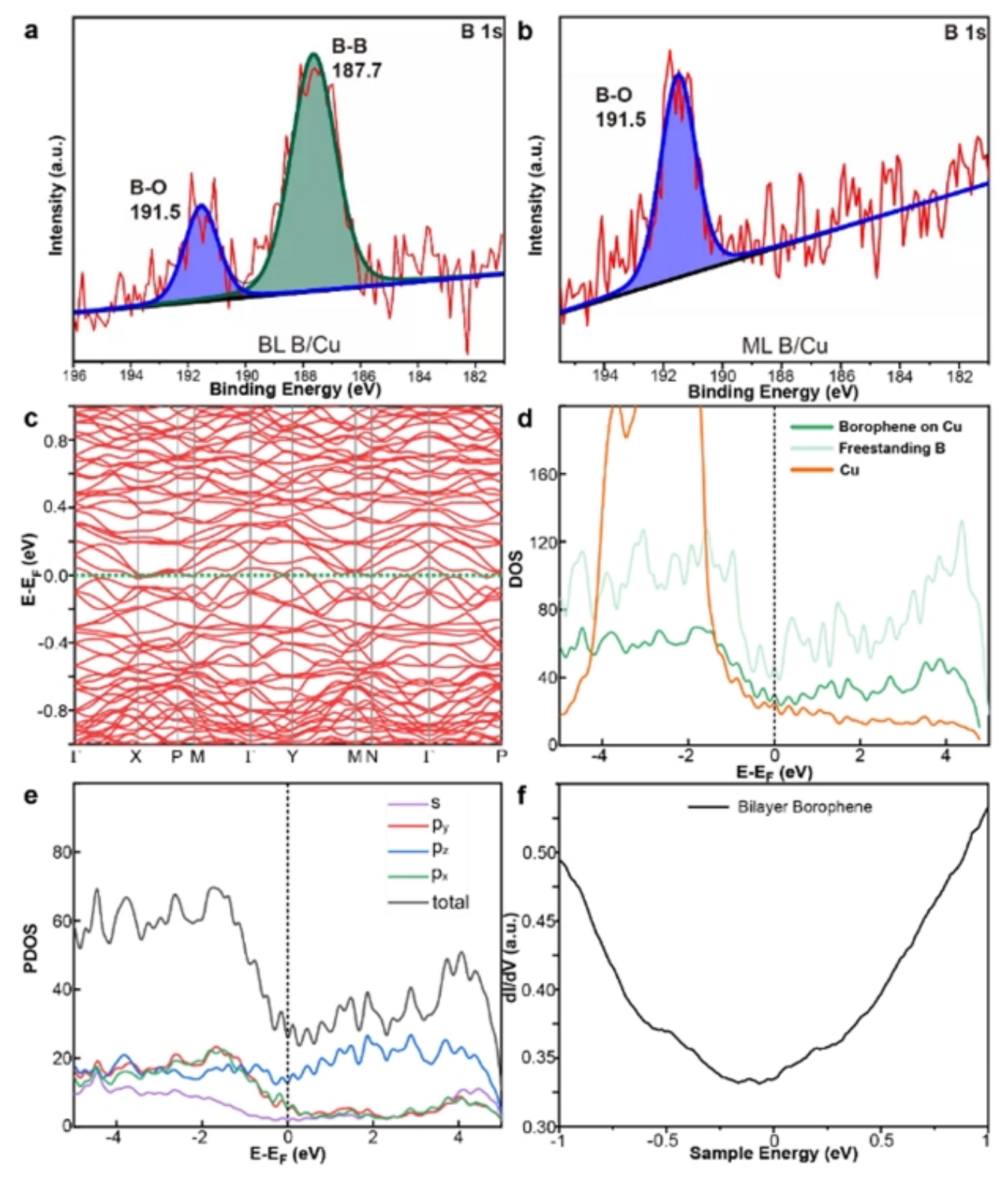


图3：双层硼烯的物理特性。

该工作获得了科技部、国家自然科学基金、北京市自然科学基金、国家青年拔尖人才支持计划、安徽省量子信息技术计划和中国科学院先导专项的支持。（来源：科学网）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41557-021-00813-z

作者：陈岚等 来源：《自然-化学》

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转发