

一维孪晶界的可控构筑研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24915.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！

二维过渡金属硫属化合物的孪晶界是嵌入孪晶之间的一维缺陷结构，具有独特的电学特性和优异的电催化活性，备受重视。通常，孪晶的生长和孪晶界的形成依赖于基底的外延取向作用，且对孪晶界密度的调

控存在较大困难，限制了其在电

学和电催化领域的大规模应用。

中国科学院大学特别研究助理朱俊

桐、南京航空航天大学教授张助华

、新加坡南洋理工大学教授刘政教和中国科学院大学物理科学学院特聘教授周武，利用金属源在不同表面扩散率的差异，首次在非晶基底上可控构筑得到高密度的过渡金属硫属化合物孪晶界，提高了过渡金属硫属化合物的电催化活性。

该工作开发的非外延生长方法可在多种非晶基底上可控构筑一系列的二维过渡金属硫属化合物的孪晶界，为孪晶界在电学和电催化领域的研究奠定了良好的材料基础。图2展示了该研究在非晶SiO₂基底上生长得到的具有高密度孪晶界的单层MoSe₂。

为探讨孪晶界在非晶基底表面形成的

机理，该研究对MoSe₂

随生长温度的演变进行了原位表征。在初始升温过程中，伴随着预旋涂的金属Mo源前驱体溶液中水分的挥发，Mo源会析出形成一些较大的颗粒。当环境继续升温，Mo源大颗粒会往其周围扩散，并围绕中央颗粒在基底表面形成高密度的小颗粒（图3）。这些小颗粒后续将成为生长独立MoSe₂

晶粒的成核点。然而，小

颗粒中的Mo源极少，但为了使其引发的MoSe₂

晶粒持续长大，则必须获得由中央颗粒通过表面扩散提供的Mo源。整个生长过程的温度不超过740 °C，可确保Mo源仅通过表面扩散（而不是蒸发-

凝结）的形式对

成核点进行金属原料的供给。理

论计算结果显示，Mo源在MoSe₂表面的扩散速率大于在SiO₂

基底表面的扩散速率，因此由中央大颗粒

生长的MoSe₂晶粒快速长大，而周围的MoSe₂小颗粒只有等中央的MoSe₂

晶粒长大接

触后才能获得充足的M

o源进行生长。在接触的过程中，由于独立的

MoSe₂小晶粒尺寸极小，毛细力会驱动MoSe₂

小晶粒进行旋转，使其边缘与中央MoSe₂大晶粒的边缘重合，从而形成具有统一晶界角度的孪晶界。这种晶体自取向的过程对基底没有选择性，可以在非晶基底上生长得到高密度的孪晶并形成孪晶界。唯像模拟所得的MoSe₂晶畴形貌、晶畴内孪晶界的形貌和孪晶粒的分布均与实验结果相一致（图3），由此验证了上述理论猜测。

为满足不同应用的需求，该研究还可有效调控孪晶界密度。当生长温度超过740 °C时，中央大颗粒周围扩散的小颗粒会气化导致成核点密度降低。在随后的生长过程中，气化的Mo源则通过气相沉积方式在MoSe₂边缘外延生长，进一步降低孪晶界密度。因此，通过简单的调控生长温度便可实现孪晶界密度的调控（图4）。此外，由于孪晶界中包含大量的具有高催化活性的八元环位错，740 °C生长的MoSe₂样品的电催化析氢活性是单晶MoSe₂样品的100倍，证明了孪晶界在电催化领域的应用潜力。

基于研究提出的生长理论，科研人员预测，传统的化学气相沉积法只需适当调整，可以生长孪晶界。只需要在650 °C维持三分钟使金属Mo源提前沉积到基底表面，随后以同样的晶体自取向方式即可在SiO₂基底表面构筑高密度的孪晶界（图5）。

本研究开发的晶体自取向生长方法，在非晶SiO₂上可非外延生长具有高密度孪晶界的过渡金属硫属化合物，解决了孪晶界构筑对生长基底的依赖性；同时，具有高密度孪晶界的MoSe₂可直接进行光电或电催化器件的制备，无需经历有损的转移过程。这一成果对医学领域的检测、传感和半导体领域的器件性能提升具有重要意义。此外，高密度的孪晶界为探索一维电子系统中的新型量子态及其在电子学和电催化中的潜在应用提供了前景广阔的平台。

相关研究成果以*Non-epitaxial growth of highly oriented transition metal dichalcogenides with density-controlled twin boundaries*为题，发表在《创新》（*The Innovation*）上。

研究工作得到国家重点研发计划、北京高校卓越青年科学家计划项目、国家自然科学基金、中国科学院战略性先导科技专项、中国科学院、教育部中央高校基本科研业务费专项资金等的支持。

[论文链接](#)

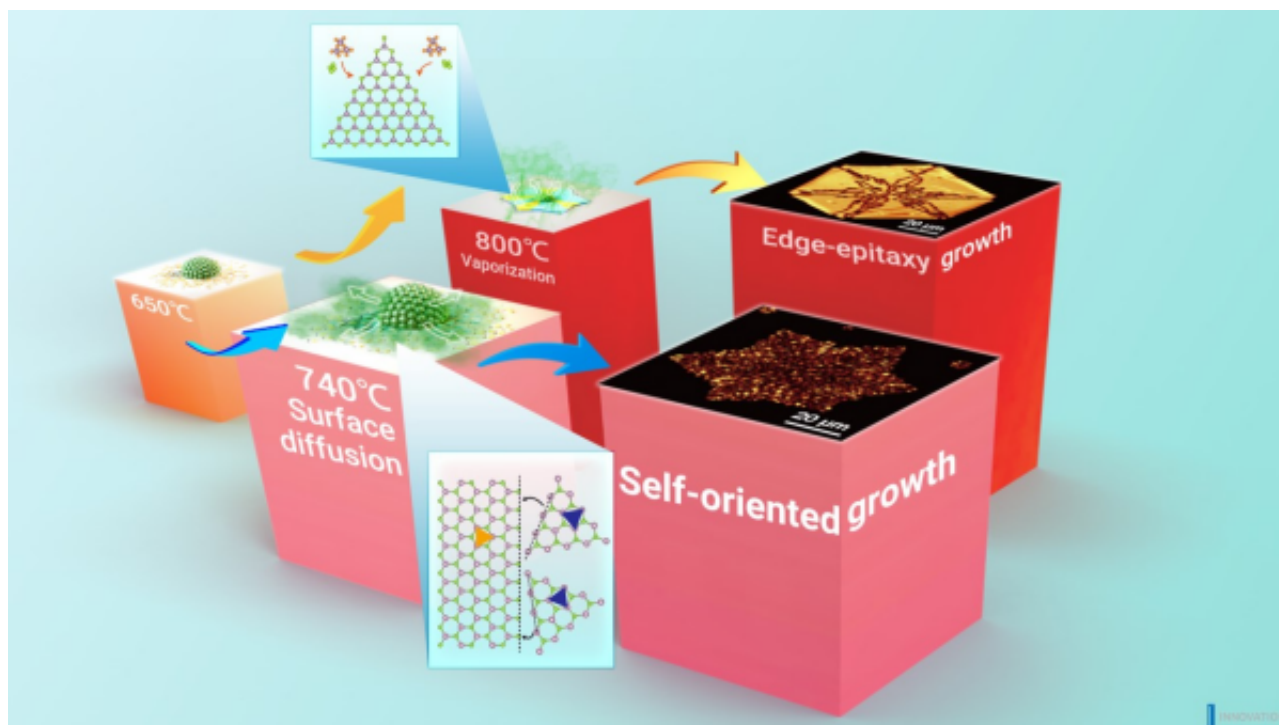


图1. 不同生长温度下的生长模式以及孪晶界密度的调控

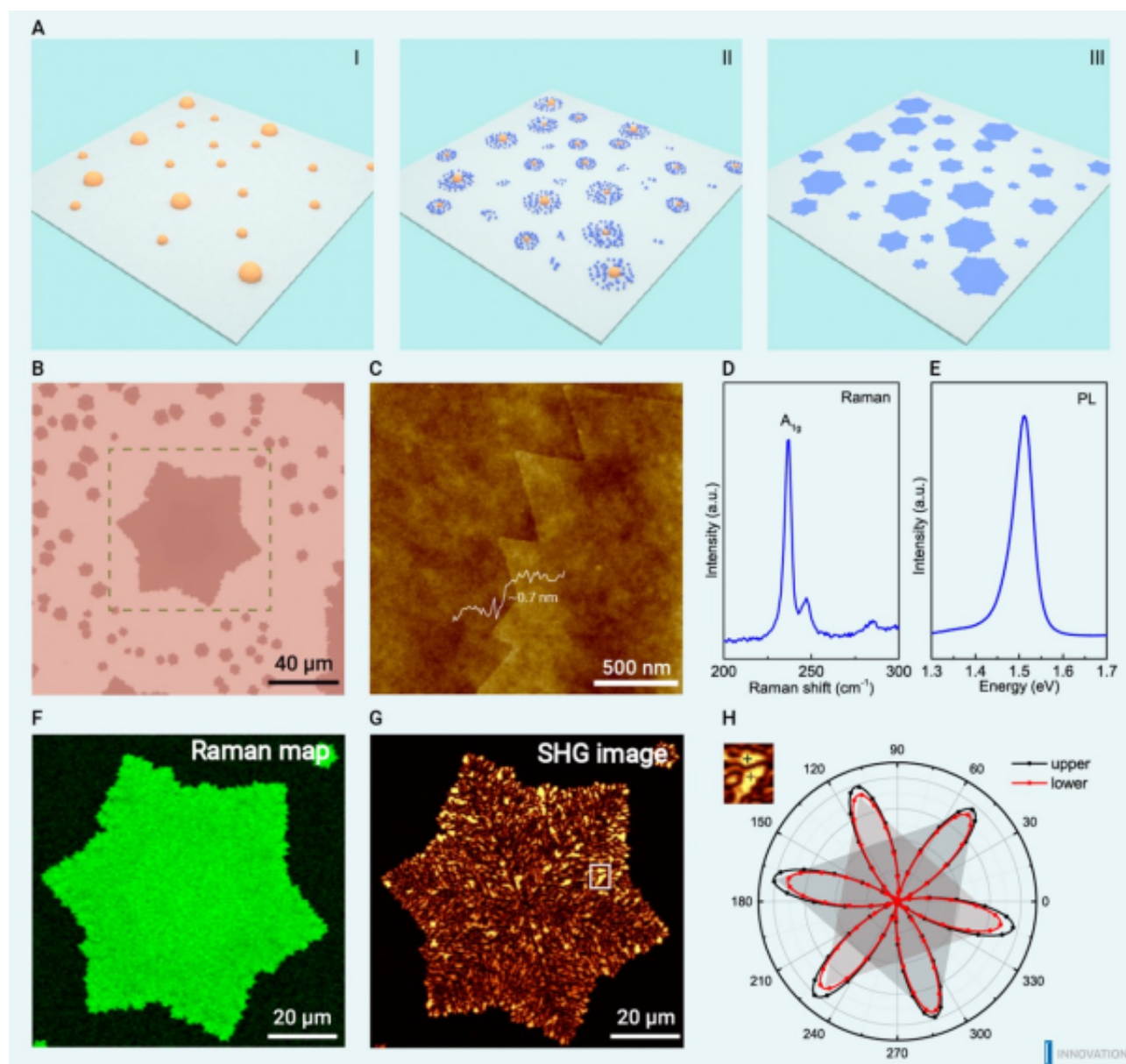


图2. 具有高密度孪晶界的MoSe₂的结构表征

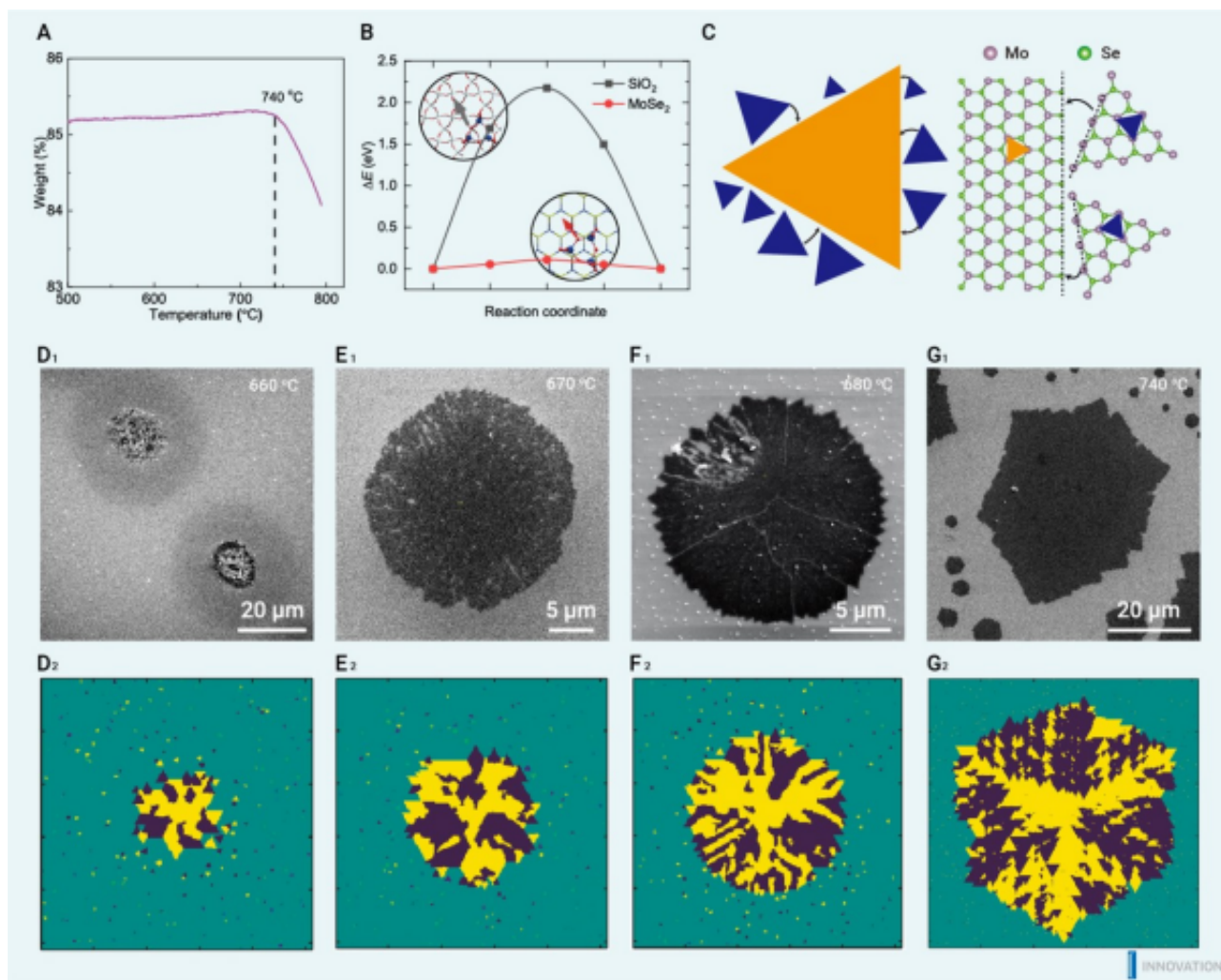


图3. 孪晶界的生长过程和机理解释

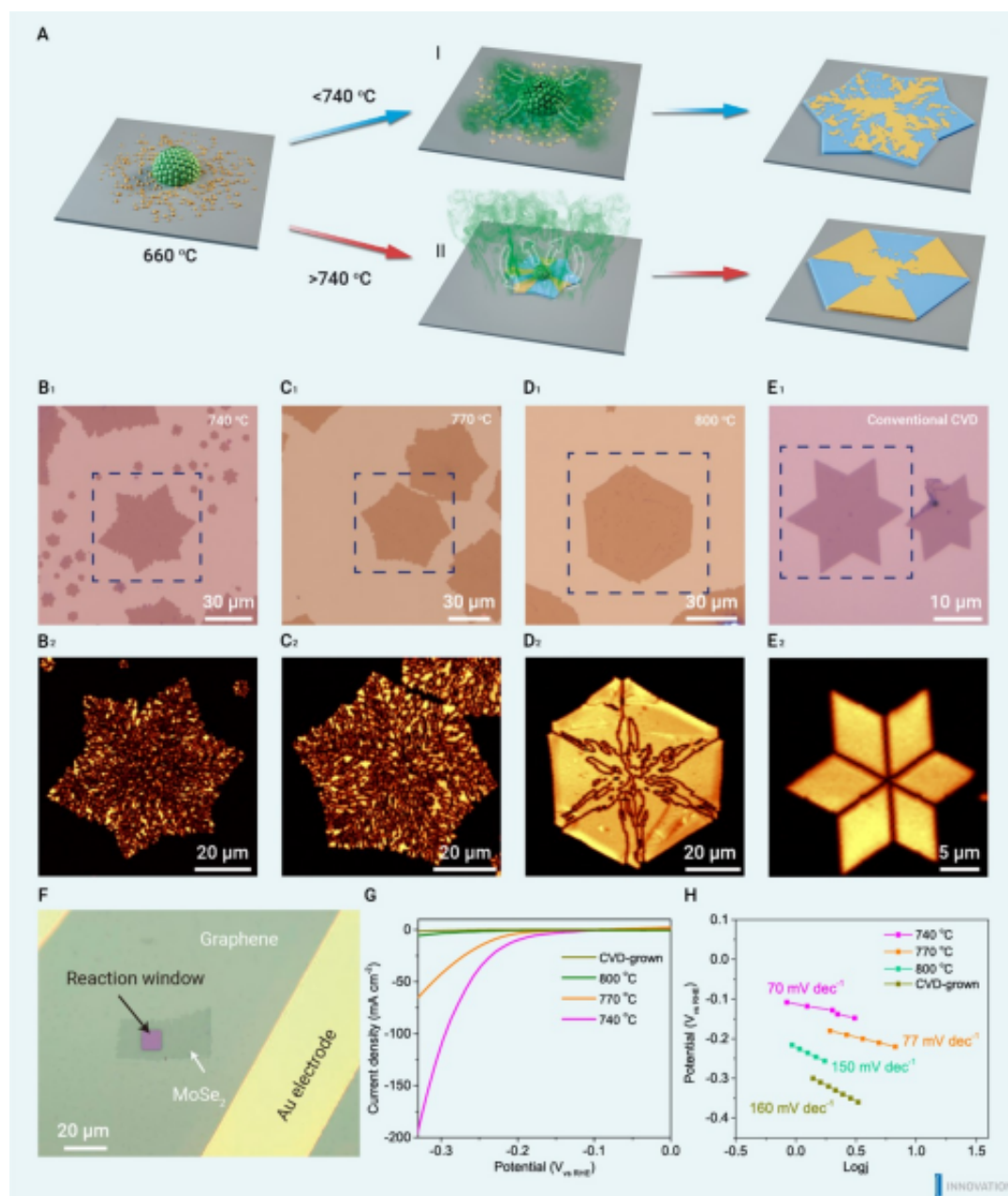


图4. 孪晶界的密度调控和电催化析氢结果

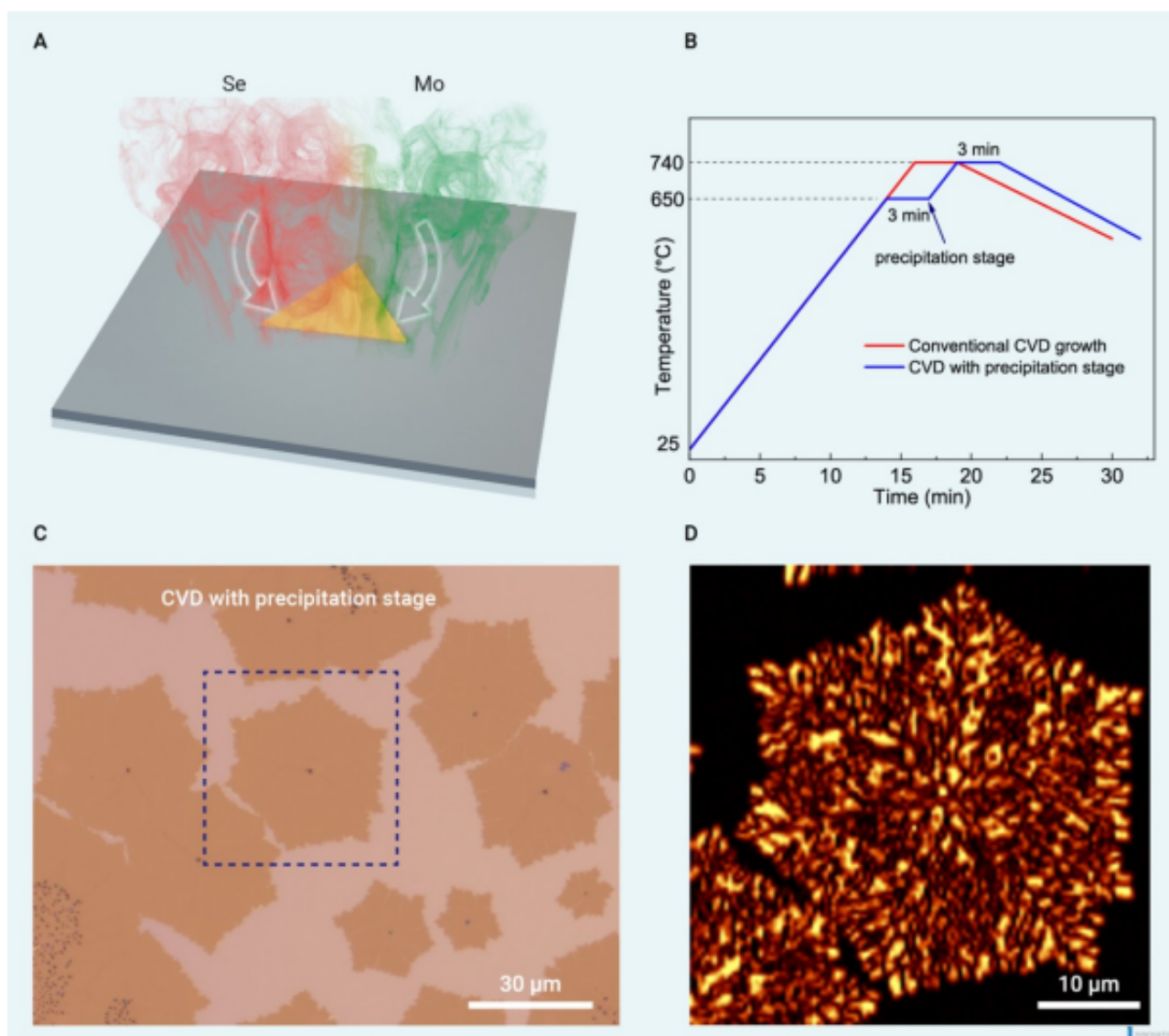


图5. 传统化学气相沉积法制备高密度多晶界

研究团队单位：中国科学院大学

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](http://iikx.com)转发