
FOE 华中科技大学李露颖课题组：原子尺度自组装有序多维异质结生长机理研究。

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/26031.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！

FOE

华中科技大学李露颖课题组：原子尺度自组装有序多维异质结生长机理研究。论文标题：Study of the growth mechanism of a self-assembled and ordered multi-dimensional heterojunction at atomic resolution

期刊：Frontiers of Optoelectronics

作者：Zunyu Liu, Chaoyu Zhao, Shuangfeng Jia, Weiwei Meng, Pei Li, Shuwen Yan, Yongfa Cheng, Jinshui Miao, Lei Zhang, Yihua Gao, Jianbo Wang, Luying Li

发表时间：15 Dec 2023

DOI：10.1007/s12200-023-00091-2

微信链接：[点击此处阅读微信文章](#)

Frontiers of Optoelectronics (2023) 16:35
<https://doi.org/10.1007/s12200-023-00091-2>

Frontiers of
Optoelectronics

RESEARCH ARTICLE



Study of the growth mechanism of a self-assembled and ordered multi-dimensional heterojunction at atomic resolution

Zunyu Liu¹ · Chaoyu Zhao^{2,4} · Shuangfeng Jia³ · Weiwei Meng³ · Pei Li³ · Shuwen Yan¹ · Yongfa Cheng¹ · Jinshui Miao⁴ · Lei Zhang² · Yihua Gao¹ · Jianbo Wang³ · Luying Li¹

第一作者：刘尊宇

通讯作者：李露颖、张蕾

通讯单位：华中科技大学、湖北大学

01

研究背景

Research Background

本文的研究背景是多维异质结材料的发展，这类材料因其高效率、在大范围内带隙调节能力、低维限制、多功能性和可扩展性而受到广泛关注。尽管研究者们已经采用多种技术将不同维度的材料结合起来，以提升其性能，但关于这些复合材料生长机制的研究尚不充分。本研究不仅填补了有序多维复合材料研究的空白，还为未来这类材料在多种应用领域的推广提供了理论基础和技术支撑。

02

文章简介

Brief Introduction

本文研究了多维异质结材料，特别是该异质结材料的自发生长机制。研究团队以准二维（quasi-2D）锑烯（Sb）和准一维（quasi-1D）硫化锑（Sb₂S₃）为例，研究了通过简单热注入方法合成的多维异质结材料的生长机制。研究发现，后续形成的纳米棒沿着纳米片上六次对称方向定向排列，形成有序的准1D/准2D异质结构。通过各种透射电子显微镜（TEM）表征技术，确认了其化学成分信息，并揭示了Sb₂S₃纳米棒与Sb纳米片基底之间的结构取向关系。进一步的密度泛函理论计算表明，界面结合能是自组装有序结构的主要决定因素。相关工作以Study of the growth mechanism of a self-assembled and ordered multi-dimensional heterojunction at atomic resolution为题于近期发表在Frontiers of Optoelectronics期刊上。

03

图文导读

Reading Guidance

创新点一：基于热注入法实现了准二维锑烯和准一维硫化锑复合材料的合成

这项研究中，通过热注入法成功合成了准二维锑烯和准一维硫化锑复合材料。合成流程与形貌特征如图1所示，复合材料的形成过程如图2所示。首先准备了SbCl₃-DDT溶液，然后将之注入到高温反应器中。在反应过程中，热注入引发了硫离子与反应器内锑离子的反应，从而生成了Sb₂S₃。随后，溶剂迅速冷却，导致Sb纳米片在300 至260 的温度范围内开始形成。随着温度的进一步降低，Sb的原子层数增加，二维材料逐渐转变为准二维材料。在冷却过程中，生成的Sb₂S₃纳米棒自发地以六次对称性排列在Sb纳米片上。这种方法不仅简化了材料的合成过程，还能够制备具有良好结晶性的Sb₂S₃纳米棒和Sb纳米片的复合材料。

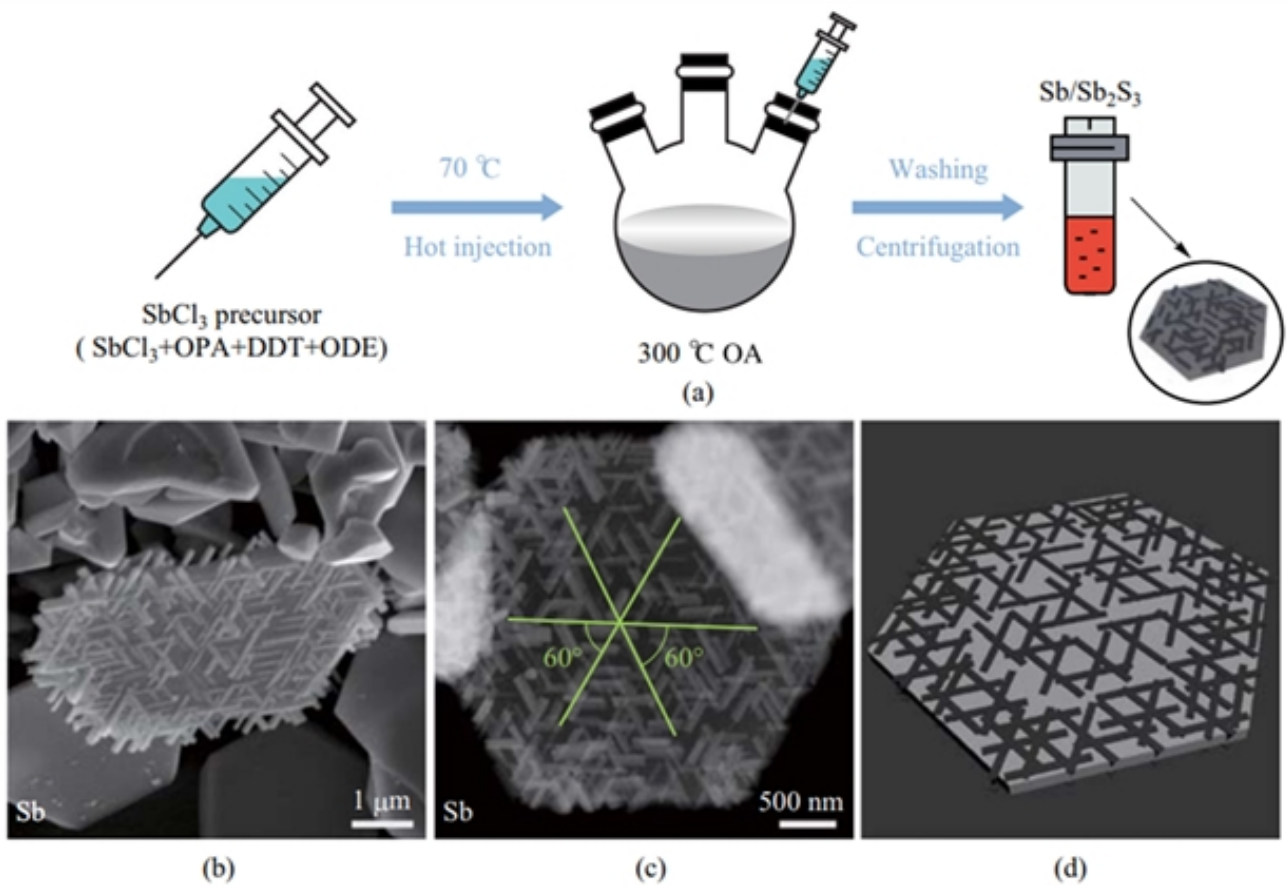


图 1 多维复合材料的合成与形貌特征。a)样品制备过程示意图；b)复合材料的扫描电镜（SEM）图像；c)高角环形暗场（HAADF）图像；d)复合材料的示意模型图，显示了纳米棒/纳米片的取向关系。

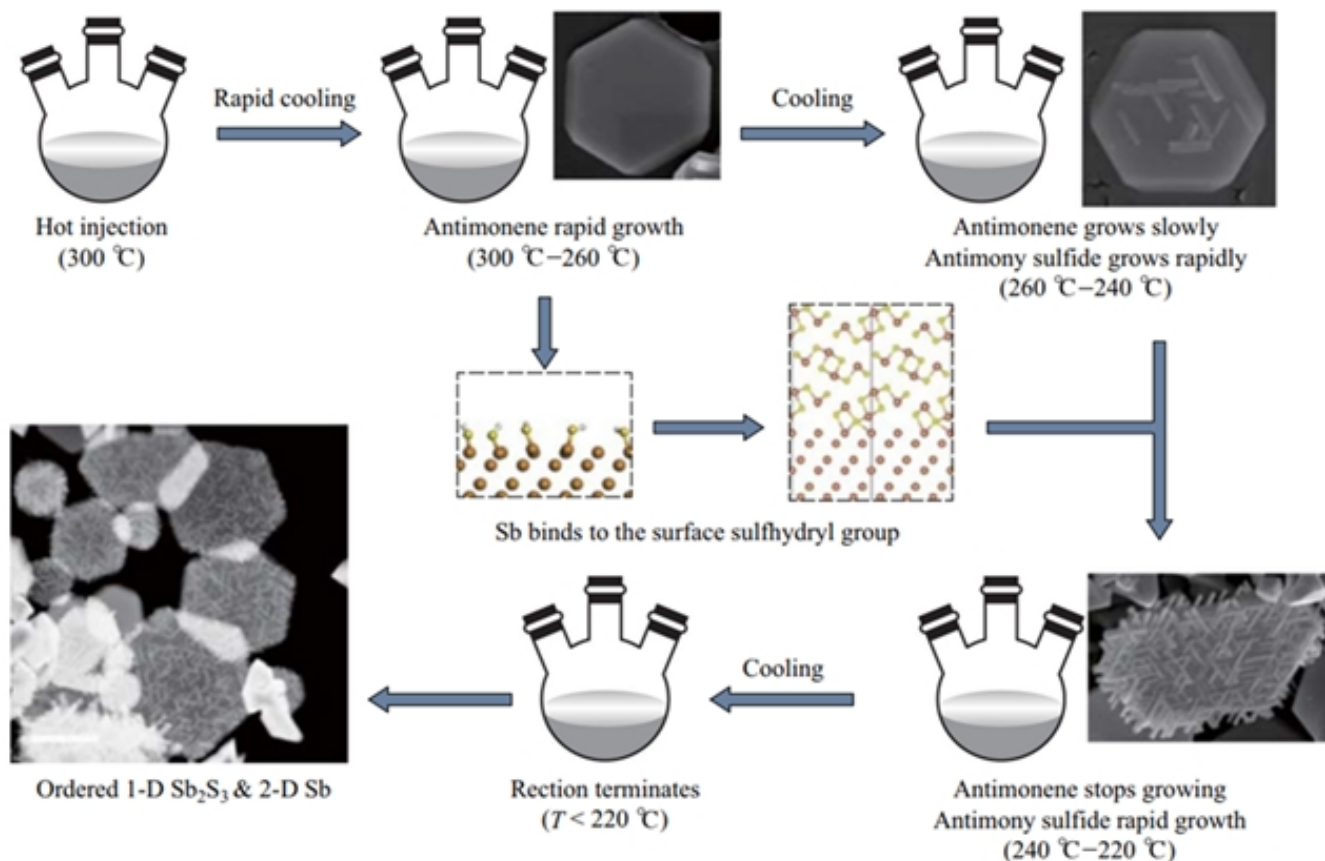


图 2 Sb₂S₃ 纳米棒/Sb 纳米片复合材料的形成过程示意图。首先利用热注入法在碱性溶液中还原 SbCl₃ 来生长 Sb 纳米片。随着厚度的增加，Sb 纳米片表面出现硫氢自由基。由于相邻的锑原子没有足够的能量形成锑-锑键，锑倾向于取代氢形成锑-硫键，由此硫化锑开始在锑纳米片的表面开始生长。

创新点二：揭示了 Sb₂S₃ 纳米棒在 Sb 纳米片上的六次对称定向排布的形成机制

在这项研究中，观察到 Sb₂S₃ 纳米棒在 Sb 纳米片上形成六次对称定向排布，其形成机制如下：首先，Sb 纳米片作为基底，其 (001) 晶面具有六次对称性。当 Sb₂S₃ 纳米棒在此基底上生长时，受到基底晶面对称性的影响，纳米棒倾向于沿着低结合能方向自发排列。通过密度泛函理论 (DFT) 计算，发现 Sb₂S₃ 纳米棒与 Sb 纳米片界面的结合能在某些特定晶向上最低，这就促使了纳米棒沿这些方向定向生长。研究发现，Sb₂S₃ 纳米棒与 Sb 纳米片间的取向关系为 [010]Sb₂S₃//[001]Sb。因此，这种特殊的结构特征和晶面取向关系共同导致了 Sb₂S₃ 纳米棒在 Sb 纳米片上自发形成六次对称定向排列。图 3 展示了对复合异质结构的化学成分分析结果。这些结果有助于深入理解复合材料的结构和化学成分，特别是在纳米尺度上的异质界面特性。

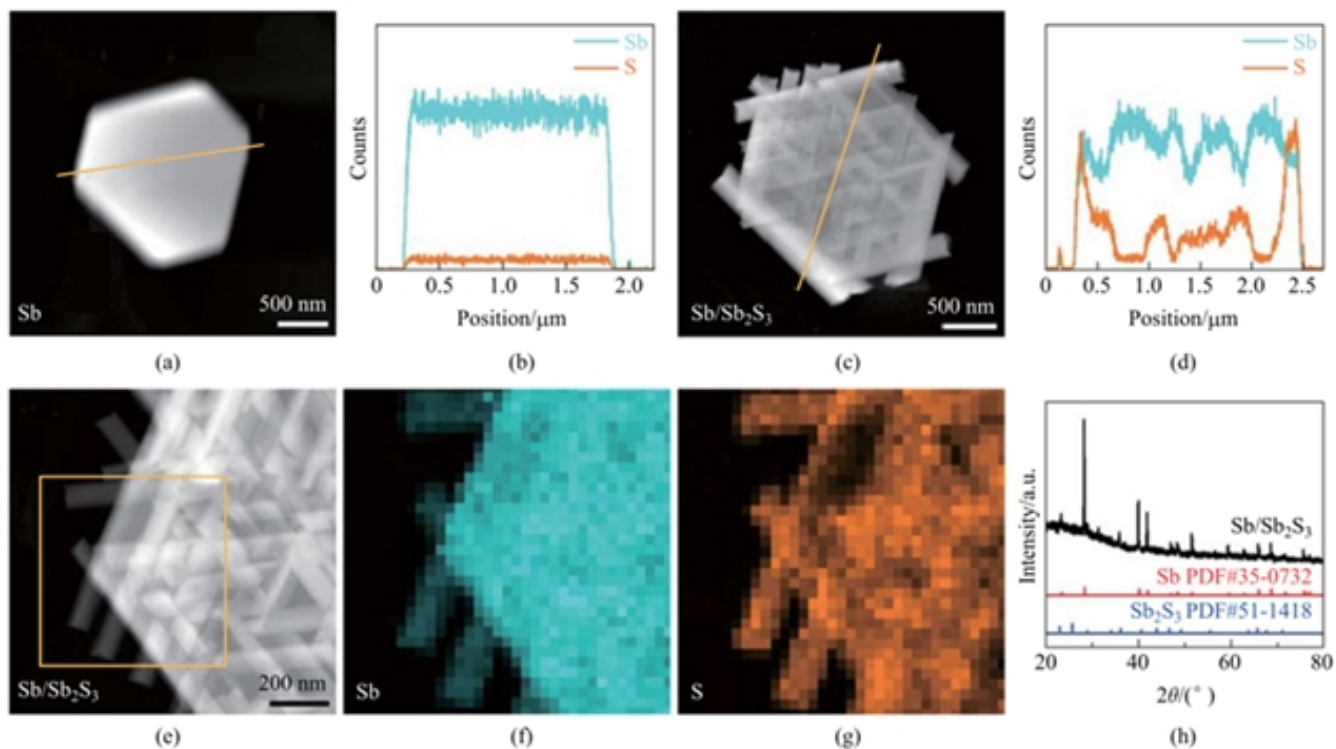


图3 复合异质结构的化学成分分析。其中，a和c分别是纯纳米片和纳米棒/纳米片复合物的高角环形暗场（HAADF）图像。b和d则是分别对应于a和c中用黄线标记方向的元素线扫描图。e-g为纳米棒/纳米片复合物的HAADF图像和二维元素分布图。h展示了所得产物的X射线衍射（XRD）谱。

图4 展示了Sb₂S₃纳米棒/Sb纳米片复合材料在平面视图中的结构表征。结果显示：纳米片和纳米棒的晶面取向与Sb基底平行，形成有序的准一维/准二维异质结构。可以确认该复合异质结构的晶面取向关系是[010]Sb₂S₃//[001]Sb和[001]Sb₂S₃//[100]Sb。这些研究结果为进一步探索Sb₂S₃纳米棒在Sb纳米片上有序生长的机制提供了重要信息。

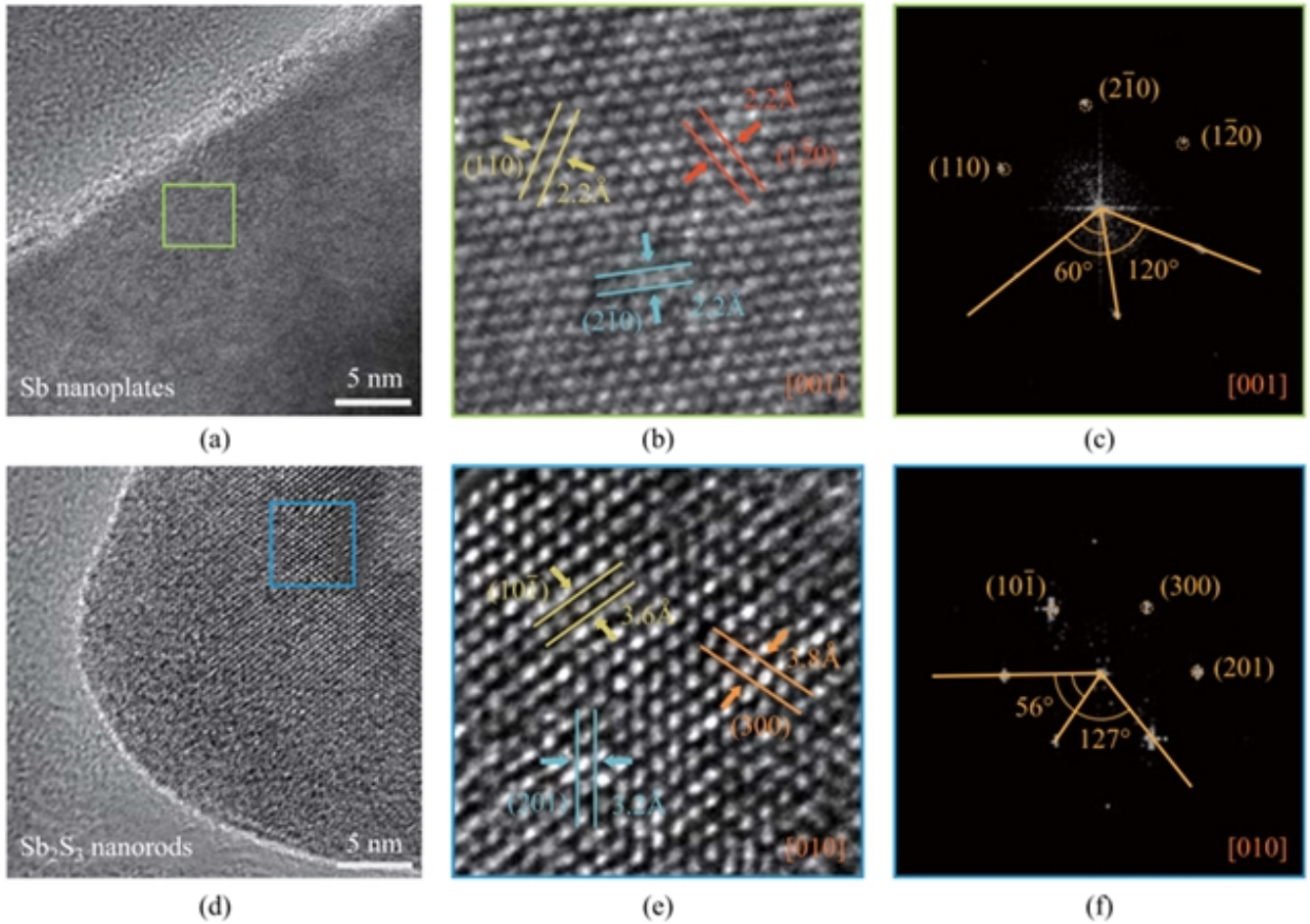


图4 平面视图中Sb₂S₃纳米棒/Sb纳米片复合材料的结构表征。a和d分别是相同复合材料中纳米片和纳米棒区域的高分辨透射电子显微(HRTEM)图像。b和e是a和d中对应绿色方框和蓝色方框所标记区域的放大图像。c和f分别是b和e的傅里叶变换图谱。

图5展示了Sb₂S₃纳米棒/Sb纳米片复合材料的截面结构特征。这些图像共同揭示了Sb₂S₃纳米棒与Sb纳米片之间的结构取向关系，可以更深入地理解该异质结构的形成机理和潜在应用。

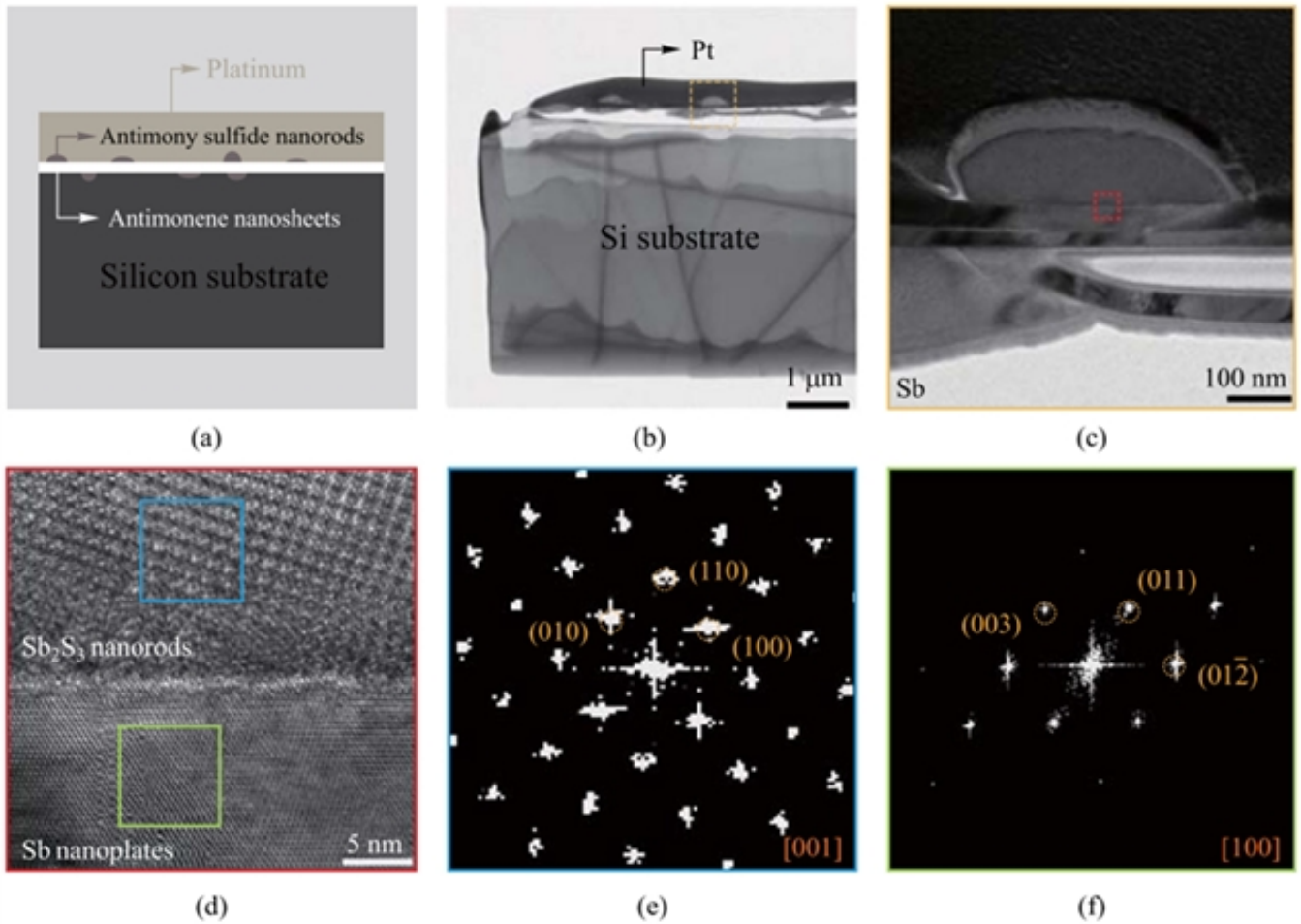


图 5 Sb₂S₃纳米棒/Sb纳米片复合材料截面的结构特征。其中：a描绘了用于聚焦离子束（FIB）样品制备的Sb₂S₃纳米棒/Sb纳米片异质结构的截面示意图。b展示了FIB截面样品的透射电子显微镜（TEM）图像。c对应b图中黄色虚线框区域的TEM图像。d为c图中红色框区域的高分辨透射电子显微（HRTEM）图像。e和f分别展示了d图中上部蓝色框和下部绿色框选定区域的快速傅里叶变换（FFT）。

图6展示了对复合异质结构的理论分析模型。该模型仅展示了两个原子层，以便更清楚地显示Sb和S之间较长的键长。这些晶界模型基于锑和硫化锑的晶体结构进行弛豫从而构造了晶界，其中包括不同方向上的Sb (001) 和 Sb₂S₃(010) 晶面的匹配。通过上述分析，可以更深入地了解该复合材料的晶界特性，以及它们在结构上如何达到稳定状态。

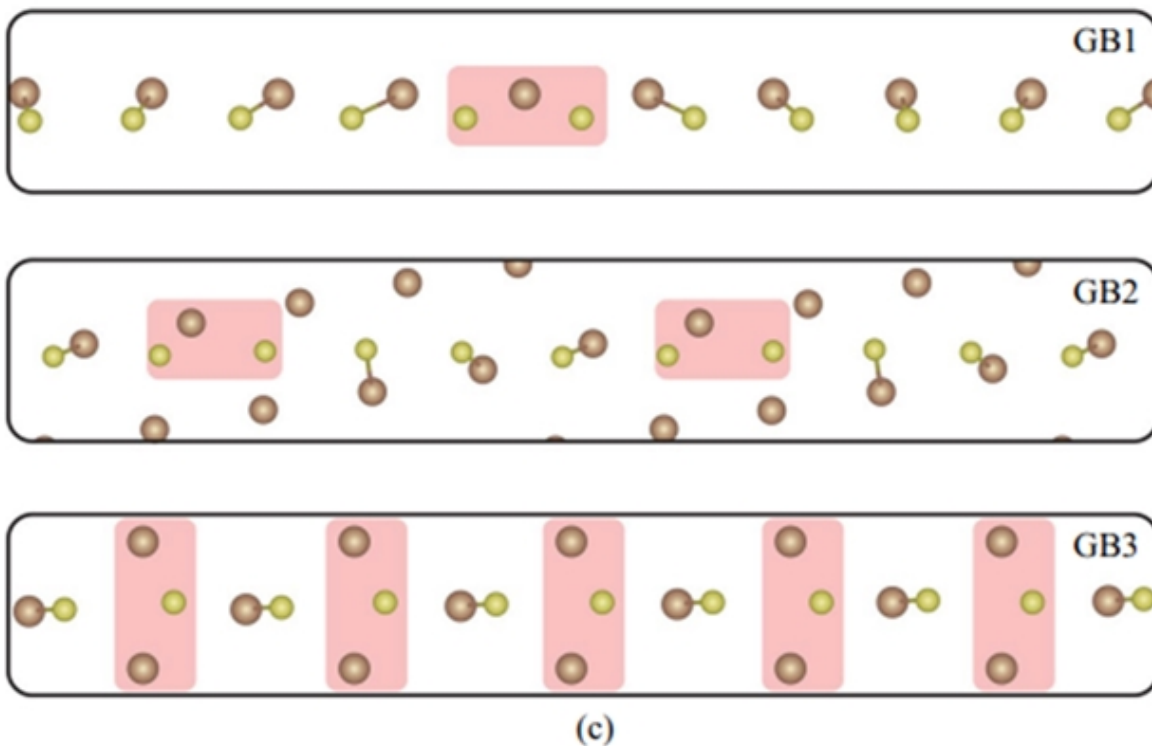
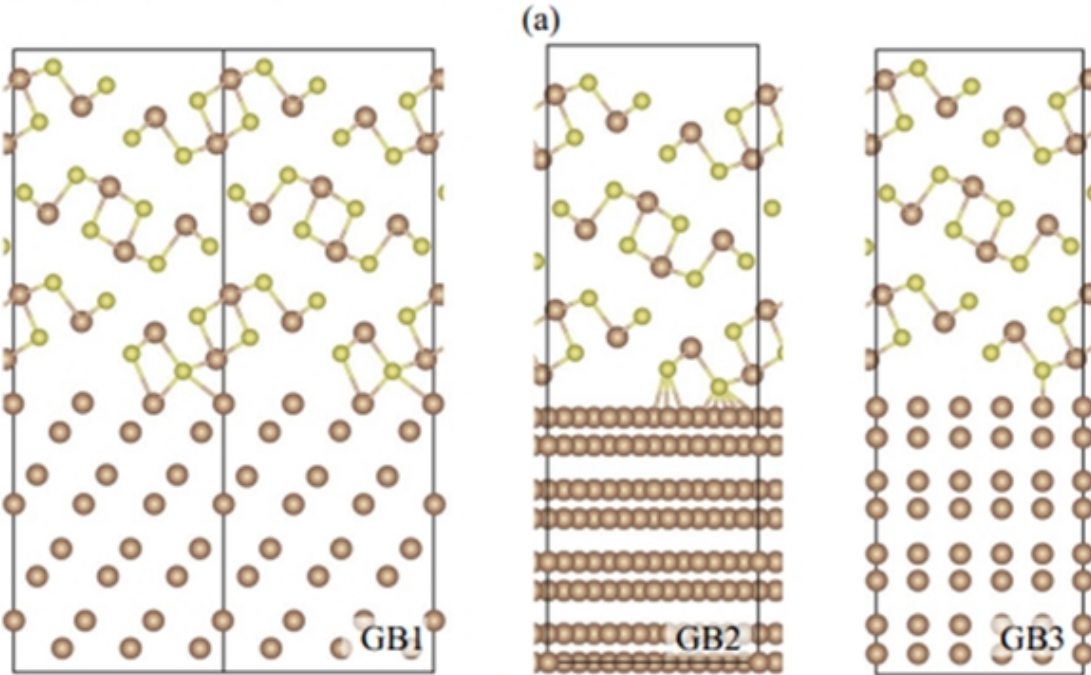
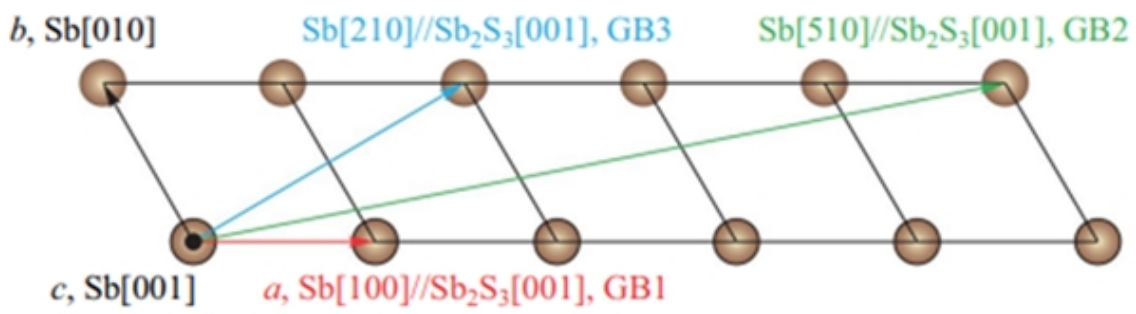


图6 对复合异质结构的理论分析。a) $\text{Sb}_2\text{S}_3(010)$ 和 $\text{Sb}(001)$ 之间三种晶界 (GB) 的取向关系；b) GB1、GB2和GB3的原子模型；c)

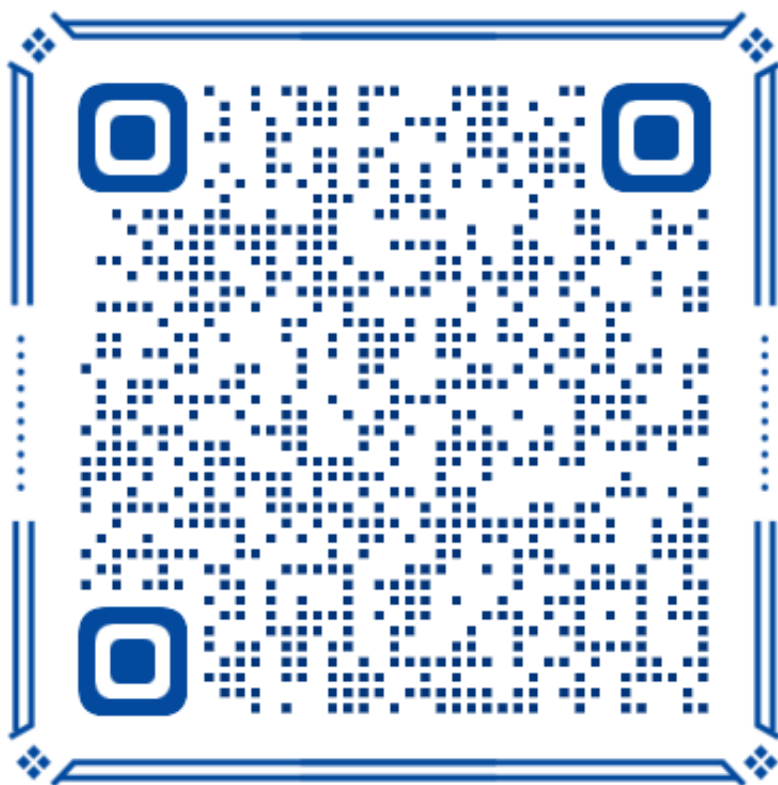
弛豫状态下 Sb_2S_3 -Sb界面的键合特性。其中棕色和黄色的小球分别代表锑 (Sb) 和硫 (S) 原子。

04

总结和展望

Conclusion and Outlook

本研究聚焦于多维异质结材料的生长机制，重点研究了通过热注入方法自组装形成的准二维锑和准一维硫化锑纳米棒的界面特性。通过透射电子显微镜 (TEM) 表征和第一性原理计算，确认了硫化锑纳米棒在锑纳米片上沿六次对称方向有序排列，而界面结合能是自组装有序结构的主要驱动力。这些发现有助于填补有关有序多维复合材料研究的空白，并将推动其在能源、光电、医药等领域的应用。展望未来，这项研究不仅为理解和设计新型多维异质结提供了重要的理论和实验依据，也为制备具有特定功能的高性能复合材料提供了新的视角和方法。未来研究可以朝着优化生长条件、探索更多材料组合，及其在不同应用领域的性能表现方向推进，以推动此类材料的实际应用和商业化进程。



扫码阅读全文

点击[Study of the growth mechanism of a self-assembled and ordered multi-dimensional heterojunction at atomic resolution](#)也可移步[全文链接](#)

05

作者介绍

Introduction to Authors

PI简介

李露颖，华中科技大学武汉光电国家研究中心教授，2006年获武汉大学物理系硕士学位，2011年获美国亚利桑那州立大学物理系博士学位。2011年12月开始在华中科技大学武汉光电国家实验室工作。目前的研究兴趣是半导体纳米材料的原子结构与特定物理性质之间的关系，主要集中在原子分辨率下的静电和原位性质。主持国家自然科学基金面上项目两项，国家自然科学基金青年项

目一项，高等学校博士学科点专项基金一项，留学回国人员科研启动基金一项，湖北省自然科学基金一项，湖北省青年科技晨光计划一项，华中科技大学自主创新研究基金两项。作为主要参与者参与国家重点研发计划两项。

第一作者介绍

刘尊宇，华中科技大学武汉光电国家研究中心博士研究生。主要研究方向为利用先进电子显微镜和原位透射电子显微镜研究纳米材料的形成机理、纳米结构及其在纳米器件中的应用。

期刊简介

Journal Introduction

Frontiers of Optoelectronics (FOE)是由教育部主管、高等教育出版社出版、Springer-Nature海外发行的Frontiers系列英文学术期刊之一，以网络版和印刷版两种形式出版。由北京大学龚旗煌院士、西安电子科技大学/华中科技大学张新亮教授共同担任主编。

本刊的宗旨是介绍国际光电子领域最新研究成果和前沿进展，并致力成为本领域内研究人员与国内外同行进行快速学术交流的重要信息平台。其联合主办单位是高等教育出版社、华中科技大学和中国光学学会，承办单位是武汉光电国家研究中心。FOE期刊已被ESCI, EI, SCOPUS, DOAJ, PMC, INSPEC, Google Scholar, CSA, OCLC, SCImago, Summon by ProQuest，中国科技核心期刊和中国科学引文数据库(CSCD)核心库等收录。2019年入选中国科技期刊卓越行动计划梯队项目。



《前沿》系列英文学术期刊

由教育部主管、高等教育出版社主办的《前沿》(Frontiers)系列英文学术期刊，于2006年正式创刊，以网络版和印刷版向全球发行。系列期刊包括基础科学、生命科学、工程技术和人文社会科学四个主题，是我国覆盖学科最广泛的英文学术期刊群，其中12种被SCI收录，其他也被AHCI、Ei、MEDLINE或相应学科国际权威检索系统收录，具有一定的国际学术影响力。系列期刊采用在线优先出版方式，保证文章以最快速度发表。

中国学术前沿期刊网

<http://journal.hep.com.cn>



高等教育出版社

Frontiers Journals

- Covering the fields of natural sciences, engineering, life sciences and social sciences & humanities
- Indexed by SCI, A&HCI, Ei, MEDLINE, Scopus, etc.
- Worldwide available
- Online first publishing
- Co-published by Springer, etc.

Content available online
<http://journal.hep.com.cn>

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费事宜，请与我们联系。

来源：Frontiers of Optoelectronics

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