新型金刚石研究获进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/33805.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！

新型金刚石研究获进展。金刚石被认为是最具潜力的下一代半导体材料，它是最坚硬的天然材料，同时还具有超宽带隙、高载流子迁移率、优异的热导率以及独特的自旋和光学特性，在量子计算领域也有广阔的应用前景。目前研究人员已经实验制备了多种新型金刚石结构（如准晶金刚石、纳米孪晶金刚石等）以调整其性能。特别是1991年发现了一种特殊的新型金刚石结构（n-Diamond），其凭借独特的结构特征（除了额外的禁止衍射外，它的电子衍射图案与传统的金刚石衍射图案非常匹配）和潜在的应用价值而引起广泛关注和研究。然而，由于制备的n-Diamond数量少、晶粒尺寸小、纯度低，其晶体结构尚未确定，从而严重制约了对其形成机理及性能的研究，限制了其发展和应用。

近期，中国科学院宁波材料技术与工程研究所成功制备了大尺寸 (9 mm×9 mm×1 mm) 新型单晶金刚石，X 射线衍射谱显示其与传统的立方金刚石具有明显区别，其具有较强的 (002) 衍射峰，表明其含有新型金刚石结构。研究人员利用球差校正透射电镜原子尺度表征，结合皮米精确原子识别技术和衍射模拟技术，发现并证明了金刚石原子发生了皮米尺度的不同程度的周期性定向偏移，并分析了原子偏移的物理机制，提出了新的结构模型（Subdisordered Structures），解释了新型金刚石结构特征。第一性原理计算表明，金刚石的带隙随着原子偏移距离的增加而迅速减小（当原子偏移17.5 pm 时，金刚石带隙从5.5 eV下降到0.5 eV），与实验结果（新型单晶金刚石电导率是传统单晶金刚石的106倍）一致，因此，皮米尺度原子偏移引起的带隙快速减小为调控金刚石电子特性提供了新思路。

研究结果澄清了困扰金刚石领域30多年关于n-diamond晶体结构的问题，为探究n-diamond的物理特性提供了结构基础，对于调控金刚石的电子特性和开发高性能金刚石及其相关器件具有重要意义。相关工作以Picometer-Scale Atomic Shifts Governing Subdisordered Structures in Diamond为题发表在Nano Letters上，并被选为封面论文（https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c01857）。论文第一作者为宁波材料所博士后崔俊峰，通讯作者为宁波材料所江南研究员、柯培玲研究员和陈国新高级工程师。本工作得到了国家自然科学基金、中国博士后科学基金面上项目、浙江省自然科学基金和宁波市自然科学基金等项目的支持。（来源：中国科学院宁波材料技术与工程研究所）

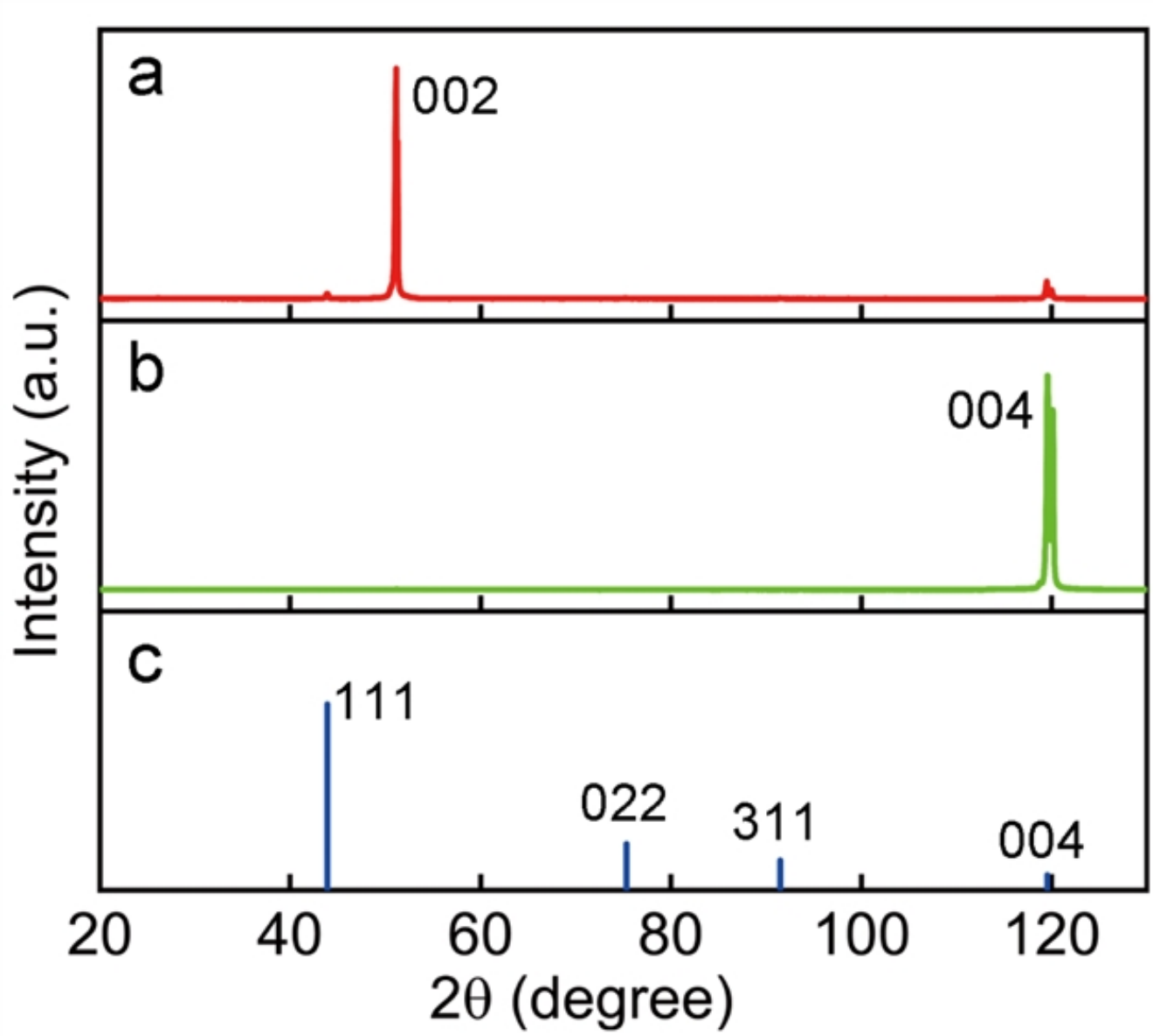


图1 新型单晶金刚石XRD衍射谱（a）、传统单晶金刚石XRD衍射谱（b）和传统金刚石标准粉末衍射谱（c）对比

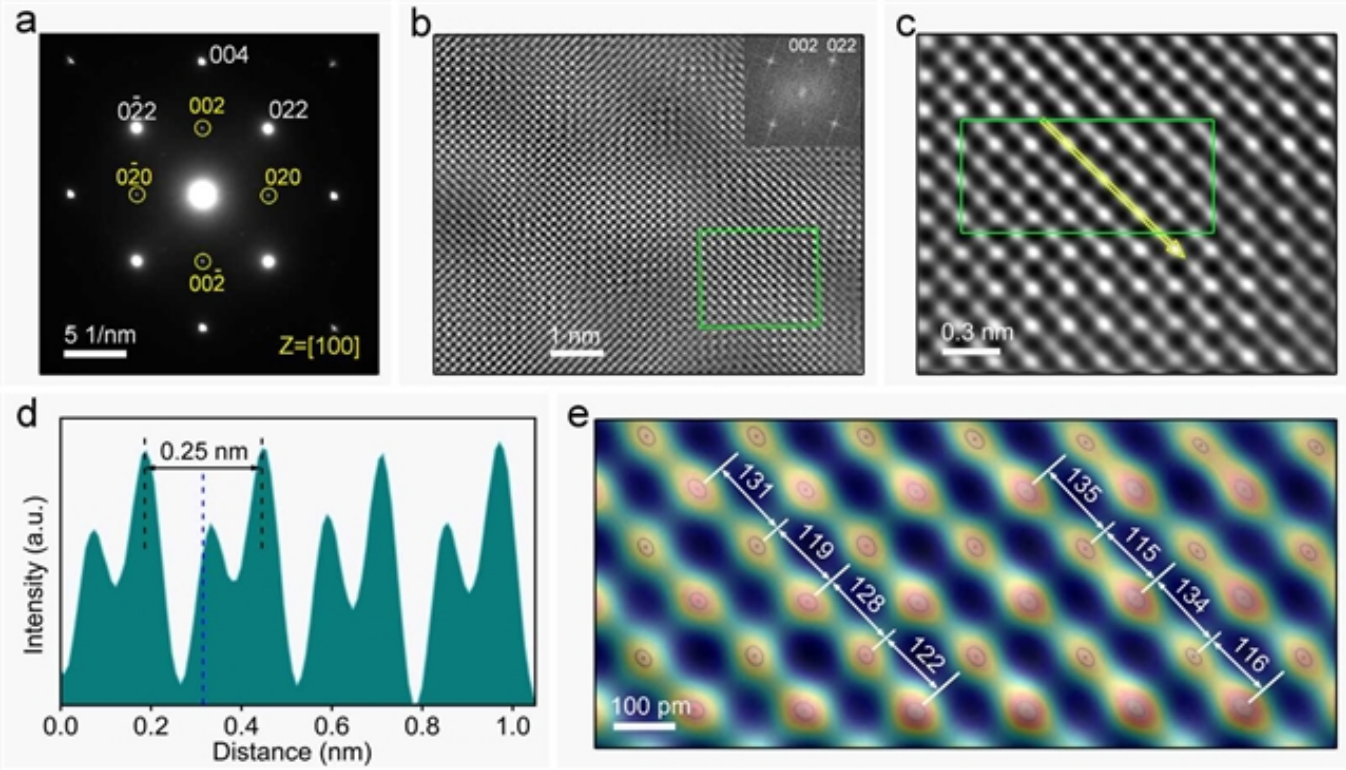


图2 新型单晶金刚石原子偏移透射电镜表征

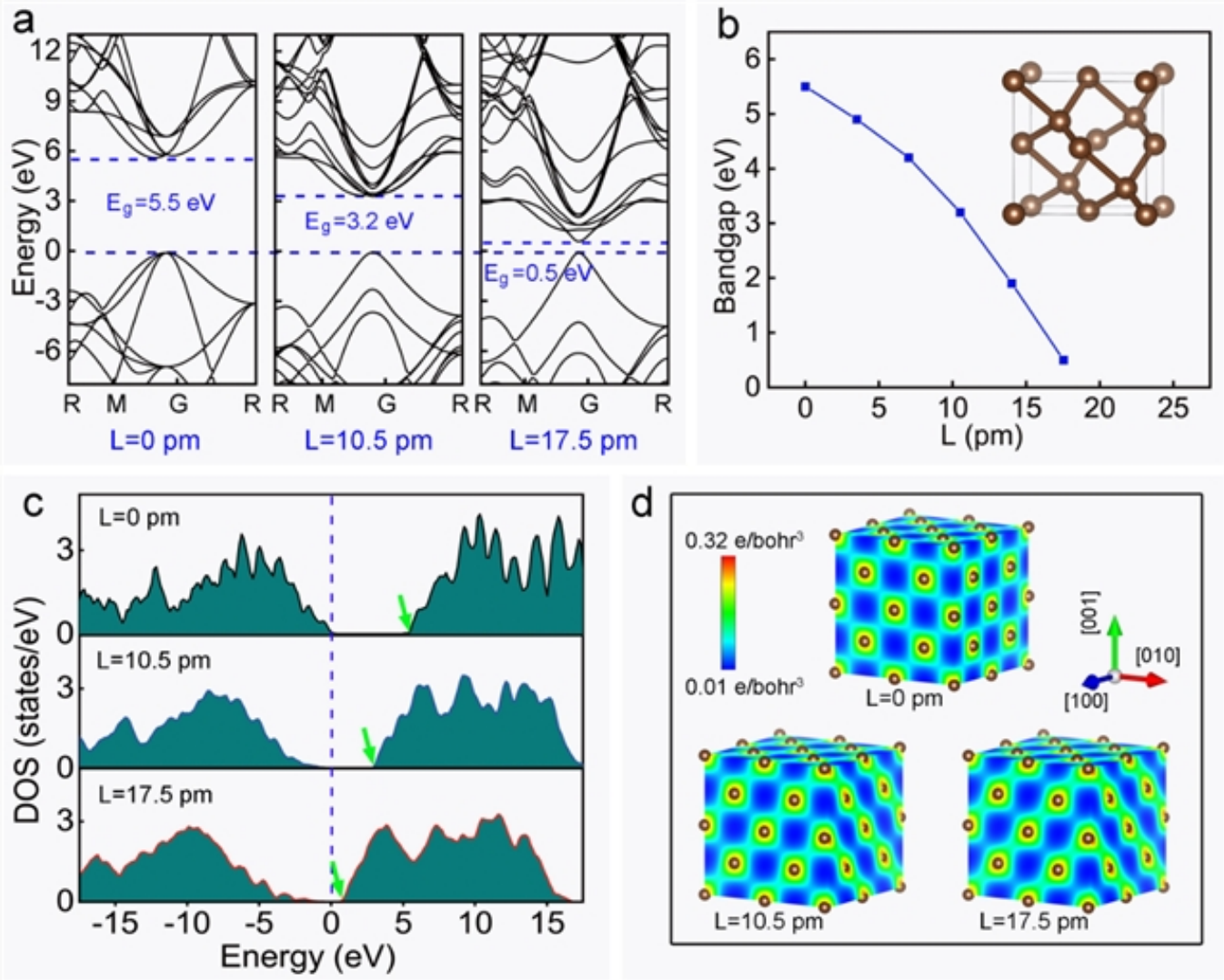


图3 金刚石原子偏移引起的电子结构变化

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c01857

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等事宜，请与我们接洽。
作者：江南等 来源：《纳米快报》

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