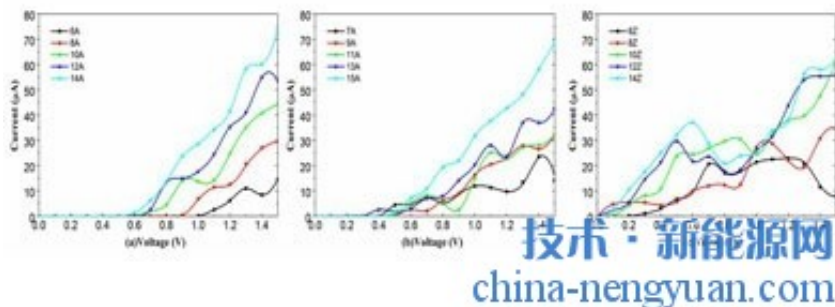


宁波材料所在二维MXene材料作为功能分子器件研究中取得进展



随着半导体产业快速发展，电子器件的尺寸已跨入纳米级，使得分子器件的设计和应用成为引导新型半导体材料发展的重要方向。对相关材料与器件进行量子力学的原子级别的模拟显得越来越重要。而二维材料作为新型功能材料最近几年受到了广泛的关注。为此，科学家希望石墨烯以及相关的二维材料制造出的低功耗电子器件能够为电子产业带来生机，带来革命性的技术和产品。

MXene作为一类与石墨烯类似的新兴二维材料，其优异的载流子迁移率及半导体特性使其在分子器件等方面有突出的巨大应用潜力。MXene来源于三元层状金属陶瓷 $Mn+1AX_n$ 相（M为过渡金属元素，A为主族元素，X为C或N，n一般为1~3，形成MAX相）。人们可以通过将MAX相中结合较弱的A位元素（如Al原子）抽出，得到这种层状的过渡金属碳化物或碳氮化物 $Mn+1X_nT_z$ 材料，其中 T_z 指表面基团（如 O_2^- 、 OH^- 、 F^- 、 NH_3 、 NH_4^+ ）。MXene材料具有制备简单、易调控和易器件化操作等优点，但目前还缺乏很深入的性能研究。

最近，中国科学院宁波材料技术与工程研究所采用密度泛函理论和非平衡格林函数相结合的第一性原理方法，对 Ti_2CO_2 MXene纳米带电荷输运性质进行了深入和系统的理论研究。研究表明：(1) Ti_2CO_2 纳米带的能隙可以通过改变其纳米带的宽度或晶向取向进行调控。非对称的扶手椅形纳米带的能隙随宽度的增加反而减小；对于锯齿形 Ti_2CO_2 纳米带的能隙很小，甚至为零。并且，量子限定效应对其能隙产生较大的影响：对称的扶手椅形纳米带在其能隙中产生边缘带。(2) 考虑不同宽度的 Ti_2CO_2 纳米带分子器件的电荷输运行为，得到锯齿形和扶手椅形纳米带器件的电流-电压曲线，发现 Ti_2CO_2 纳米带分子器件具有良好的负微分电阻现象，见附图所示；在扶手椅形的 Ti_2CO_2 纳米带中，因其能带的带隙有一定大小，所对应的分子器件也具有相应的开启电压，只有当电压超过这个临界电压时，才会产生电流。在这项工作中，研究人员也细致地研究了 Ti_2CO_2 纳米带分子器件负微分电阻现象起因的理论机制，提出了器件在不同偏压下，其左右电极的导带和价带之间变得不匹配，因而会导致电流下降。出现了负微分电阻现象。

总之，基于其良好的电荷输运性质，该研究迈出了以半导体MXene材料作为功能分子器件的第一步。这项研究工作被《物理化学期刊C》（Journal of Physical Chemical C）期刊接收发表（J. Phys. Chem. C 2016, 120, 17143 – 17152）。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/102983.html>