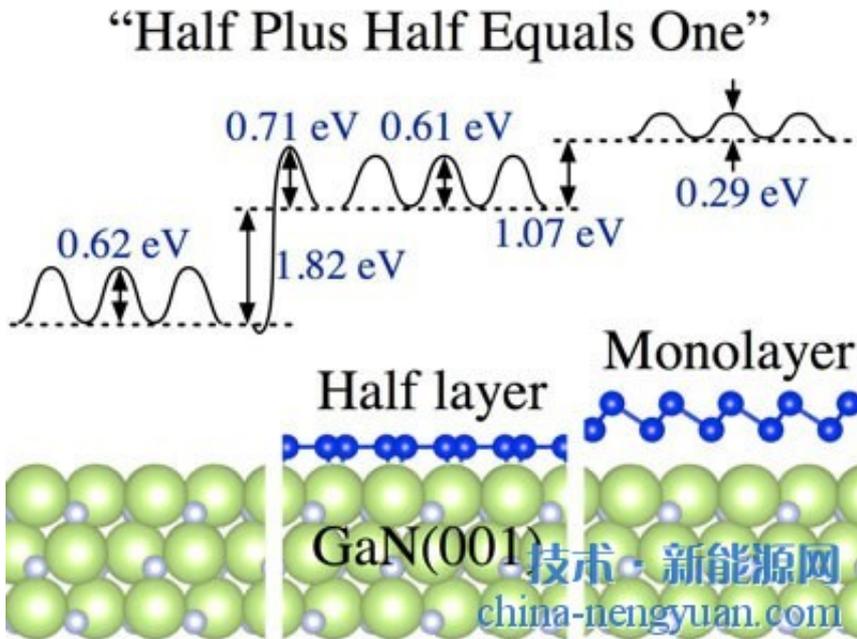


## 中国科大二维材料系列研究取得新进展



半层蓝磷与单层蓝磷在GaN（001）表面的形貌以及磷原子在其表面和界面的扩散势垒

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室国际功能材料量子设计中心在二维材料系列研究中取得新进展，理论上预言了在GaN（001）衬底上可外延生长单层蓝磷，并提出非常规的“半层-半层”生长机制。该研究成果以Half Layer By Half Layer Growth of a Blue Phosphorene Monolayer on a GaN（001）Substrate为题为于1月27日在线发表在国际物理学杂志《物理评论快报》上，并被选为编辑推荐（Editors' Suggestion）。博士生曾翠为第一作者，崔萍与张振宇为通讯作者。

二维材料具有很多优越的物理与化学性质。随着Geim和Novoselov于2004年成功地机械剥离出单层石墨烯，越来越多的凝聚态物理与材料科学研究都在围绕不同类型的二维材料展开。与石墨稀具有类似的二维层状结构的黑磷单晶，于2014年由中科大教授陈仙辉及其合作者通过机械剥离法首次获得。由于其超高的载流子迁移率和可调的能隙（直接带隙），黑磷在半导体工业和光学器件等方面有巨大的应用前景。单原子层的蓝磷作为黑磷的同素异形体也被预言可稳定存在。对于实际应用而言，基于外延生长制备出高质量二维黑磷或蓝磷单晶，是亟待解决的科研难题。

针对这一挑战，该团队通过第一性原理计算发现，由于蓝磷相对平整的结构形貌，其在衬底上总比黑磷更稳定，而Au（111）、Cu（111）以及GaN（001）都是适合蓝磷单层生长的衬底。而且由于磷元素与镓元素的化学亲和性以及较好的晶格匹配，蓝磷在GaN（001）表面更为稳定，这一推论也为基于第一性原理的分子动力学模拟所验证。通过多尺度生长动力学模拟，该团队还发现，蓝磷在GaN（001）衬底上的生长遵循“半层-半层”生长的非常规模式：当吸附的磷原子在GaN（001）表面的覆盖率增加时，磷原子会先形成一个等效于下半层蓝磷的相对稳定的过渡结构；随着覆盖度的进一步增加，上半层的蓝磷也开始形成，最终形成稳定的蓝磷单层。

值得指出的是，这一“半层-半层”的新颖生长机理，从本质上有异于该团队以前所发现的占主导地位的单层石墨烯外延生长机理，有效地扩展了人们对不同范德瓦尔斯体系非平衡生长现象的认知。此外，在此工作审稿期间，已有实验在Au（111）衬底上生长出接近完整的单层蓝磷。而在半导体GaN（001）衬底上生长出蓝磷或蓝磷单层，由于可以直接用于器件探讨，有其更诱人的基础与应用前景。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/104368.html>