

金属所等在层状氧化物准一维导电特性的形成机理研究中获进展

近日，中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家（联合）实验室固体原子像研究部研究员陈春林、马秀良，IBM苏伊士实验室教授、诺贝尔物理学奖获得者Johannes Georg Bednorz，以及日本东京大学教授Yuichi Ikuhara等合作，在原子尺度上建立了准一维导电材料Sr

$\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$

的导电特性与其原子电子结构之间的相互关系，揭示了其准一维导电特性的形成机理。在此基础上，提出了通过往三维导体中插入绝缘层来制备二维导电材料的研究思路。

$\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ (i.e.

SrNbO_x

)是具有层状钙钛矿结构的一类氧化物，可通过往 SrNbO_3 中引入过剩的氧而获得。该类氧化物的结构和性能均对其氧含量和分布非常敏感，氧含量的多少决定了其层状结构的片层厚度与导电特性。早在20多年

前，Bednorz领导的研究团队已认识到 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$

的准一维导电特性（沿a轴方向的电导率远远大于其它晶体学取向），并对其形成机制进行了初步探讨。然而，长期以来在原子尺度上揭示其准一维导电特性的起源仍是具有挑战性的问题。

陈春林等利用扫

描透射电子显微术与第一性原理理论

计算相结合的方法，系统地研究了 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ （包括 $\text{SrNbO}_{3.4}$ 、 $\text{SrNbO}_{3.45}$ 及 $\text{SrNbO}_{3.5}$

等化合物）的电学性质与其Nb离子价态及 NbO_6

八面体形态之间的关系。电子能量损失谱的研究

结果表明， $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ 的导电性取决于Nb离子的价态：材料中含 Nb^{4+}

离子的区域导电性能良好，而含 Nb^{5+}

离子的区域不导电。过剩的氧聚集于 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$

中片层间过渡的区域（文中的锯齿状区域），形成了一层绝缘层，从而使其导电特性呈现二维导电的特征。第一性原理计算的结果进一步表明，Nb离子的价态与其 NbO_6

八面体的形态直接关联： Nb^{4+} 离子总是位于 NbO_6

八面体的中心位置，而 Nb^{5+} 离子总是远远地

偏离该中心位置。 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ 中材料局部区域的电学性质由其 NbO_6

八面体的形态决定。该研究揭示了 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$

中准一维导电特性的形成根源，并为设计和研发新型准一维导电材料提供了思路。目前，针对新型准一维导电材料的合作研发正在进行当中。

研究工作得到了中科院前沿科学重点研究项目和国家青年千人计划等的资助。相关成果在线发表在ACS Nano上。

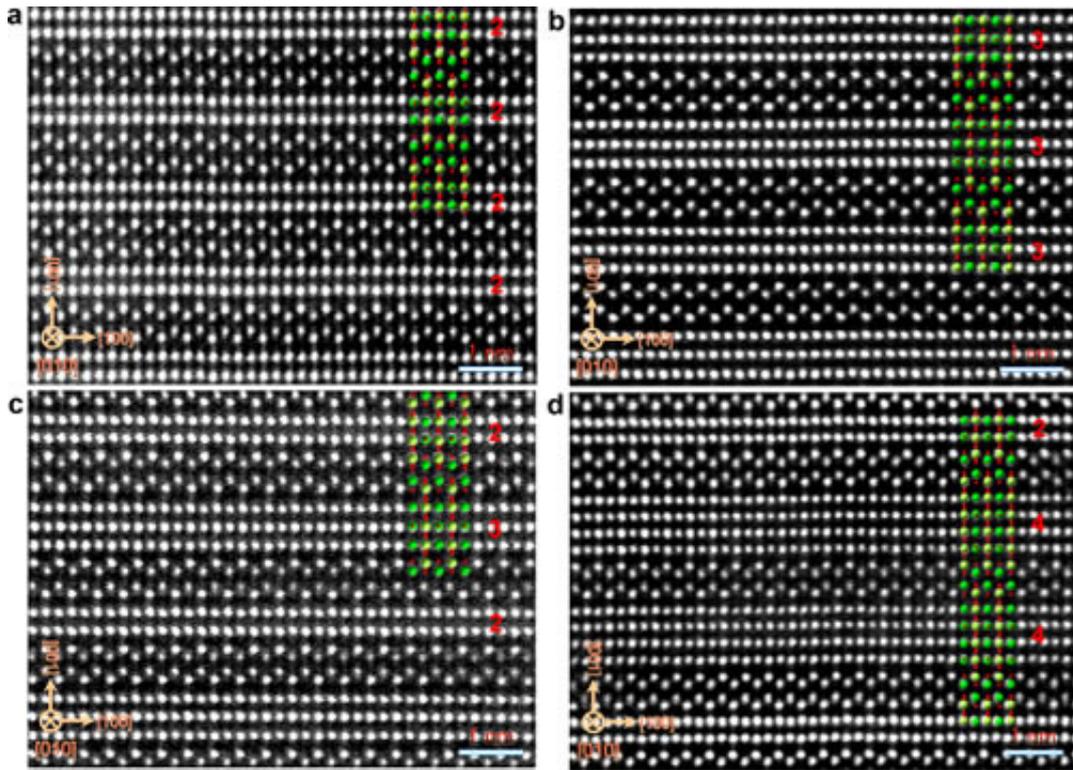


图1、 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ 化合物沿[010]晶带轴的HAADF像。所有化合物均由交替排列的链条状区域和锯齿状区域构成。(a)2-2-2-2型结构，对应于 $n=4$ (i.e. $\text{SrNbO}_{3.5}$)；(b)3-3-3-3型结构，对应于 $n=5$ (i.e. $\text{SrNbO}_{3.4}$)；(c)2-3-2-3型结构，对应于 $n=4.5$ (i.e. $\text{SrNbO}_{3.45}$)；(d)2-4-4-2型结构，对应于 $n=4, 6, 6, 4$ (i.e. $\text{SrNbO}_{3.4}$)。

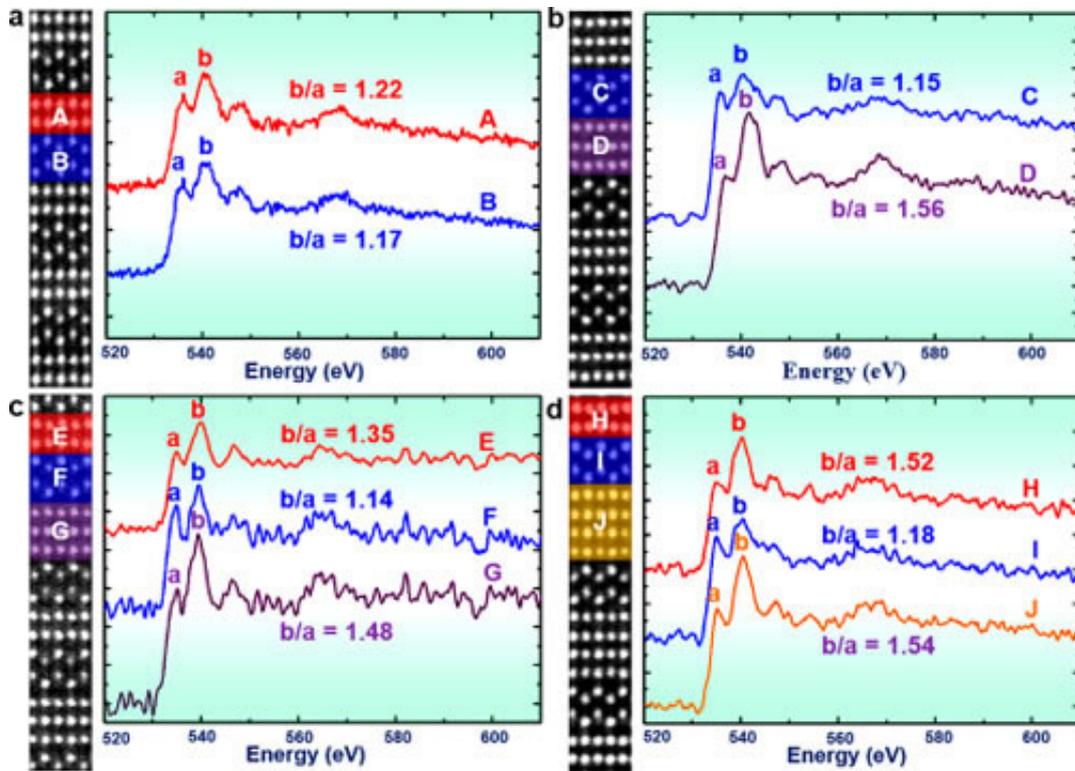


图2、 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ 化合物中具有代表性区域的EELS谱。(a)2-2-2-2型结构；(b)3-3-3-3型结构；(c)2-3-2-3型结构；(d)2-4-4-2型结构。O-K边中b峰与a峰的比值 b/a 反映了该区域内Nb离子的价态。 b/a 值较大时，Nb为+4价，反之则为+5价。EELS的结果表明3-3-3-3型结构、2-3-2-3型结构与2-4-4-2型结构为二维导体，2-2-2-2型结构为绝缘体。

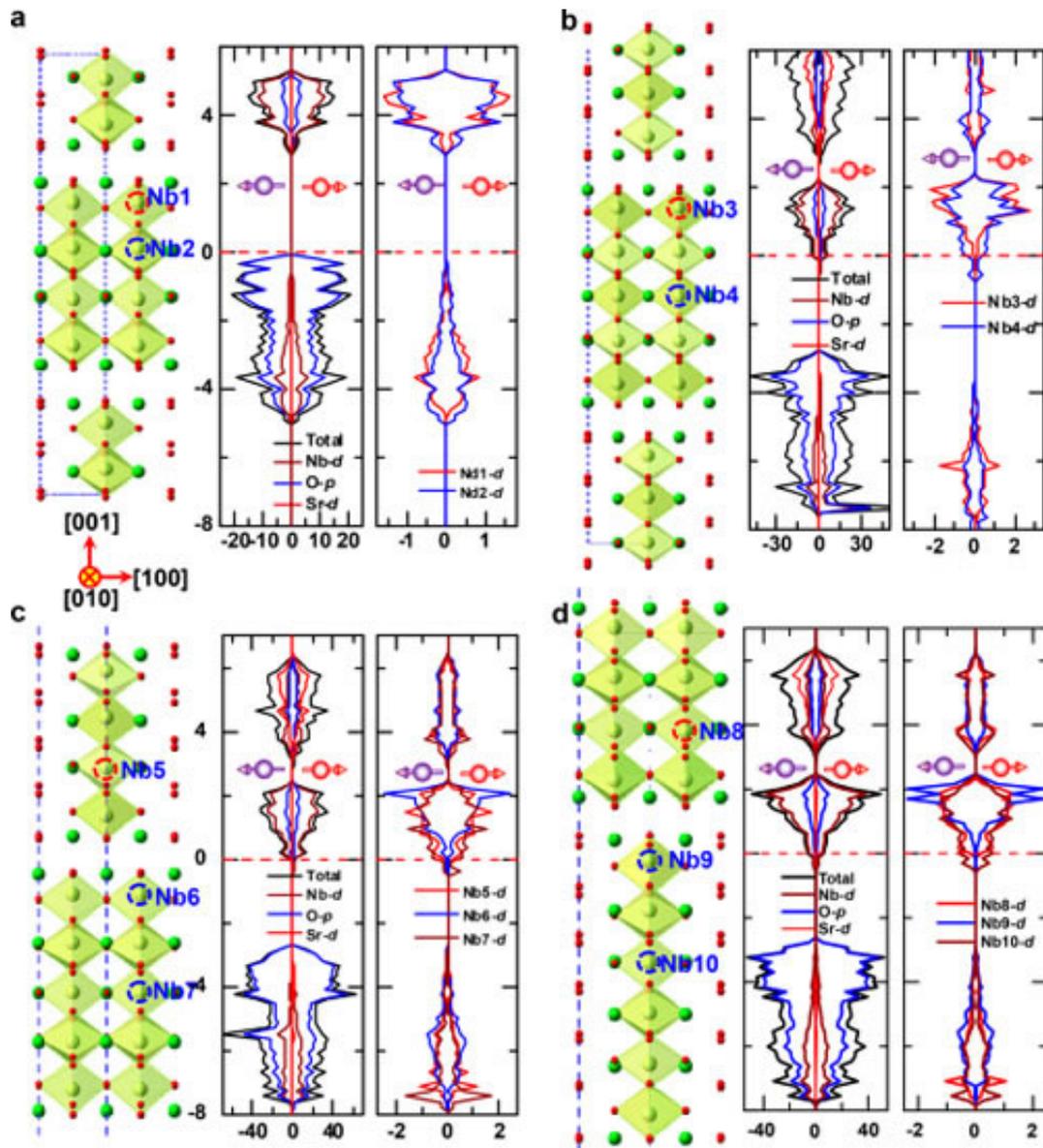


图3、 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ 化合物的优化结构模型、TDOS及Nb-4dDOS。(a)2-2-2型结构；(b)3-3-3型结构；(c)2-3-2型结构；(d)2-4-4-2型结构。DOS的结果表明3-3-3-3型结构、2-3-2-3型结构与2-4-4-2型结构为二维导体，2-2-2-2型结构为绝缘体。

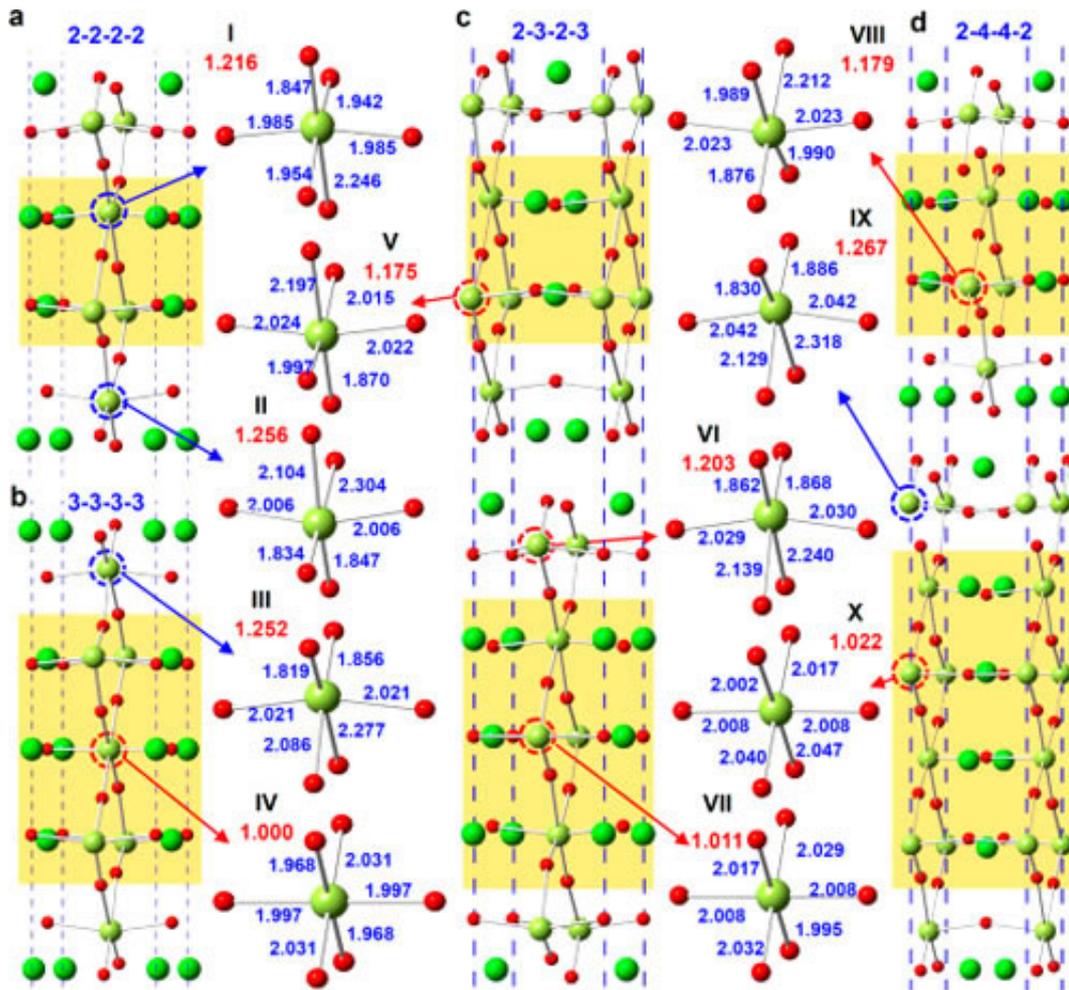


图4、 $\text{Sr}_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ 化合物中具有代表性的 NbO_6 八面体的形态。(a)2-2-2-2型结构；(b)3-3-3-3型结构；(c)2-3-2-3型结构；(d)2-4-4-2型结构。黄色背景表示链条状区域。锯齿状区域内的Nb-O键的键长比更大，表明Nb离子偏离了氧八面体的中心位置。

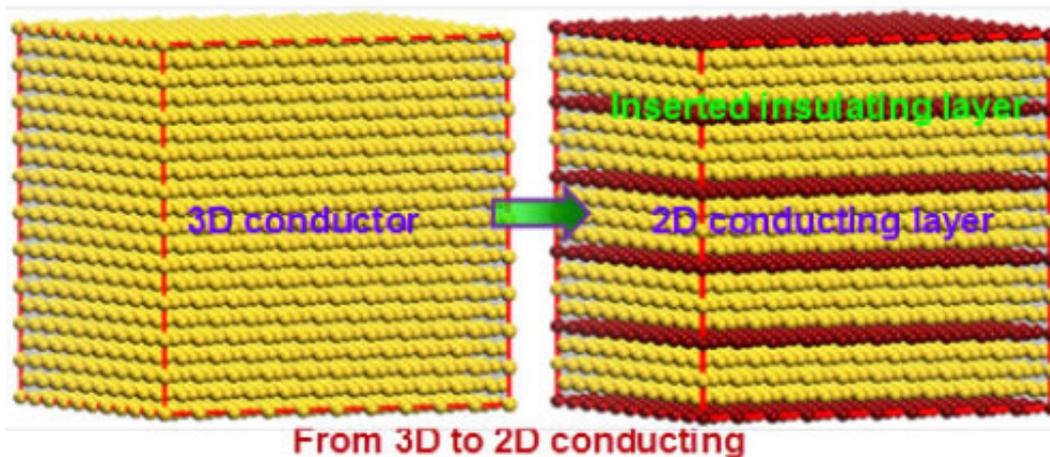


图5、制备二维导电材料的示意图：往三维导体中引入绝缘层，使其由三维导电转变为二维导电。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/117941.html>