合肥研究院稳定高压合成金刚石烯研究获进展

近日，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所计算物理与量子材料研究部王贤龙课题组在稳定高压合成金刚石烯研究中取得新进展。研究表明，B和N掺杂可调控其电子结构性质（半导体、金属、超导），可降低形成能，增强金刚石烯在常温常压下的稳定性。相关研究成果发表在Physical Review B上。

金刚石烯是由双层石墨烯层间形成sp3键构成的二维单层金刚石，兼具石墨烯和金刚石的特性，有望发展成为与石墨烯并列的一类新型二维碳材料，用于电子器件的超薄保护涂层，在纳米光电器件方面具有潜在的应用价值。目前，实验上通过在高压下压缩双层石墨烯合成的金刚石烯，在撤压后均转变回石墨烯，较难在常温常压下稳定存在。

科研人员基于第一性原理方法探究了立方和六方金刚石烯不同掺杂形式的结构和性质。结果发现，掺杂能够降低金刚石烯的形成能，促进金刚石烯的合成并提升其在常温常压环境下的稳定性。基于此，研究人员提出通过压缩一层掺杂B原子另一层掺杂N原子的双层石墨烯获得的金刚石烯最稳定。通过压缩N掺杂双层石墨烯来合成金刚石烯在实验上最易实现，这是由于此时的形成能不依赖掺杂原子的分布形式。此外，掺杂原子在不同的替代位会呈现出不同的电子结构（半导体、金属、超导～4
K），可应用于二维电子器件领域。该工作为合成更稳定、功能更强的金刚石烯提供了新途径。

研究工作得到国家自然科学基金的支持。本工作的所有计算在中科院超算中心合肥分中心完成。

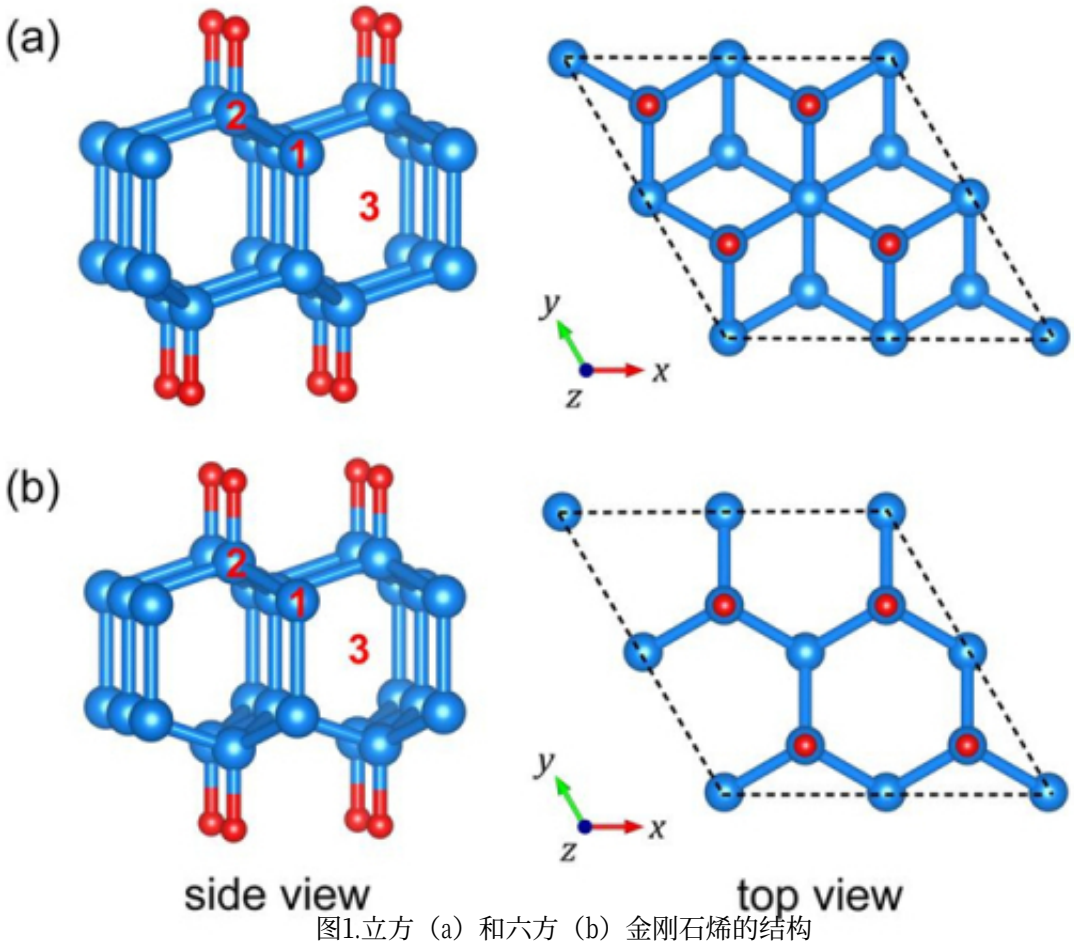

图1.立方（a）和六方（b）金刚石烯的结构

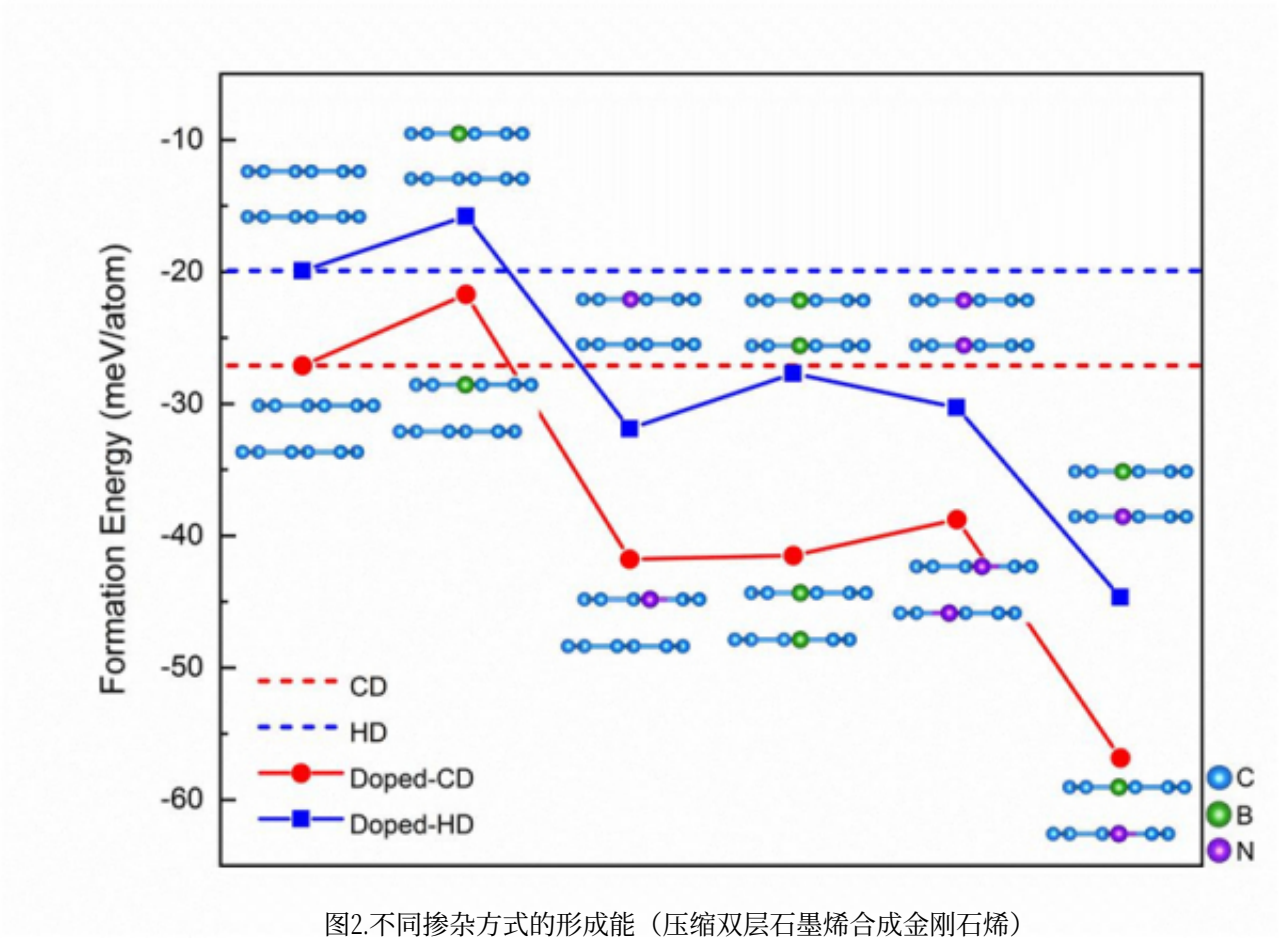

图2.不同掺杂方式的形成能（压缩双层石墨烯合成金刚石烯）

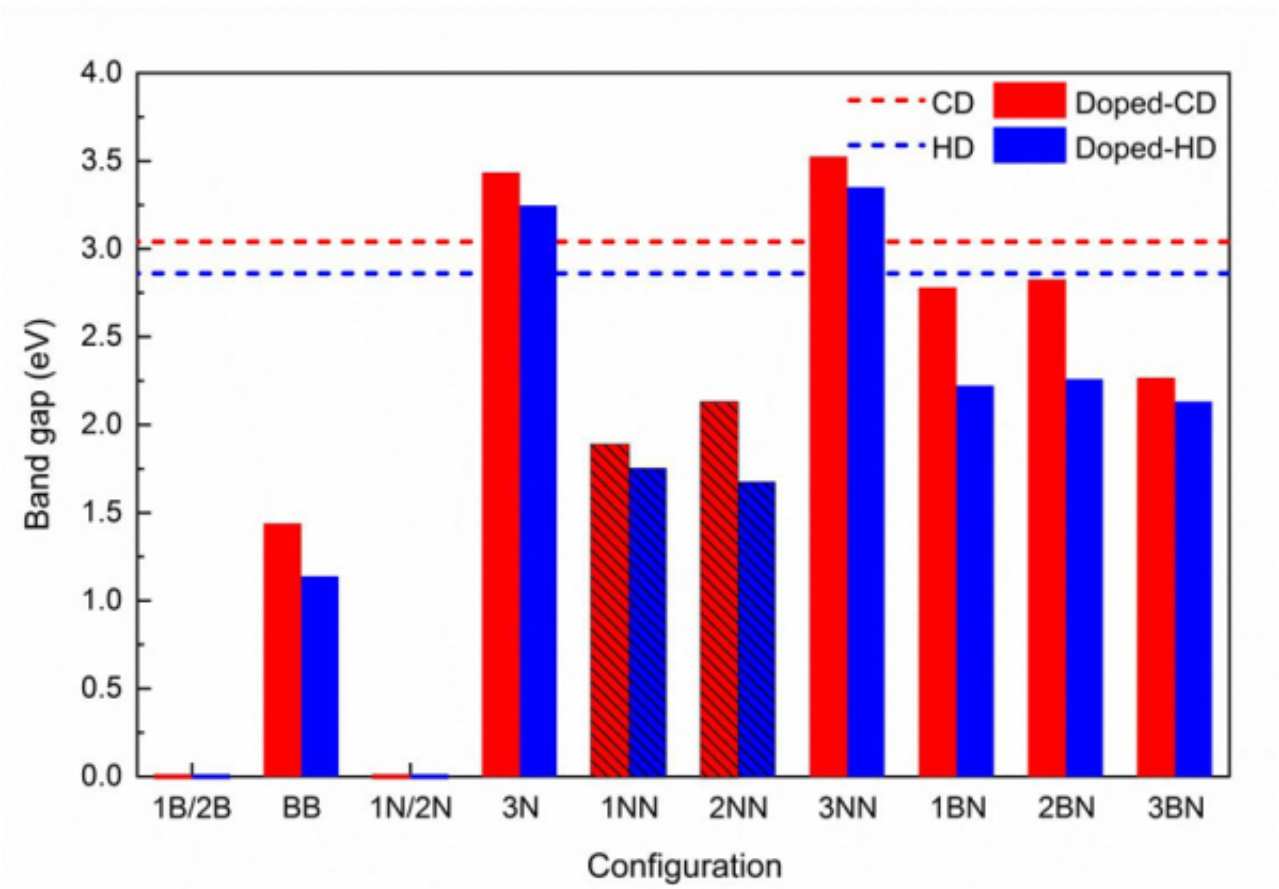

图3.不同掺杂构型的带隙。单色的柱状表示直接带隙，有斜线的柱状表示间接带隙；红色虚线和蓝色虚线分别表示纯的立方金刚石烯和六方金刚石烯的带隙

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/183528.html