

科学家提出倾斜台阶面外延生长菱方氮化硼单晶方法

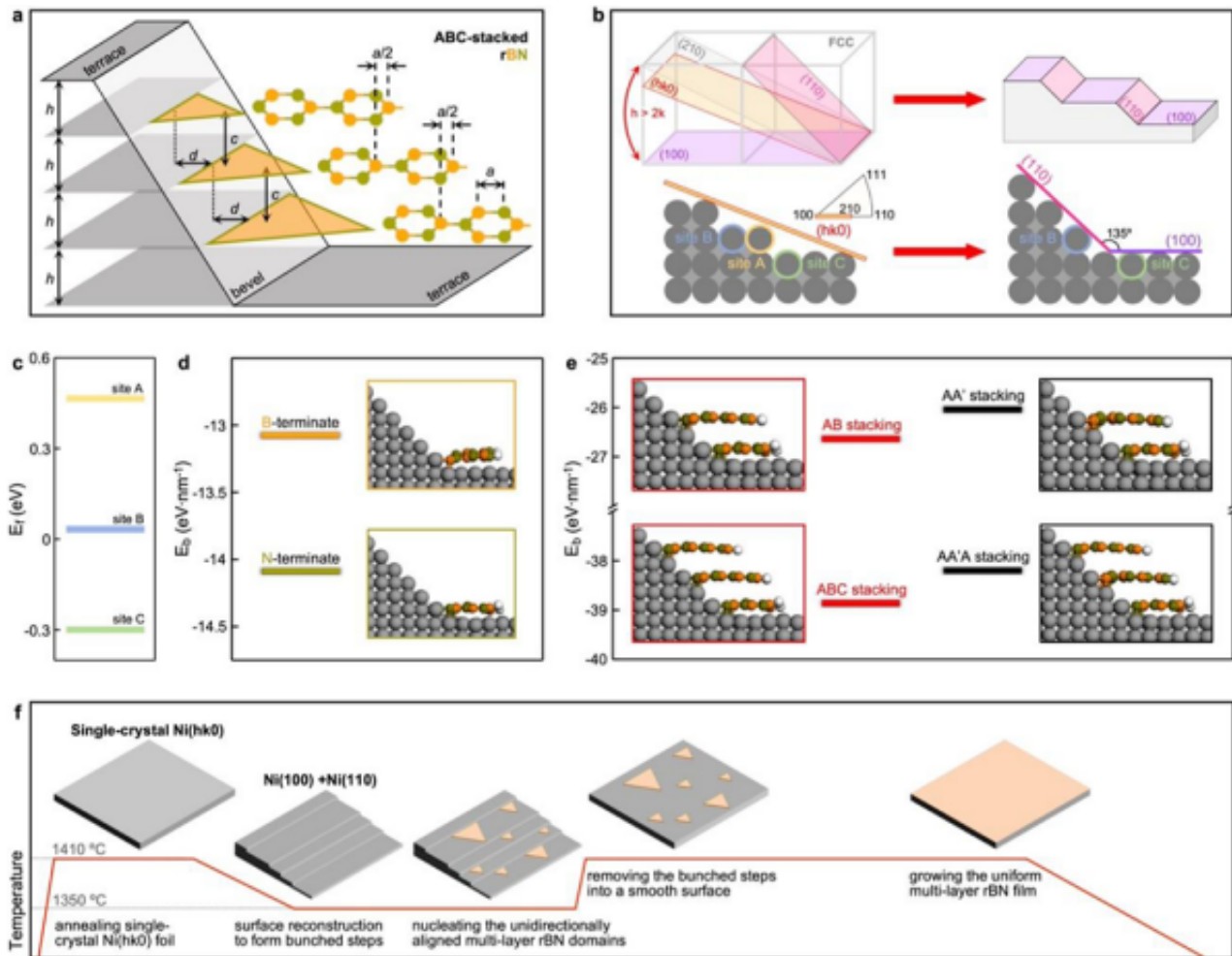
常见的六方相氮化硼（hBN）因化学稳定、导热性能好以及表面无悬挂键原子级平整等特点，被视为理想的宽带隙二维介质材料。菱方相氮化硼（rBN）可以保持hBN较多优异性质，并具有非中心对称的ABC堆垛结构，因而具备本征的滑移铁电性和非线性光学性质。rBN是极具应用潜力的功能材料，可以为变革性技术应用如存算一体器件和深紫外光源等提供新材料和解决方案。然而，相较于常见的hBN晶体，rBN晶体属于亚稳相，因而制备多层rBN单晶充满挑战。制备困难在于快速生长的首层hBN薄膜对衬底催化产生屏蔽效应，阻碍后续层数的持续生长，同时，界面间B和N原子的范德华作用导致具有AA' A堆垛的hBN晶体在成核过程中具有能量优势。因此，人工制造大尺寸rBN晶体是尚未解决的难题。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心研究员白雪冬团队与北京大学的科研人员等合作，在氮化硼单晶制备方面取得进展。2019年，该团队开发了利用表面对称性破缺衬底外延非中心对称型二维单晶的方法，实现了大面积单层hBN单晶薄膜制备。近日，该团队进一步提出基于表面对称性破缺衬底面内、面外协同调控的创新机制，即通过在单晶金属镍表面构建由（100）晶面和（110）晶面组成斜面高台阶，在化学气相沉积的形核阶段匹配并逐层锁定rBN晶格的面内晶格取向和面外滑移矢量，进而在大面积范围内诱导形成同向rBN晶畴。扫描透射电子显微镜观测表明，取向一致的rBN晶畴通过逐层无缝拼接，形成具有精准ABC原子堆垛的晶体结构，制备出rBN单晶，面积可达4×4平方厘米。

该研究通过理论计算发现，rBN非中心对称堆垛会导致其层间电极化矢量在面外方向积累，展现铁电性。研究利用压电力扫描探针，测量验证了rBN具有高居里温度铁电性，并实现了铁电畴区反复的擦、写操作。透射电镜原位观测结果进一步确认了rBN的极化翻转源自层间滑移。

该工作提出了倾斜台阶面制备多层菱方氮化硼单晶的新方法，创新了表面外延生长模式，通过精准排列三维空间原子，人工制造新型晶体，并将以往的氮化硼绝缘介质赋予铁电存储功能，为制造存算一体器件提供了新的材料策略。

5月1日，相关研究成果以Bevel-edge epitaxy of ferroelectric rhombohedral boron nitride single crystal为题，在线发表在《自然》（Nature）上，并申请国际PCT专利和中国发明专利。该工作由物理所、北京大学、西湖大学、中国科学院深圳先进技术研究院合作完成。研究工作得到国家自然科学基金委员会、科学技术部、中国科学院和广东省的支持。



斜面台阶外延生长多层菱方氮化硼单晶的原理和制备流程

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/210322.html>