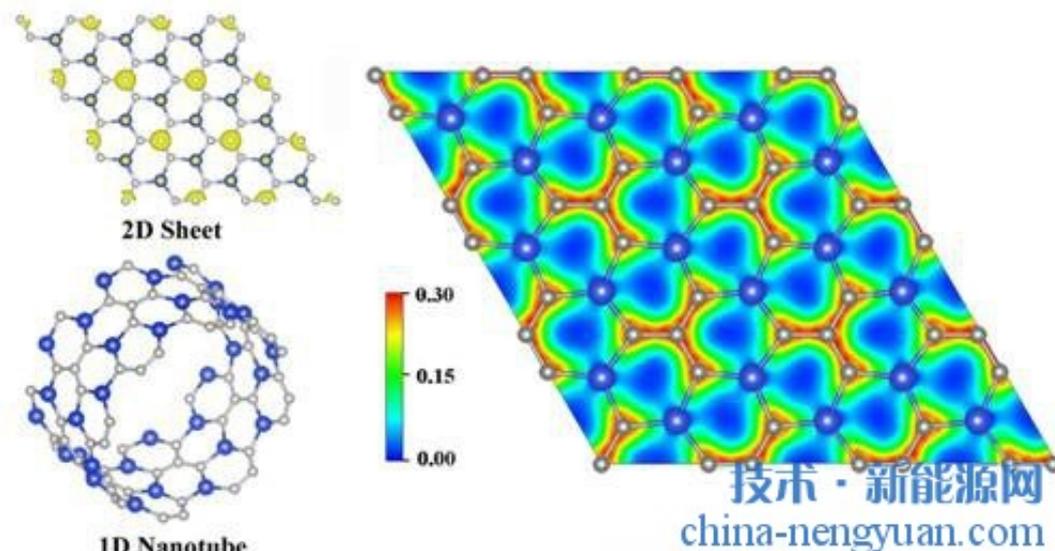


福建物构所硅碳石墨烯理论研究获进展



石墨烯是一种由碳原子构成的单原子厚度二维薄膜新材料。由于其导热系数高、电阻率极低、电子迁移速度极快，因此被期待用来发展新一代电子元件或晶体管，用来制造透明触控屏幕、光板等。

但是由于其半金属特性（能隙为0 eV），并不适合做热电材料和太阳能电池材料。为此，人们希望通过结构调控和掺杂手段，增大石墨烯的能隙，从而拓展它们在光电器件中的应用。尽管碳基、硅基二维纳米材料是当前的研究热点，但具有适中能隙（1 – 2eV），且能隙不依赖于手性或尺寸的材料尚未见报道。

中科院福建物质结构研究所结构化学国家重点实验室吴立明研究员课题组在国家自然科学基金重点和面上项目支持下，通过全局粒子群的优化搜索算法与第一性原理方法相结合的手段，成功地预测了能隙为1.09 eV的二维平面SiC₂硅碳石墨烯 (g-SiC₂)材料。

该材料由sp²杂化的C原子和Si原子构成，结合能为0.41eV/atom，处于势能面上的全局最低点，比已知的同分异构体pt-SiC₂(由4配位sp³杂化的Si原子形成)从能量上来得更加稳定，因此其单独存在的可能性更大。此外理论预测其熔点位于3000到3500K之间，其衍生纳米管的能隙（~1.09eV）不随手性、尺寸等变化，这些表明该材料具有很好的应用潜力，相关研究成果发表在国际杂志《纳米快报》(Nano letters)上，该项工作为二维碳基纳米材料的结构改性设计、能带调控提供了重要的理论参考。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/53438.html>