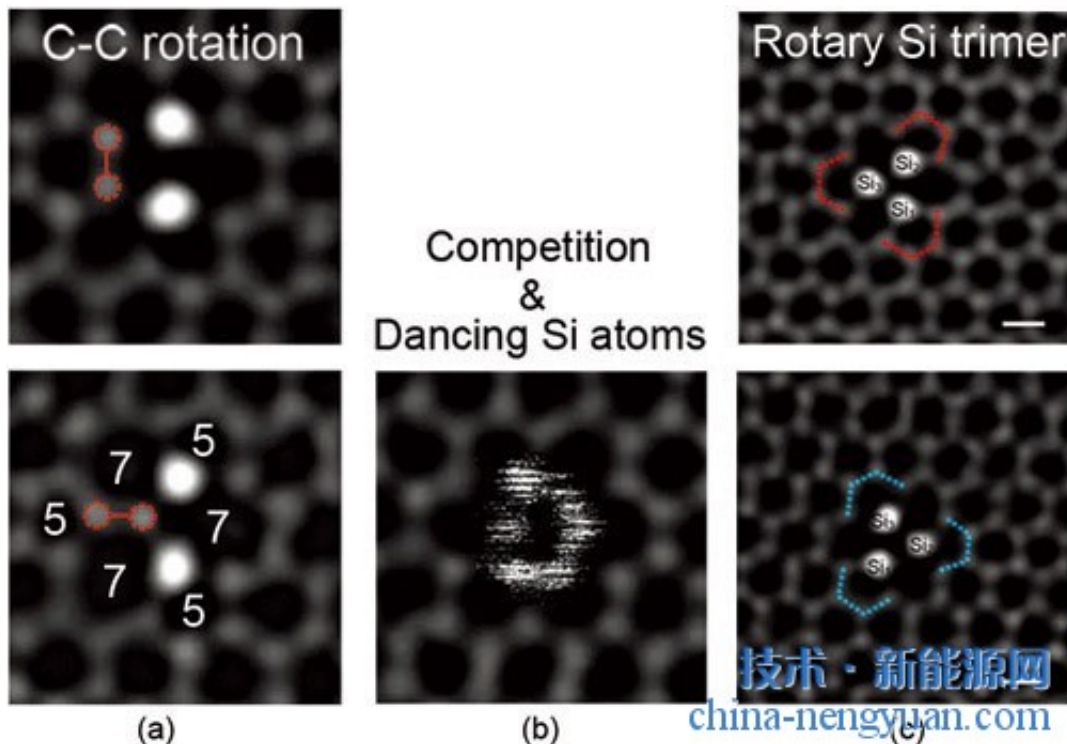


单原子分辨原位研究石墨烯掺杂动态过程取得进展



最近，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杨志卿副研究员、先进炭材料研究部伊利长副研究员等与美国橡树岭国家实验室研究人员合作，首先利用像差校正Z衬度电子显微学成像观察到了石墨烯拓扑缺陷结构的动态演变、以及单个Si原子与拓扑缺陷的动态交互并最终掺杂到石墨烯的微观过程，然后采用第一性原理计算揭示了这一原子结构演化的微观机理。

直接观察并理解单个原子及其与周围介质材料动态交互行为有助于人们认识物质结构的微观演变并预测新结构的形成，对于纳米科学技术的发展具有重要意义。

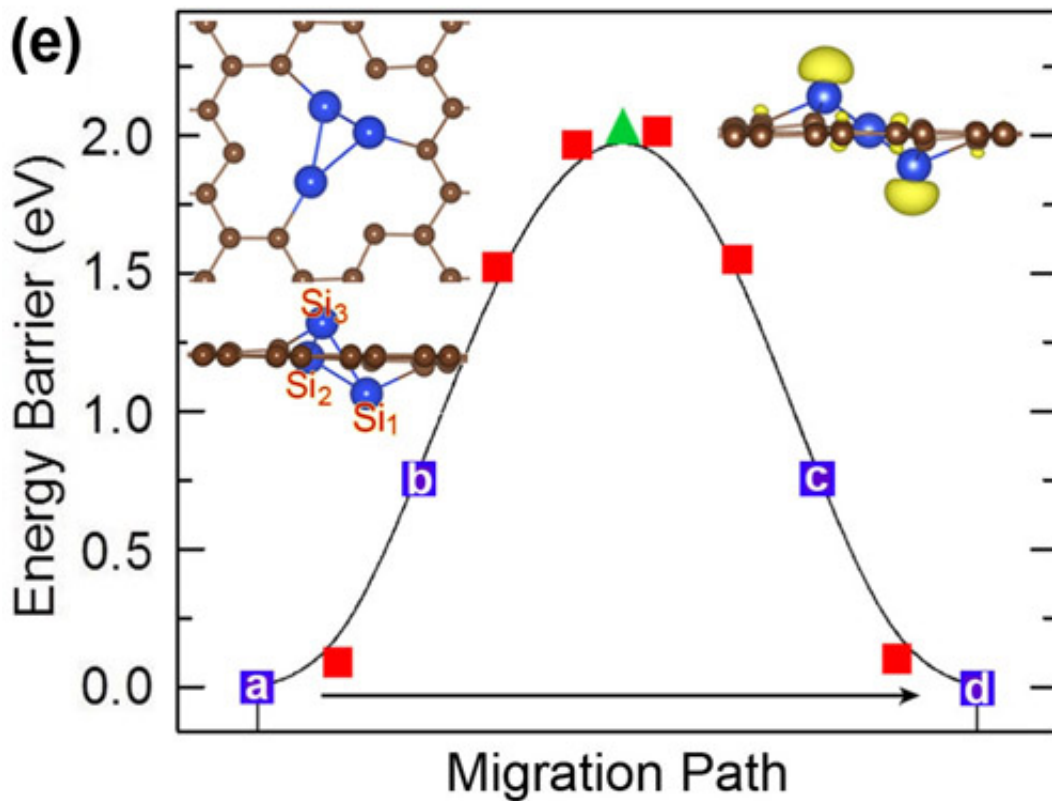
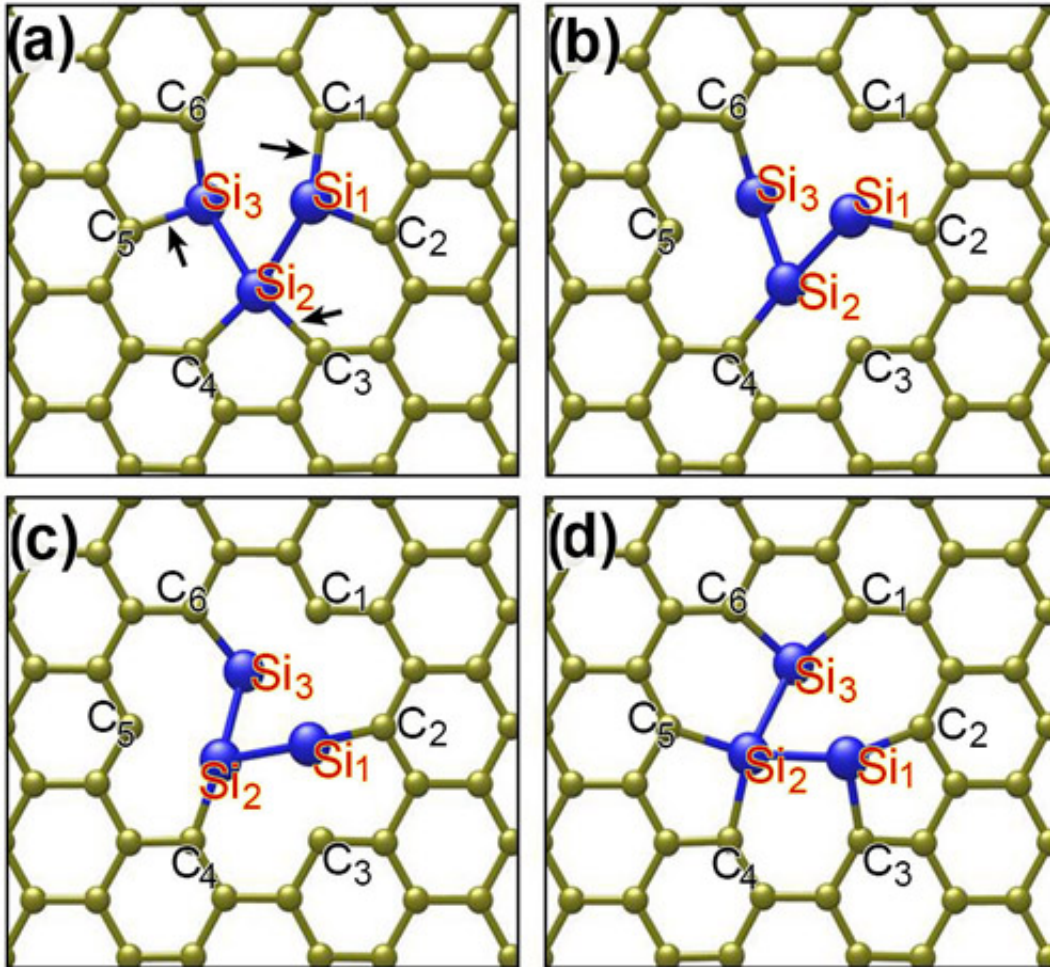
研究人员发现石墨烯原子平面上的555-777拓扑缺陷具有较高的活性，可以将近邻的游离Si原子吸引过来。Z衬度成像观察到在已有两个Si置换原子的555-777拓扑缺陷处，与Si-Si相邻的一对C-C原子仍然很活跃，不断发生90° C-C键旋转。

当第三个游离的Si原子被吸引到该拓扑缺陷时，它与活跃的C-C原子对展开了激烈的占位竞争，并最终取代C-C原子对，形成由三个Si原子组成的三聚体团簇。

在电子束作用下，Si三聚体团簇开始旋转。理论计算其转动能垒约为2.0 eV，转动频率可达1012 Hz。实验观察还表明，旋转的Si原子团簇及支撑它的石墨烯非常稳定，电子束难以再击飞缺陷位处的任何一个Si原子和C原子。

这一结果不同于以前报道的石墨烯纳米孔易失稳，继而发生扩大或愈合，说明Si修饰可能是稳定石墨烯纳米孔的有效途径之一。理论计算表明Si修饰稳定石墨烯纳米孔的机理是：Si原子与石墨烯纳米孔的边缘悬键C的键合倾向于采用sp³杂化的四面体配位键合方式，有效排斥游离C原子进入石墨烯平面，从而可以很好地稳定石墨烯纳米孔结构。稳定的石墨烯纳米孔在高分辨率DNA测序、化学分离等方面具有潜在的应用价值。

该研究得到了国家自然科学基金委和国家“973”项目的资助。



原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/66728.html>