



首页 所况简介 机构设置 研究成果 人才队伍 研究生教育 党群园地 科学传播 学术期刊 信息公开

新闻动态

当前位置: 首页 > 新闻动态 > 科研动态

所内新闻

科研动态

综合新闻

通知公告

媒体扫描

物理所公开课

中国科学院物理研究所
北京凝聚态物理国家研究中心

N04组供稿

第68期

2019年10月14日

新型二维原子晶体材料单层二硒化钒的“一维图案化”及其功能化

二维原子晶体材料的功能化对实现其在光电、催化、新能源以及生物医学等领域中的应用具有重要意义。在实现二维材料功能化方面,结构图案化调控是其中一个重要手段。之前,人们利用电子/离子束刻蚀、元素掺杂等手段实现了二维材料的图案化。图案化的二维材料则呈现出了许多新的物理性质,例如“纳米网状”石墨烯的半导体特性[Nat. Nanotechnol. 5, 190 (2010)]、“纳米图案化”的二硫化钼的荧光特性[Adv. Funct. Mater. 27, 1703688 (2017)]、“自然图案化”的二硒化钒与二硒化铜的分子选择性吸附特性[Nat. Mater. 16, 717 (2017)],等等。在诸多二维材料中,过渡金属二硫族化合物(TMDCs)具有独特的“三明治”结构,使其在图案化方面具有突出的优势。根据其上下两层硫族原子排列方式的不同,可以产生H, T, T', Td相等多种结构。同时,由于表层硫族原子易于脱离的特性,可以通过加热退火等多种手段诱导出缺陷,为调控过渡金属二硫族化合物的结构并进一步实现其图案化提供了可行方法。

二硒化钒(VSe₂)作为过渡金属二硫族化合物中的一员,其单层被预言具有二维磁性、高导电性、电催化等诸多独特性质,是备受关注的一种新型二维材料。对这种材料的图案化与功能化无疑能进一步丰富其物理特性,从而拓展其应用前景。因此,如何实现这种单层材料的图案化与功能化就成为了下一步亟需解决的科学问题。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心高鸿钧院士带领的研究团队多年来一直致力于新型二维晶体材料制备的探索、物性与应用基础研究,取得了一些国际引领性的研究成果。近期,该课题组博士生刘中流(实验)、雷宝(理论计算)等人成功实现了单层二硒化钒(VSe₂)的一维图案化和对铂(Pt)原子的分散吸附,结合密度泛函(DFT)模拟计算研究了其结构及催化特性。

他们发现,在高定向热解石墨(HOPG)表面上生长的单层VSe₂经过退火处理后可以形成单层一维图案化的(1D-patterned) VSe₂,并且这种单层一维图案化的VSe₂可以通过加热同时沉积硒的方式恢复为原来的单层VSe₂,转变过程是可逆可控的。他们通过扫描隧道显微镜(STM)对生长的单层一维图案化的VSe₂精细原子排布结构进行了研究,发现相比于原本0.33 nm六方晶格周期的单层VSe₂,一维图案化的VSe₂具有取向一致、周期性均匀排列的一维条纹图案,其条纹间距约为0.97 nm(图1)。结合原子力显微镜(AFM)测量,他们提出了该种单层一维图案化VSe₂的结构模型,通过计算模拟证实,该模型与实验完全符合(图2)。进一步的实验观测结果表明:单层VSe₂向单层一维图案化VSe₂的转变过程是一个硒原子缺陷逐渐增加的过程。硒原子缺陷首先排列成线,然后随着线的数量增加形成取向相同的畴,最终形成均匀排列的周期性一维条纹。相反地,通过加热同时沉积硒可以使得硒原子缺陷得到弥补,从而恢复为单层VSe₂(图3)。在研究了单层一维图案化VSe₂的结构及形成机理之后,他们进一步沉积Pt原子实现了该种材料的功能化。实验结果表明:沉积的Pt原子在单层一维图案化的VSe₂表面形成了分散结构,其中半数以上为单原子分散的Pt原子。DFT计算模拟表明,这些分散吸附的Pt原子在产氢反应(HER)中具有与Pt单晶接近的催化特性,可以极大地节约贵金属Pt的用量(图4)。

综上,该项工作提供了一种调控二维材料维度、结构和物性的方法,丰富了二硒化钒作为一种新型二维材料的应用潜力,并且实现了铂原子在该一维图案化的二硒化钒上的分散吸附。这一研究结果在清洁能源、新型催化材料等领域具有潜在的应用前景。相关工作以封面文章发表在Nano Lett. 19, 4897-4903 (2019)上。刘中流和雷宝为共同第一作者,王业亮、杜世萱和高鸿钧为共同联系作者。

该项工作获得了国家自然科学基金委(61725107, 51572290, 61888102, 51872284)、科技部(2016YFA0202300)和中国科学院(XDB30000000, XDB28000000)的支持。

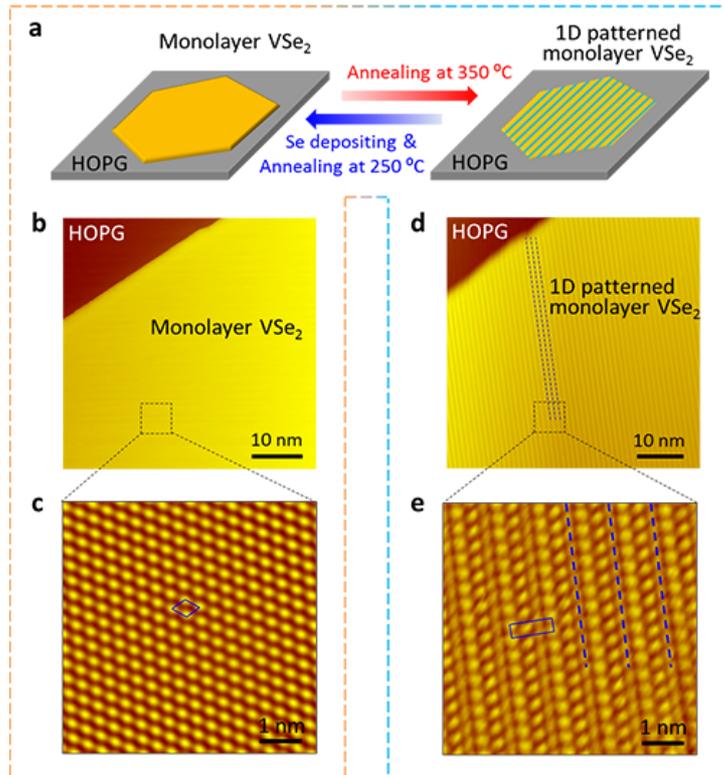


图1: 单层二硒化钒 (VSe_2) 与一维图案化 (1D patterned) 单层二硒化钒间的可逆结构转变。高定向热解石墨 (HOPG) 表面单层的 VSe_2 与一维图案化 VSe_2 间可逆结构转变的过程示意图 (a), 二者的大范围扫描隧道显微镜 (STM) 图像 (b, d) 及对应原子分辨STM图 (c, e)。

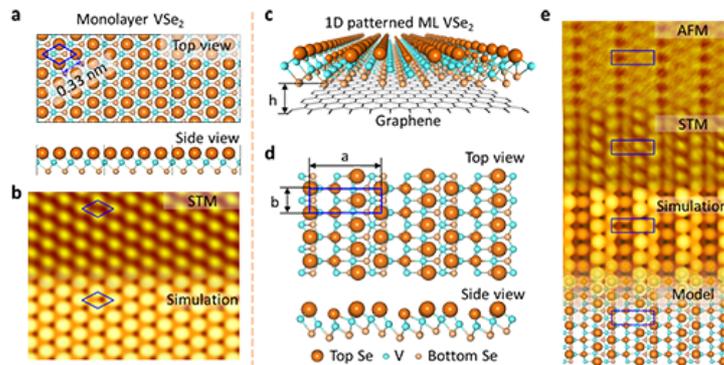


图2: 单层的 VSe_2 与一维图案化 VSe_2 的计算结构模型和测量结果。(a) 单层 VSe_2 的结构模型。(b) 单层 VSe_2 的 STM 原子分辨图与 STM 模拟图。(c, d) 单层一维图案化 VSe_2 的结构模型, 其中 $a=0.99$ nm, $b=0.34$ nm, $h=0.33$ nm。(e) 单层一维图案化 VSe_2 的原子力显微镜 (AFM) 及 STM 原子分辨图与 STM 模拟图及结构模型。

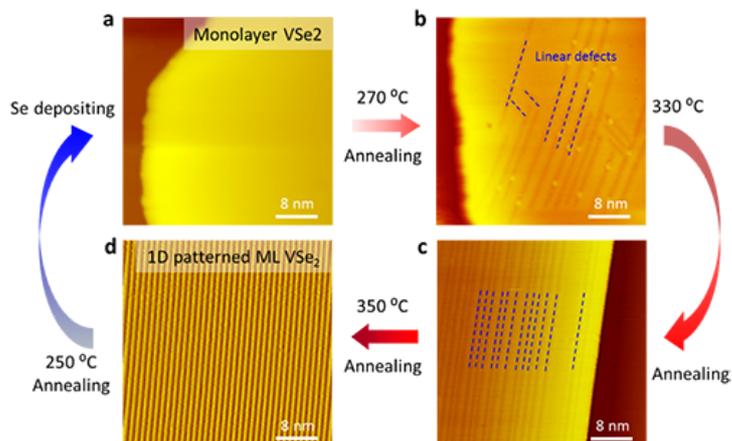


图3: 单层的 VSe_2 与一维图案化 VSe_2 结构可逆转变的具体过程。(a) HOPG 上单层 VSe_2 的 STM 图像。(b) 图经过 270 °C 退火后的样品 STM 图像, 样品表面开始出现线缺陷。(c) 图经过 330 °C 退火后的样品 STM 图像, 线缺陷数量增

加并开始形成同一取向的畴。(d) 图经过350°C退火后的样品STM图像, VSe_2 已经完全转变为一维图案化 VSe_2 。该样品经过250°C加热同时沉积硒可以恢复成为原来的单层的 VSe_2 。

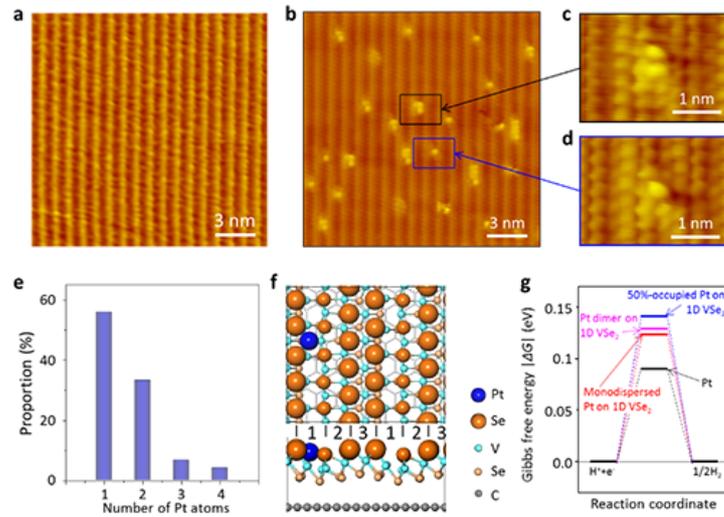


图4: 铂 (Pt) 原子在单层一维图案化 VSe_2 表面的分散吸附及其催化计算。(a) 干净的单层一维图案化 VSe_2 样品的STM图像。(b) 沉积Pt原子后的单层一维图案化 VSe_2 样品的STM图像。(c, d) Pt的二聚体及单原子的STM放大图像。(e) 单层一维图案化 VSe_2 样品表面吸附的Pt多聚体按所含原子数的分布统计。(f) Pt单原子吸附在单层一维图案化 VSe_2 的结构模拟图。(g) 计算得到的Pt原子不同吸附形态对产氢反应 (HER) 的自由能的影响与Pt单晶比较。

>> 附件列表:

[下载附件>> acs.nanolett.9b00889.pdf](#)

电子所刊

公开课

微信

联系我们

友情链接

所长信箱

违纪违法举报

