

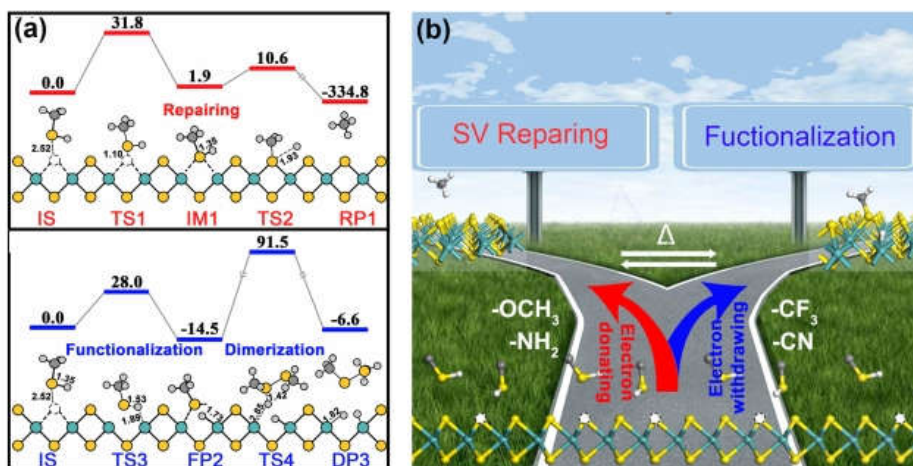


当前位置： 首页 东大要闻

东南大学物理学院王金兰教授课题组在二维材料研究中取得重要进展

发布时间: 2017-08-28

访问次数: 503



近日，东南大学物理学院王金兰教授课题组在化学类顶级刊物Angewandte Chemie International Edition (影响因子11.99)上发表了一篇题为“Towards a comprehensive understanding of the reaction mechanisms between defective MoS₂ and thiol molecules”（二硫化钼表面空位缺陷与硫醇分子的反应机制）的论文。这一工作深入揭示了硫醇分子与二硫化钼(MoS₂)表面空位缺陷的两种竞争反应机制，成功阐释了众多实验现象和争议。

MoS₂是继石墨烯后国际上广泛关注的一种层状半导体材料，理论预测在10nm沟道以下，其晶体管性能可以超过硅基器件，因此MoS₂有望成为新一代继续延伸摩尔定律的新材料，是当前国际研发热点。然而，MoS₂在制备过程中不可避免地会引入大量的空位缺陷，这些缺陷对MoS₂光电子性质往往会带来负面影响。目前实验上广泛采用硫醇分子(thiol molecules)来修复MoS₂中的空位缺陷，但对应的反应机理尚不清楚并存在较大争议：一种认为硫醇分子填补了空缺，导致MoS₂的迁移率与光吸收性能的大幅提升；一种认为硫醇分子对MoS₂表面进行了修饰，从而实现MoS₂的表面功能化。

针对这些争议，王金兰教授课题组基于原子尺度的理论计算，发现MoS₂中的缺陷可催化硫醇分子中S-H键的断裂，并存在两种竞争反应机制：一种趋向于S-C键的进一步断裂进而起到修补缺陷的作用；另外一种则形成Mo-S键进而对MoS₂进行表面修饰(图a所示)。王金兰教授课题组进一步发现，通过硫醇分子中官能团的修饰(如吸电子基团与给电子基团)以及温度的控制可以实现两种竞争反应的有效调控(图b所示)。这一研究首次阐明了通过有机分子表面修饰能否调控二维材料性质，并可推广到其他过渡族硫化物，为二维材料物性调节与表面功能化提供了可靠的理论依据。

以上工作受到国家杰出青年基金、国家重点研发计划、国家自然科学基金以及江苏省333高层次人才培养工程等项目资助。该工作的第一作者是东南大学物理学院博士后李强，王金兰教授为通讯作者。(李强)

论文链接为:

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.201706038/abstract>

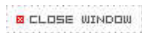
东南大学新浪微博

微博

东南大学的微博好像出了点小问题，发条微博提醒一下Ta吧！

好像没发现TA的粉丝，等会儿再看吧！

(责任编辑：李震 审核：毛惠西)

 CLOSE WINDOW