



科技进展

上海微系统所在六方氮化硼合成新机制研究取得新进展

文章来源：二室 | 发布时间：2020-10-10

近日，中国科学院上海微系统与信息技术研究所（以下简称“上海微系统所”）吴天如研究团队和华东师范大学袁清红研究团队基于原位合成、表征研究与第一性原理计算方法，首次提出了铁硼（ Fe_2B ）合金表面高质量多层六方氮化硼（ $h-BN$ ）原子空位辅助生长新机制。相关研究成果“*Vacancy-Assisted Growth Mechanism of Multilayer Hexagonal Boron Nitride on a Fe_2B Substrate*”于9月11日在《物理化学快报》杂志上在线发表。

$h-BN$ 以原子级平整表面、无悬挂键、高导热性及良好的理化稳定性等优势成为目前最具潜力的二维晶体器件的介质衬底和封装材料。近年来，上海微系统所吴天如、时志远研究团队聚焦二维晶体理论研究、器件工艺、规模化应用面临的难点问题，在单层 $h-BN$ 单晶生长、异质结构筑及高质量多层 $h-BN$ 制备等领域展开了一系列研究（*Nature Communications*, 2015, 6, 6160; *Advanced Science*, 2017, 4, 1700076; *Nature Communications*, 2020, 11, 849）。由于国际上 $h-BN$ 先进合成技术发展缓慢，对传统方法的生长机制也缺乏深入研究，严重限制了大尺寸、高质量 $h-BN$ 可控合成与实际应用。

上海微系统所吴天如研究团队基于 Fe_2B 合金体系实现了高质量 $h-BN$ 可控制备，通过快速冷却淬火技术结合飞行时间二次离子质谱（*ToF-SIMS*）分析了 $h-BN$ 合成过程中 Fe_2B 浅表层B原子和N原子分布规律。华东师范大学袁清红研究团队采用第一性原理计算



方法，对 Fe_2B 表面 h -BN的生长机制深入研究，并首次提出 Fe_2B 表面 h -BN的空位辅助合成机制。研究发现， B - N 二聚体产生使合金表面形成大量B空位，这对B、N原子的迁移起到极大的促进作用。 Fe_2B 基底中B和N原子的扩散仅需克服小于1.5 eV的能垒，这使得N原子在催化表面附近大量溶解。此外，通过对不同尺寸 B - N 团簇的形成能和吉布斯自由能的计算和拟合，研究人员发现 Fe_2B 表面 h -BN成核能垒约2 eV。因此，在相对较低温度（700 K）下合成 h -BN成为可能。该工作所提出的“空位辅助”生长新机制解决了传统方法合成多层 h -BN长久以来缺乏高N溶解度和扩散速率的催化剂这一难题，为 h -BN在二维纳米电子学及新兴微电子器件领域的应用提供了广阔空间。

该工作由华东师范大学与上海微系统所联合培养硕士姜忍、上海微系统所时志远博士和华东师范大学硕士赵威为共同第一作者，上海微系统所吴天如副研究员与华东师范大学袁清红教授为共同通讯作者。该研究获得了国家重点研发计划、国家自然科学基金面上项目、中国科学院先导B类、中国科学院青年创新促进会、上海市超算中心、上海市启明星计划、上海市扬帆计划以及上海市科委的资助。

论文链接：<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcllett.0c02289>
(<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcllett.0c02289>)

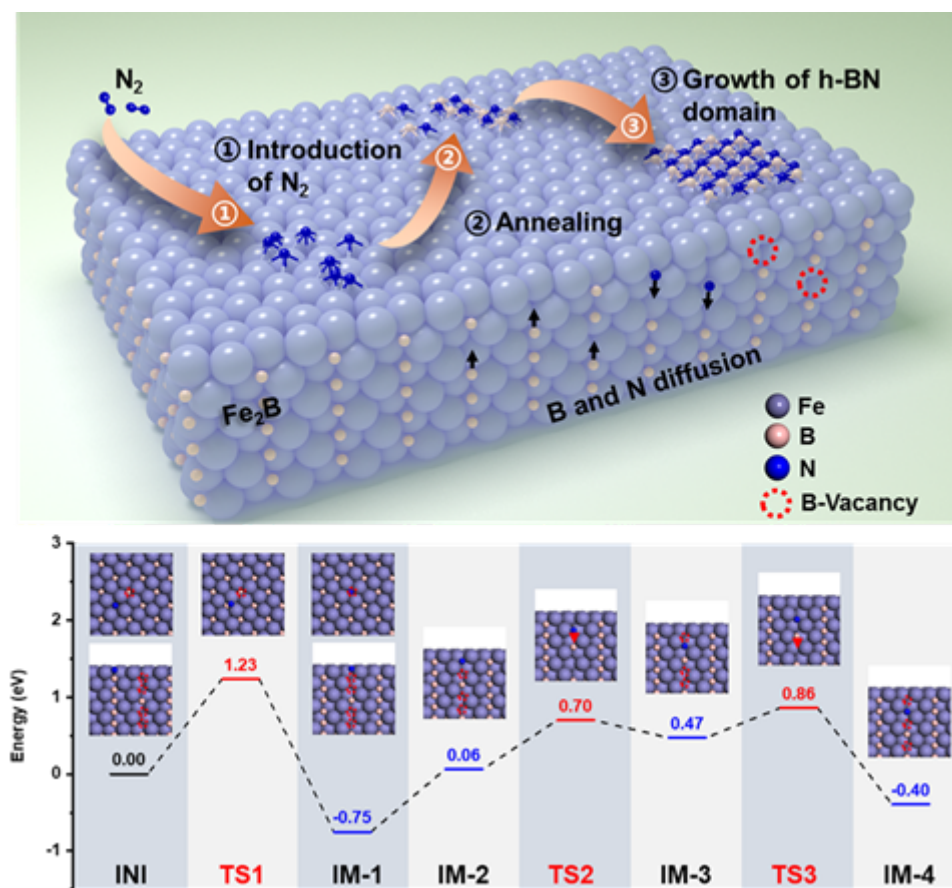


图1. Fe_2B 合金表面多层 h -BN合成机制示意图及近表面N原子扩散能量曲线

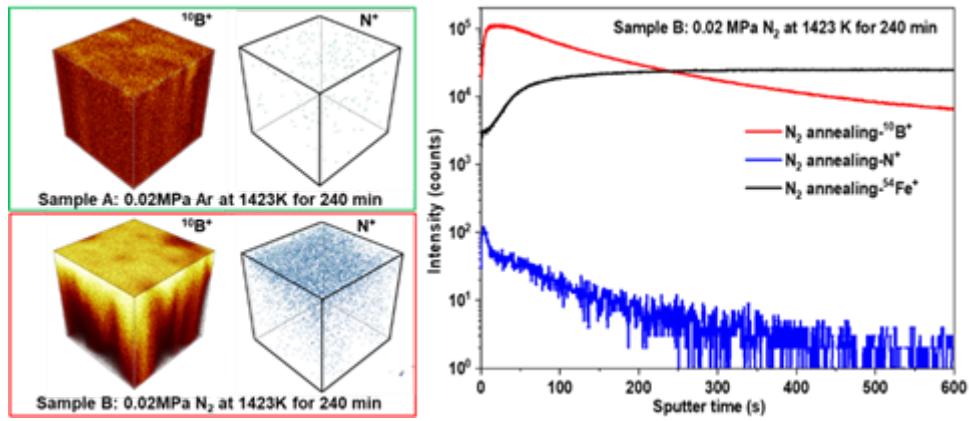


图2. 基于飞行时间二次离子质谱 (ToF-SIMS) 的 Fe_2B 合金浅表层B原子和N原子分布规律研究

== 友情链接 ==

版权所有 © 中国科学院上海微系统与信息技术研究所 沪ICP备05005483号-1
 (https://beian.miit.gov.cn/)
 电话: 021-62511070 传真: 021-62524192
 地址: 上海市长宁路865号 邮编: 200050

