

铅烯：一种基于 d 电子过渡金属元素的新型二维晶体材料

石墨烯的非凡性质根源于其蜂窝状晶格中的粒子隧穿。近年来，石墨烯的成功使得人们关注其他新型二维蜂窝状材料的研究，以进一步探索蜂窝状结构非同寻常的电子学性质。中国科学院物理研究所高鸿钧研究组在 Ir(111)衬底上成功制备出硅烯，并深入研究了它的几何、电学性质以及和基底的相互作用 [Nano Letters **13**, 685 (2013)]。这一工作提供了一种新的制备高质量硅烯的方法，被 Nature [Nature **495**, 152(2013)] 在其 News 中报道，指出是目前国际上报道的制备硅烯的三种方法之一。从现有报道的单层二维蜂窝状材料来看，它们只是由元素周期表中的 p 区元素构成的（例如碳元素构成的石墨烯，硅元素构成的硅烯）。含有 d 电子的过渡金属元素要远多于 p 区元素。

过渡元素具有丰富的多体物理和配位化学性质，而且很多含有自旋极化的磁性特性，其二维蜂窝状结构的实现对于研究过渡元素电子、自旋和催化性质具有重要意义。过渡金属元素中的铅也是当今半导体科学和技术中最重要的元素之一，制备出铅的类石墨烯结构对未来电子学也极其重要。然而，由 d 电子过渡金属元素单质构成的二维蜂窝状结构至今未见报道。

最近，高鸿钧研究组的博士生李林飞和王业亮研究员等首次发现制备铅烯二维蜂窝状原子晶体的方法。他们通过分子束外延生长的方法获得了 d 电子过渡金属元素的单层平面二维蜂窝状结构。实验观测结果表明，在 Ir(111)基底表面，铅原子形成了自己的二维蜂窝状晶格，并且近邻铅原子的间距与体状铅内部的原子间距极其接近。这些结果突破了二维蜂窝状结构由 p 区元素（例如碳，硅）构成的现状。他们与美国伦斯勒理工学院的张绳百教授和吉林大学李贤斌教授等合作，对实验结果进行了理论计算与模拟。结果揭示了最近邻铅原子之间是共价键结合。这类由元素周期表中 d 区元素构成的二维晶体材料，其几何和键结构与石墨烯类似，被称之为 d 电子烯或者金属烯-铅烯。该工作向实现非碳元素的类石墨烯二维蜂窝状结构迈出了重要的一步。这种 d 电子金属元素构成的二维蜂窝状结构比石墨烯具有更强的自旋轨道耦合，为研究二维体系中新的量子现象和电子行为提供了全新的平台。相关结果发表在 Nano Letters **13**, 4671 (2013)上。文章发

表后不久被 Nature China 和 Nature Nanotechnology 引用, 作为研究亮点(Research Highlights)进行了报道。

该项研究工作得到了国家自然科学基金, “973”项目和中国科学院的支持。

附件列表:

下载附件>> " Two-Dimensional Transition Metal Honeycomb Realized: Hf on Ir(111) ",
Nano Letters **13**, 4671 (2013).

Nature Nanotechnology 报道链接:

<http://www.nature.com/nnano/reshigh/2013/1013/full/nnano.2013.211.html>

Nature China 报道链接:

http://www.nature.com/nchina/2013/131002/full/nchina.2013.99.html?WT.ec_id=NCHINA-20131002

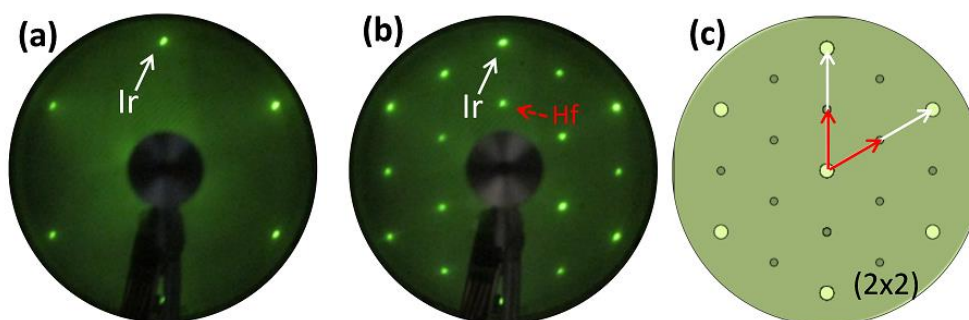


图1. Ir(111)表面铪烯形成前后的LEED图像: (a) 干净基底, 白色箭头标示的六个衍射点来源于Ir(111)表面的六重对称性; (b) 样品沉积铪并经过退火处理, 虚线箭头标示出了新产生的衍射点, 表明铪层在Ir(111)表面形成了相对于基底格子的(2x2)超结构。(c) Ir(111)表面(2x2)超结构的理想LEED图像, 实验图像b图与其完全一致, 每组衍射点由白色和淡绿色圆斑分别标示。

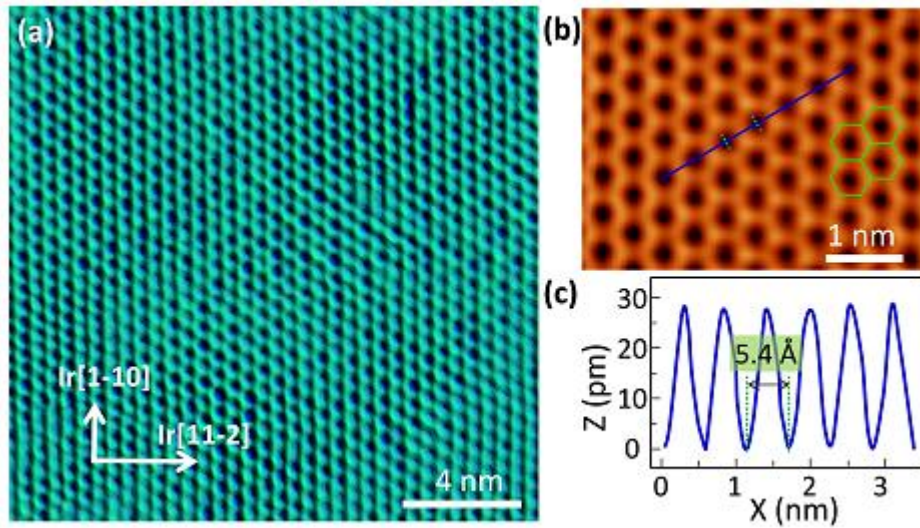


图 2. (a) Ir(111)表面生长的铪烯晶格的高分辨 STM 图像 ($U = -1.0 \text{ V}$, $I = 0.8 \text{ nA}$), 基底 Ir[1-10]和 Ir[11-2]方向由白色箭头标示。(b) 铪层的原子分辨 STM 图像 ($U = -0.7 \text{ V}$, $I = 0.16 \text{ nA}$), 铪层的蜂窝状原子晶格由绿色六角形标示。(c) 是 (b) 图中沿蓝色直线所示的剖面线, 显示铪层六角晶格的周期为 5.4 \AA (为基底 Ir (111)表面晶格常数的 2 倍, 和图 1 中 LEED 测量结果完全一致)。

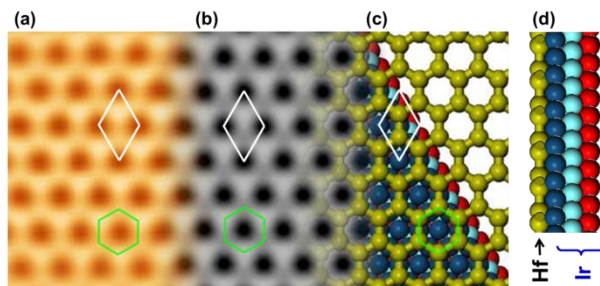


图3. (a) 原子分辨的STM图像(-1.5 V , 0.1 nA), 蜂窝状结构用六角形表示。(b) 理论模拟的STM图像(-1.5 V), 显示的特征和实验结果一致。(c) 第一性原理理论计算获得的Ir(111)基底上铪层的蜂窝状结构的原子弛豫模型, 铪(2×2)超格子刚好对应于铪层蜂窝结构的(1×1)格子, 如平行四边形所示。(d) 为c图弛豫原子模型的侧视图, 显示了Ir(111)表面上的平面Hf层结构。

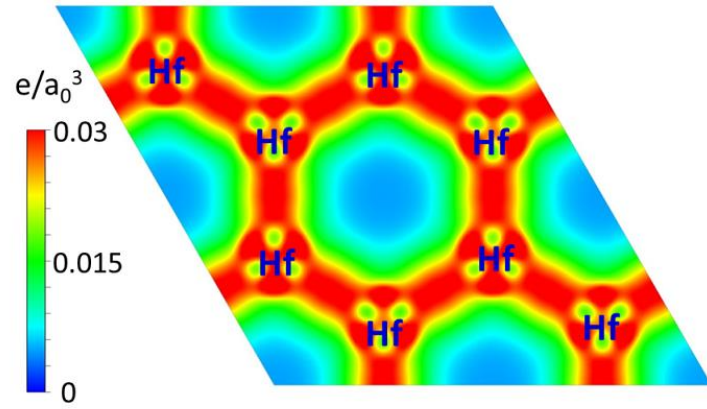


图 4. Ir(111)表面铪层的二维电子态密度图。铪-铪键清晰可见，维持了铪的平面蜂窝状结构。