

金属 Ir (111) 表面硅烯的生长研究

硅烯，由于它具有和石墨烯类似的蜂窝状结构，作为另外一种新型的二维晶体材料引起了越来越多人的关注和研究。在硅烯被认为是一种可能的材料之前，已经有很多理论学者和实验学家研究了硅的纳米结构，如硅纳米线等。2007 年始，理论学者提出硅烯的概念并对其进行了模拟计算，最近的理论研究表明硅原子倾向于形成一种起伏的层状结构，另外预测硅烯也具有非常优异的物理性能，例如量子自旋的霍尔效应等。

目前最关键的就是硅烯的制备。我们知道由于石墨层间存在弱的范德华力，可以很容易的从石墨中解理出石墨烯；但硅烯则不能从体硅中获得，是因为在体材料中，硅原子是以 sp^3 杂化的形式存在的。这种硅与硅之间强的共价作用是很难被破坏的。这样，通过解理获得硅烯是不太可能实现的。那么，在固体表面外延生长硅烯成为了一种主要的制备方法。最近，在 Ag (111) 表面通过外延生长成功制备了硅烯。除了在 Ag (111) 表面，在以硅片为基底的二硼化锆薄膜上面也成功制备了硅烯。这两项工作都观察到了硅烯的一种 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 的重构。这些实验结果都非常吸引人。然而到目前为止硅烯的制备只限制在两种基底上。对于研究在其他基底上硅烯的可控生长以及在原子尺度上研究它的本征的物理性质是非常有意义的。

最近，中科院物理所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）纳米物理与器件实验室 N04 研究组（高鸿钧研究组），通过外延的方法在金属基底 Ir (111) 表面成功制备出了硅烯。通过低能电子衍射和扫描隧道显微镜的表征，它相对于金属铱基底表现为一种 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 的超结构。这种结构恰好是和硅烯的 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 超结构相匹配的。第一性原理计算验证了这种超结构模型并提出这是一层起伏的硅烯。重要的是，他们还通过电子局域函数计算出在基底 Ir (111) 表面外延生长的硅烯是一层连续的二维膜结构。这个工作提供了一种制备高质量硅烯的方法，并且对在硅烯表面观察有趣的量子现象提供了可能。

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，相关结果发表在 *Nano Lett.* 13, 685 (2013)。

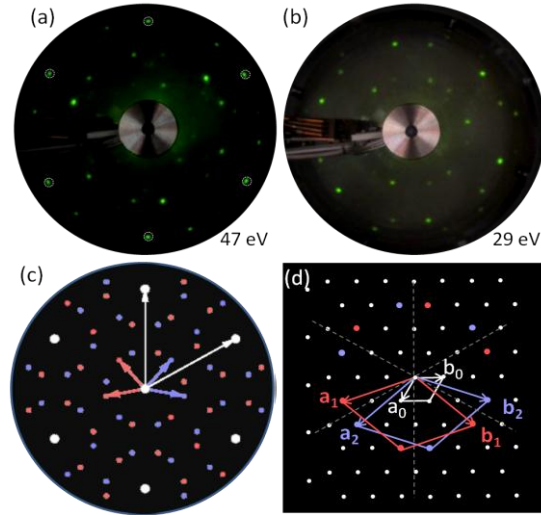


图1. Ir(111)表面硅结构的LEED图像和相应的示意图。(a)虚线标示的衍射点来源于基底Ir(111)的六重对称性。其他的衍射点来自硅的结构。(b) 低入射电子能量下得到的LEED图像。(c) (a) 图的示意图。每组衍射点由白色，红色和蓝色箭头标示。(d) 衍射点在实空间下的示意图。以上的数据表明LEED图像显示的是相对于基底Ir(111)（基矢 (a_0, b_0) ）硅的 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 的超结构（基矢 (a_1, b_1) 或 (a_2, b_2) ）。

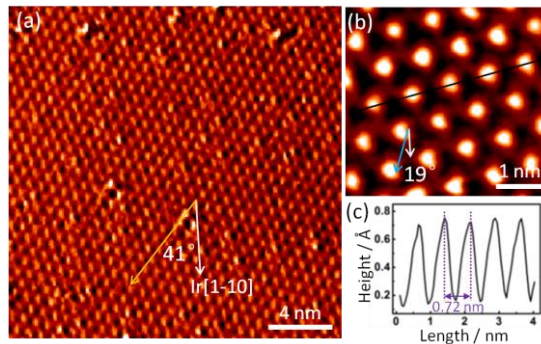


图2. (a) 在Ir(111)表面生长的硅的 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 超结构的STM图像 ($U = -1.45$ V, and $I = 0.25$ nA), 超结构方向由黄色箭头表示。基底Ir[1-10]方向由白色箭头表示。两个方向之间的夹角是 41° 。(b) 在Ir(111)表面生长的硅的 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 另外一种取向的超结构的STM图像 ($U = -1.5$ V, and $I = 0.05$ nA), 方向由蓝色箭头表示。它和基底Ir[1-10]方向的夹角是 19° 。(c) (b) 图中沿黑色直线所示的剖面线, 显示硅的超结构的周期约为 0.72 nm, 起伏约为 0.6 Å。

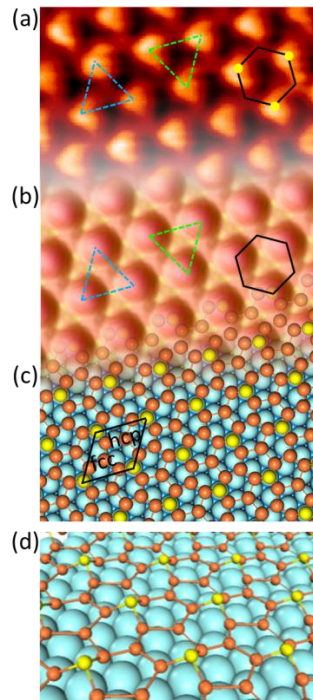


图3. (a) 放大的硅结构的STM图像。除了最亮的突起之外，还有另外两个具有不同对比度的区域，分别蓝色和绿色三角表示。黑色六角形显示了蜂窝状的结构特征。(b) 模拟的STM图像，显示的特征和实验结果一样，用同样的三角和六角表示。(c) 在 $(\sqrt{7}\times\sqrt{7})$ 铱的基底上生长的 $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})$ 硅烯的弛豫原子模型。(d) (c) 图中弛豫原子模型的透视图，显示了在Ir(111)表面生长的一层起伏的硅烯。

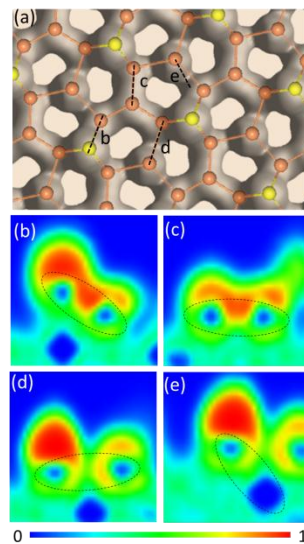
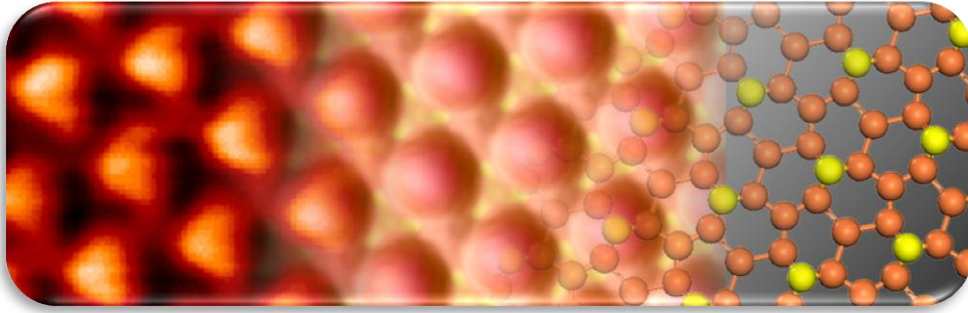


图4. (a) 弛豫原子模型的整体电子局域化函数的顶视图 (ELF值0.6) 显示了硅烯的连续性。(b-d) 不同位置硅原子对 (椭圆形虚线) 截面的电子局域化函数，显示了在每对硅原子之间都存在共价相互作用。(e) 在hcp处的硅原子和离它最近的铱原子之间的截面的电子局域化函数。ELF值在0.38附近，表明原子之间存在的是静电的相互作用。



附件列表:

下载附件>> " Buckled Silicene Formation on Ir(111)", Nano Letters. 13, 685 (2013).