[Highlight]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201603081

www.whxb.pku.edu.cn

基底敏感的石墨烯氧化

杨金龙

(中国科学技术大学化学与材料科学学院, 合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026)

近日, 南京航空航天大学机械结构力学与控制国家重点实验室的郭万林研究团队通过理论计算和实验发现石墨烯在不同基底上的抗氧化性能迥然不同。

石墨烯是具有优异电子性质的单原子层晶体材料, 由碳原子在层内以杂化轨道联结的六元环结构组成, 比表面积可高达 $2630 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ 。由于单层石墨烯的每个碳原子都暴露于表面, 其化学稳定性, 尤其是抗氧化性能长期以来备受关注¹⁻⁴。氧化往往是石墨烯化学分解和器件性能衰退的重要原因^{5,6}。在器件中, 石墨烯需要与金属电极、绝缘层等基底接触, 其在基底上的抗氧化性能就变得十分重要^{1,5,6}, 但我们缺乏对不同基底上石墨烯氧化性能的差异性的认识。

南京航空航天大学郭万林研究团队基于第一性的过渡态计算发现, 石墨烯在二氧化硅、六方氮化硼等绝缘基底, 以及金、银等惰性金属基底上具有和孤立石墨烯相当的良好抗氧化性; 而在铝、铜基底上则容易被氧化; 在镍、钴基底上甚至发生自发氧化。这种基底敏感的氧化性能主要源于不同基底对石墨烯中电子转移的影响。石墨烯与基底的化学作用越强, 石墨烯的电子共轭性越弱, 更易与氧分子形成化学键。化学吸附的氧分子在石墨烯上很容易解离成环氧基。他们进一步研究发现环氧基在石墨烯表面的扩散也显著依赖于基底。环氧基在铜支撑的石墨烯上的迁移率

最高, 在室温下可比孤立石墨烯上的迁移率高13个数量级。他们通过实验证实了铜基底上的石墨烯的氧化性能远低于二氧化硅基底上的, 结果与理论预测吻合。他们的研究还发现, 双层石墨烯表面的氧化性能几乎不受基底的影响。该工作最近发表于 *The Journal of Physical Chemistry Letters*⁷, 为设计高抗氧化性石墨烯器件提供了依据, 也为调控石墨烯氧化提供了新途径, 对石墨烯的应用和器件技术都有重要意义。

References

- (1) Liu, L.; Ryu, S.; Tomasik, M. R.; Stolyarova, E.; Jung, N.; Hybertsen, M. S.; Flynn, G. W. *Nano Lett.* **2008**, 8, 1965. doi: 10.1021/nl0808684
- (2) Wu, Z. S.; Ren, W.; Gao, L.; Liu, B.; Zhao, J.; Cheng, H. M. *Nano Res.* **2010**, 3, 16. doi: 10.1007/s12274-010-1003-7
- (3) Li, Z.; Zhang, W.; Luo, Y.; Yang, J.; Hou, J. G. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 63201. doi: 10.1021/ja8094729
- (4) Fujii, S.; Enoki, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 10034. doi: 10.1021/ja101265r
- (5) Schriver, M.; Regan, W.; Gannett, W. J.; Zaniwski, A. M.; Crommie, M. F.; Zettl, A. *ACS Nano* **2013**, 7, 5763. doi: 10.1021/nn4014356
- (6) Zhou, F.; Li, Z.; Shenoy, G. J.; Li, L.; Liu, H. *ACS Nano* **2013**, 7, 6939. doi: 10.1021/nn402150t
- (7) Zhang, Z.; Yin, J.; Liu, X.; Li, J.; Zhang, J.; Guo, W. *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, 7, 867. doi: 10.1021/acs.jpclett.6b00062