
数据驱动具有负泊松比二维材料及具有量子反常霍尔效应二维材料异质结的高通量计算研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11794.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

随着科技的发展，传统电子元器件在不断微型化过程中面临诸多挑战。寻找新材料、新结构和新原理器件是推动信息化器件进一步发展的关键。近年来，二维材料由于仅有单个或几个原子层厚度，量子效应凸显，呈现出许多区别于传统三维材料的新奇物性和卓越性能，有望成为新原理型光、电、磁等器件的核心材料。因此，探索具有优异性能的新型二维功能材料、研究其新奇物性并构筑基于二维材料的新原理器件，对二维材料的实际应用具有重要意义。

近日，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心纳米物理与器件实验室N11组副研究员潘金波、博士张艳芳、研究员杜世萱，与美国天普大学教授严琪阁等合作，在二维层状材料及异质结的新奇物性研究中取得进展。研究人员设计出正方形晶格结构在应力下的演化模型，通过分析二维平面结构和起伏结构在应力下可能的演化过程，提出一个能够使材料产生负泊松比的机制，即材料具有起伏结构，且次近邻原子间相互作用较弱（图1）。结合大数据挖掘和高通量计算，科研人员从二维材料数据库中搜索到一个具有类似模型结构的二维材料家族，即具有 $p4mm$ 二维空间群的过渡金属硫族和卤族化合物 MX ，其中 M 为 V 、 Cr 、 Mn 、 Fe 、 Co 、 Ni 、 Cu 、 Zn 、 Ag ， X 为 Se 、 Cl 、 Br 、 I （图2）。理论计算表明，当金属原子 $3d$ 轨道满占据时，体系具有较弱的次近邻相互作用，导致负泊松比的发生，与模型预测结果一致。研究中结构模型演化分析结合大数据材料挖掘的方式，提高了二维负泊松比材料的探索效率，为研究具有优异力学性质的二维材料提供了有价值的参考。相关研究成果发表在 npj Computational Materials, 6, 154 (2020)上。

此外，研究人员提出一种通过构筑二维磁性范德华异质结来实现量子反常霍尔（QAH）效应的方法，以克服传统本征磁性拓扑绝缘体数量稀少这一难题。通过寻找两个具有特定能带带边结构的二维（通常是拓扑平庸的）磁性半导体化合物的组合，使得它们形成具有拓扑非平庸能带结构的型异质结（图3）。结合基于对称性分析的理论模型、大数据挖掘以及高通量计算方法，研究预测8种具有QAH效应的异质结候选材料，这些异质结材料由 MX_2Y 化合物（ M =金属原子， $X=S$ 、 Se 、 Te ， $Y=F$ 、 Cl 、 Br ，）中二维铁磁半导体材料构成。以 $MnNF/MnNCl$ 为例，理论上直接计算该异质结的电子结构（图4）和拓扑不变量（陈数）以及手性边缘态（图5），计算结果表明 $MnNF$ 和 $MnNCl$ 在 FM -stacking方式下能产生量子反常霍尔效应（QAH），与基于对称性分析的理论模型结果一致。该研究展示了如何将数据驱动的材料科学与基于对称性分析的理论模型相结合，寻找具有QAH效应和其他奇异量子态的新型异质结量子材料。相关研究结果发表在 npj Computational Materials, 6, 152 (2020)上。

论文链接：[1](#)、[2](#)

图2.(a)具有 $p4mm$ 二维空间群的MX材料家族的几何结构。(b)泊松比与其它结构参数

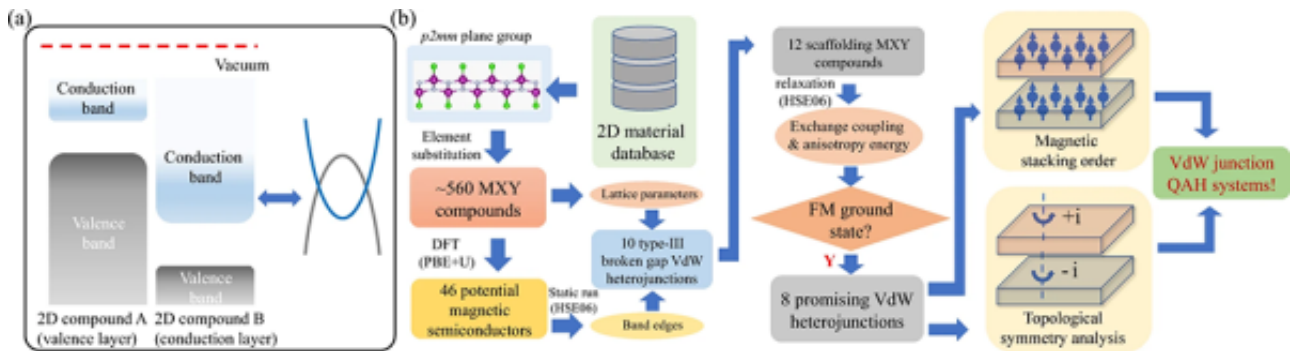


图3.数据驱动二维磁性拓扑异质结探索流程

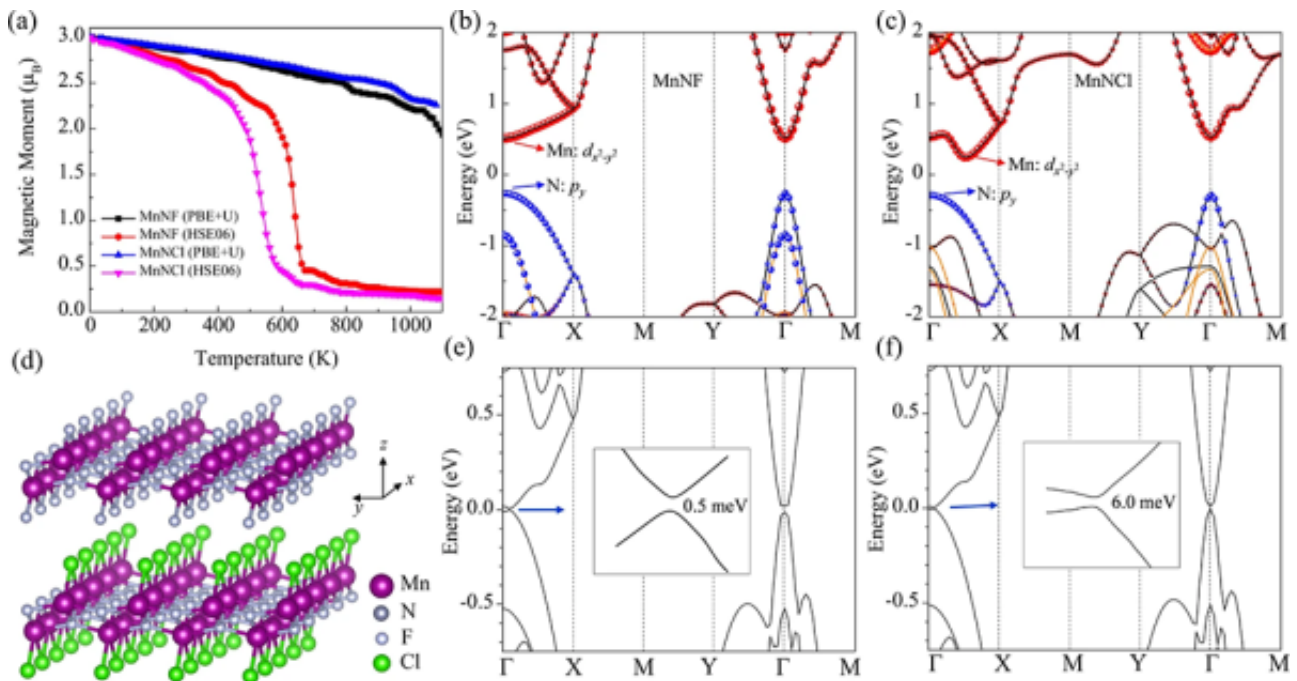


图4.基于密度泛函理论的单层MnNF、MnNCl和MnNF/MnNCl异质结的电子结构

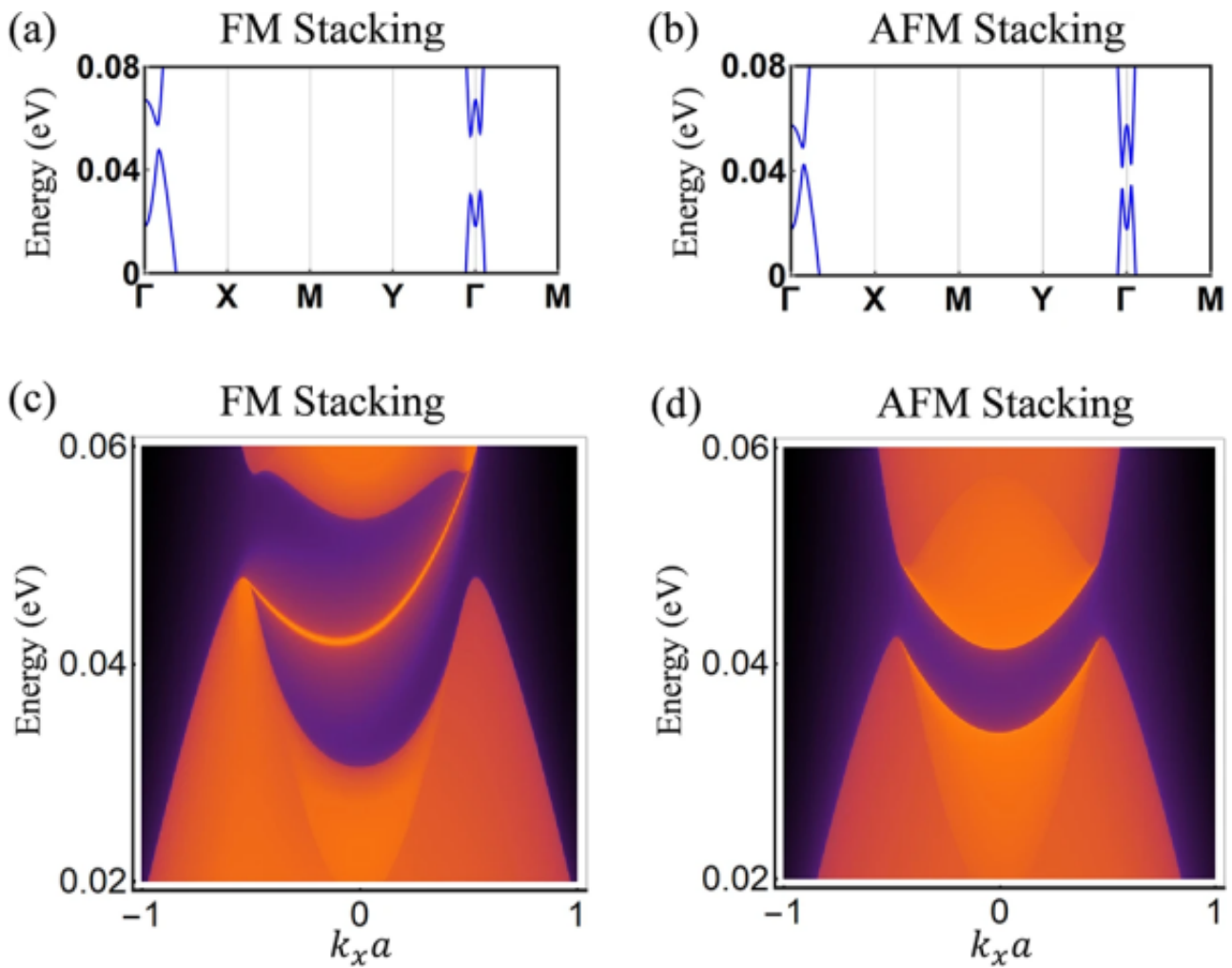


图5.基于Tight-binding模型的MnNF/MnNCI异质结在FM-stacking and AFM-stacking下能带结构

研究团队单位：物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发