科学家设计出仿“三明治”新型六元环材料家族

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/13669.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！

科学家设计出仿“三明治”新型六元环材料家族。近期，中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心与合作者提出插层构筑强键合方法，仿三明治设计出新型MA2Z4材料家族，进一步拓展了这一家族的候选材料和物性，相关研究成果日前发表于《自然·通讯》。

记者从沈阳材料科学国家研究中心材料设计与计算研究部获悉，从石墨烯、六方氮化硼、二硫化钼到MnBi2Te4等，这些六元环无机二维材料的结构越来越复杂，组元越来越多，性能也越来越丰富。目前二维材料的设计主要是通过将三维范德瓦尔斯层状材料剥离得到其对应的二维材料结构。设计无已知三维母体材料的二维层状材料，可极大拓展二维材料的物性和应用，具有重要的科学意义和实用价值。

研究人员在前期工作基础上发现，由七个原子层组成的单层MnBi2Te4和单层MoSi2N4材料可以看作2H-MoS2或1T-MoS2类型结构插入α-InSe或β-InSe类型结构中形成的三明治结构。在三明治的层间界面处发生强化学键合，形成了全新的材料体系。

由此，研究人员提出了插层构筑强键合的方法。该方法是通过将不同种类二维材料堆叠或插层，二维材料之间的界面通过金属键、共价键或离子键的方式结合，实现新的功能组合体。

另外，研究人员利用该插层构筑强键合的方法，针对MA2Z4二维材料家族，设计了39种二维由七个原子层组成的结构原型，并通过高通量计算对每种结构原型考虑了不同元素间的90种组合，计算不但验证了实验已经合成的MnBi2Te4和MoSi2N4材料，而且也预测出72种新的MA2Z4二维材料。这些新的MA2Z4二维材料表现出了拓扑绝缘体、磁性半导体、超导体和电子能谷自旋极化等丰富物性。

该项研究工作不仅拓展了MA2Z4二维材料家族的材料与新物性，而且也为无三维母体的二维新材料体系和功能设计提供了思路。（来源：中国科学报沈春蕾）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41467-021-22324-8

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：陈星球等 来源：《自然—通讯》

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转发