

---

# 科学家发现数十种二维层状塑性无机非金属材料

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/21535.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！**

科学家发现数十种二维层状塑性无机非金属材料。具有室温塑性变形能力的无机非金属材料集金属的力学性质与半导体的电学性质于一体，极大拓展了现有材料的应用功能与应用场景，成为一类全新的材料体系。然而，目前塑性无机非金属材料的种类稀少，仅局限在Ag<sub>2</sub>S、InSe单晶及其部分衍生物中，寻找和发现更多具有塑性变形能力的新材料成为重大挑战。

近日，中国科学院上海硅酸盐研究所史迅研究员、仇鹏飞研究员、陈立东研究员与上海交通大学魏天然副教授等合作，提出了针对二维层状材料的塑性筛选指标，设计开发出高通量算法和流程，预测发现了36种二维层状塑性无机非金属材料，并实验验证MoS<sub>2</sub>、GaSe、SnSe<sub>2</sub>等7种材料具有塑性变形特性，其中SnSe<sub>2</sub>的热电功率因子达到10.8  $\mu\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ，是目前塑性热电材料的最高值。相关研究成果发表在Nature Communications和Advanced Science上。

基于二维层状材料的结构特点，提出层间解理能  $\times$  跨层解理能/层间滑移能垒可作为二维层状材料的塑性筛选指标因子，发展针对各个参量的高效计算方法，设计开发出高通量自动化筛选流程(图1, 图2a)，从ICSD数据库的3451种二元硫族化合物中预测36种二维层状材料可能具有塑性变形能力(图2b)。研究团队挑选出13种材料进行初步实验表征，发现理论预测的7种塑性单晶材料InSe、GaSe、GaS、SnSe<sub>2</sub>、SnS<sub>2</sub>、MoS<sub>2</sub>以及MoTe<sub>2</sub>在三点弯曲下能够承受20%的应变而不破裂，而6种脆性单晶材料Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>、Sb<sub>2</sub>Te、NiTe<sub>2</sub>等弯曲时发生断裂(图2c)，实验结果与理论预测一致。进一步挑选二维材料MoS<sub>2</sub>进行精细力学表征，发现单晶块体能承受6%的拉伸应变以及50%的压缩应变，显示出良好的塑性变形能力。综合GaSe和SnSe<sub>2</sub>等其他二维材料的精细力学表征，发现层状材料在发生塑性变形时首先发生层间滑移、加大应力后发生跨层滑移，展现出较强的各向异性。理论计算了层间与跨层滑移可能的滑移面和滑移系，分析了滑移过程中滑移面化学键的演变，发现无论是层间还是跨层滑移，晶体中的化学键不断持续断裂和生成是赋予优异塑性的核心，这种化学键特征使得滑移过程中滑移面间始终存在较强的相互作用，从而抑制解理断裂、保证材料在塑性变形时的完整性。

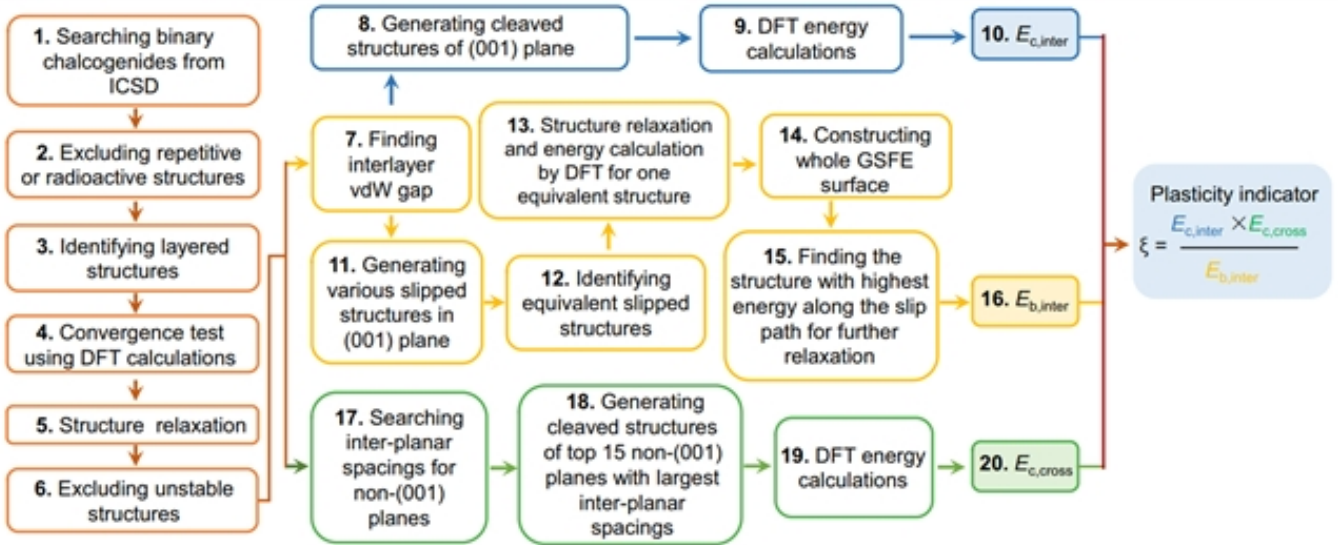


图1. 二维层状塑性无机非金属材料的高通量筛选流程

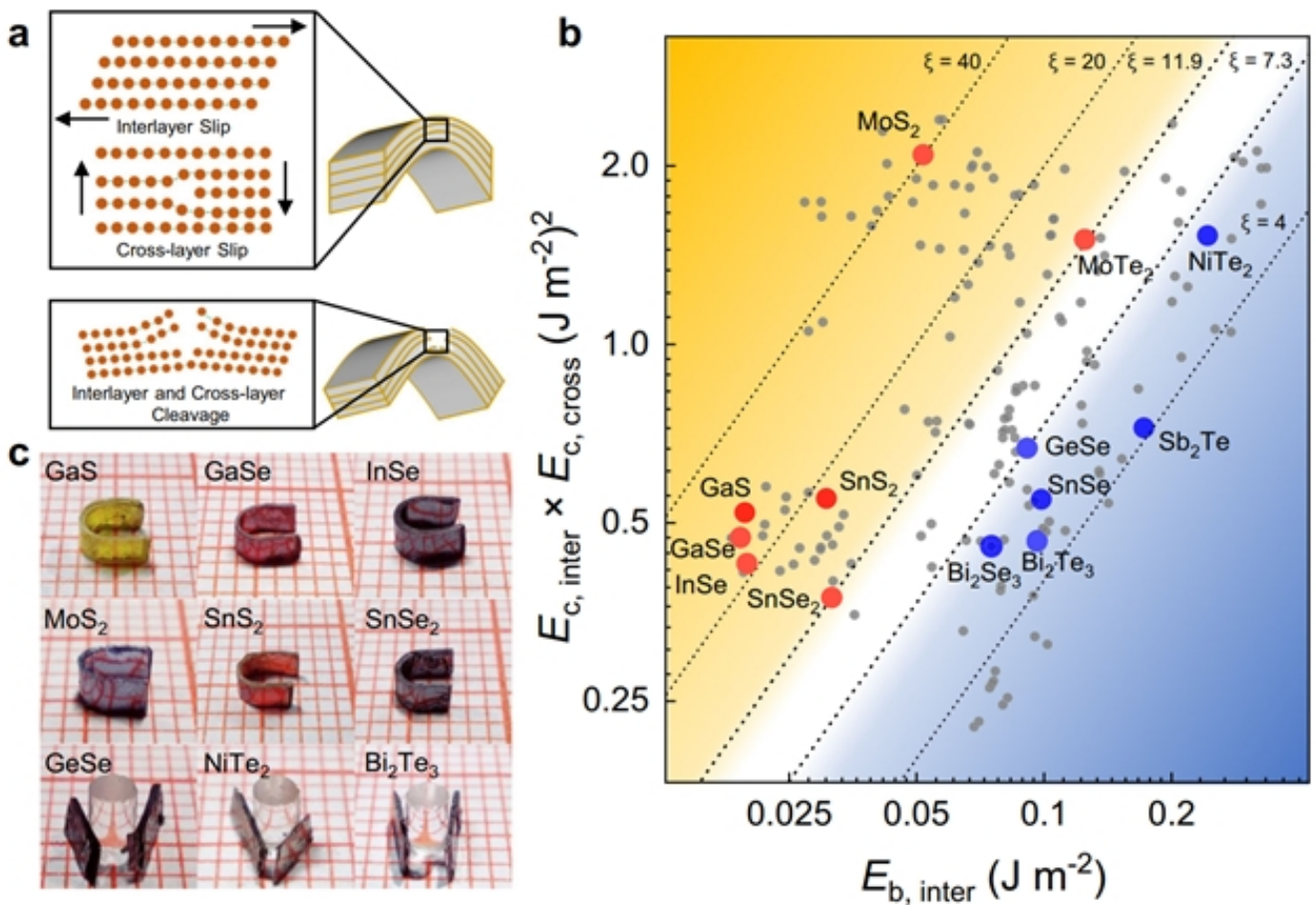


图2. (a) 二维层状材料的塑性变形和解理断裂模式;(b) 二元硫族化合物的高通量筛选结果;(c) 7种塑性材料和6种脆性材料的弯曲照片

相关研究结果以High-throughput screening of 2D van der Waals crystals with plastic deformability为题发表在Nature Communications (2022, 13:7491)上，上海硅酸盐所/上海科技大学博

士生高治强为论文第一作者，上海硅酸盐所史迅研究员、上海交大魏天然副教授为共同通讯作者。

其中，六方结构的SnSe<sub>2</sub>单晶经过卤族元素掺杂后，在375 K下电导率可达20000 S m<sup>-1</sup>，较基体提高两个数量级，功率因子最高为10.8 μW m<sup>-1</sup>K<sup>-2</sup>，是目前塑性热电材料的最高值(图3)。该研究以Plastic/Ductile Bulk 2D van der Waals Single-Crystalline SnSe<sub>2</sub> for Flexible Thermoelectrics为题发表在Advanced Science (2022, 9:29)上，上海硅酸盐所/中国科学院大学杭州高等研究院博士后邓婷婷和上海硅酸盐所/上海科技大学博士生高治强为共同第一作者，史迅研究员和仇鹏飞研究员为通讯作者。

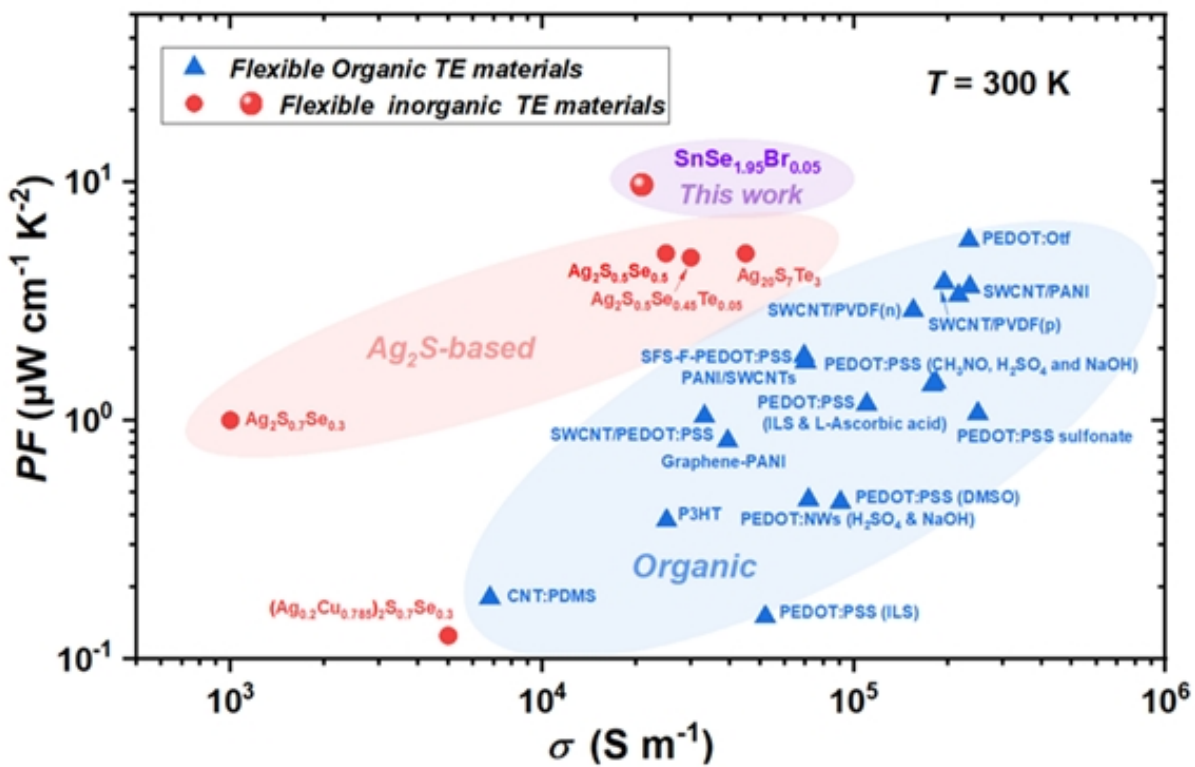


图3. 塑性热电材料的功率因子与电导率

上述工作将塑性无机非金属材料种类拓展至数十种，丰富了塑性无机非金属材料种类与内涵，在推动无机塑性材料新应用的进程上跨出了重要的一步。研究工作得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金和上海市科委的支持。(来源：中国科学院上海硅酸盐研究所)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-022-35229-x>

<https://doi.org/10.1002/advs.202203436>

作者：史迅等 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](http://www.iikx.com)转发