“亚层化学”新理念实现镧系MXene精准构筑

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/41208.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！

“亚层化学”新理念实现镧系MXene精准构筑。近日，中国科学院宁波材料技术与工程研究所先进核能材料实验室联合浙江大学、甬江实验室等相关科研团队在二维MXene材料领域取得突破性进展，首次成功合成出镧系MXene材料。该材料同时表现出半导体特性和铁磁性，突破了传统前过渡金属MXene仅具金属导电性的局限。相关成果7月22日在线发表于国际学术期刊《自然》。

MXene是一类二维层状过渡金属碳氮化物，因其优异的导电性和可调表面化学性质，在储能、电磁防护、催化、传感等领域具有广泛应用前景。然而，迄今报道的MXene材料主要基于前过渡金属（如钛、钒、铌等），它们多为金属导电行为，难以同时具备半导体能带结构和磁有序性。这限制了MXene在电子器件、自旋电子学等方向上的进一步拓展。

镧系元素具有独特的4f电子轨道，这类电子受外层电子屏蔽，局域性强，能够为材料提供本征磁矩，同时通过轨道杂化影响能带结构，是调控材料电子性质和磁性的理想元素。然而，将镧系元素引入MXene晶格一直面临合成障碍。传统MXene制备依赖于刻蚀三元层状MAX相中的A位元素，但含镧系元素的MAX相前驱体难以获得。即使通过特殊方法制备出含镧系的化学有序i-MAX相，后续的刻蚀过程也会将相关元素一并溶解，最终只能得到不含镧系的产物。

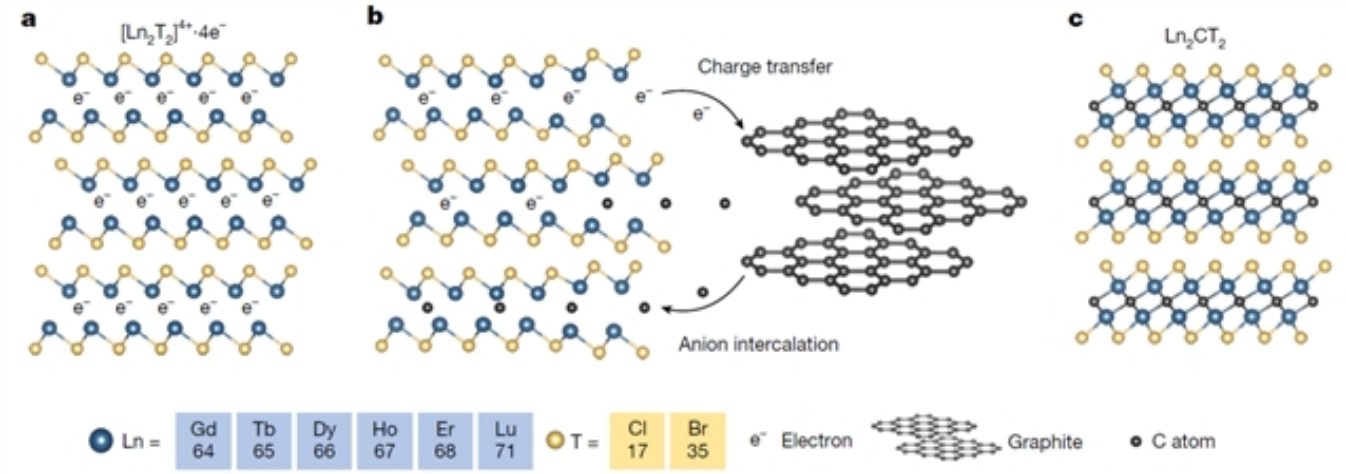
针对这一难题，研究团队基于此前提出的化学剪刀层状结构编辑策略，发展了一条新的合成路径。该策略的核心思想是利用层状化合物中亚层化学性质的差异，通过熔盐介质实现特定原子层的敲除、置换或重构。在本工作中，科研人员注意到一类镧系元素单卤化物（化学式可写为LnT，其中Ln代表镧系元素，T代表卤素）具有特殊的层状结构，其原子排列为T-Ln-Ln-T，与MXene去除碳原子层后的亚层结构相似。同时，这类化合物中存在大量局域化电子，是一种典型的电子化物。

研究团队据此设计了两步反应。首先，将镧系金属与卤化铜反应，制得所需的镧系单卤化物中间体。随后，将中间体与石墨在高温下进一步反应。在此过程中，中间体层间的局域化电子会传递给石墨中的碳原子，形成碳阴离子。失去电子后，原本由电子维系的双金属层间结合力减弱，碳阴离子在静电作用下插入两层金属之间，占据八面体空位，最终形成具有T-Ln-C-Ln-T堆叠序列的MXene晶体结构。通过调整反应条件，团队成功制备了镧系元素为钆、铽、镝、钬、铒、镥，卤素端基为氯或溴的六种新型MXene材料。

在物性表征方面，该系列镧系MXene表现出半导体行为。紫外-可见-近红外光谱测试显示其光学带隙在1.26至1.71电子伏特之间，宏观电阻率随温度降低而升高，呈现负温度系数。磁性测量表明，材料在2开尔文温度下具有明显的磁滞回线，居里外斯温度在6至59开尔文范围，证明其具有

铁磁有序的性质。理论计算进一步揭示，层间碳骨架和表面卤素端基共同作用，消耗了镧系元素费米面附近的d电子，从而打开半导体带隙；而4f电子因局域化程度高，不受此过程影响，仍作为磁矩的主要来源，使材料同时具备半导体性和铁磁性。

这一成果表明，基于结构规律和化学机制的亚层结构编辑策略可以突破传统MXene的材料限制，将镧系元素的独特物性融入二维碳化物体系中，为探索兼具电输运调控和自旋功能的材料提供了新方向。这一研究成果以基于插层卤化物的兼具半导体性与磁性的镧系MXenes（Semiconducting and magnetic lanthanide MXenes from intercalated halides）为题发表在国际学术期刊《自然》上，中国科学院宁波材料所为第一完成单位，宁波材料所在读博士生方倩和量子功能材料团队博士后王黎明博士为论文共同第一作者，甬江实验室黄庆研究员和浙江大学杨洪新教授为论文通讯作者。研究获得国家自然科学基金、国家重点研发计划和浙江省尖兵计划等项目支持，同步辐射光源为本工作的原位结构表征提供了重要实验条件。（来源：中国科学院宁波材料技术与工程研究所）



图一：镧系MXene的合成过程示意图。a，由卤化铜与镧系金属反应制得的LnT晶体结构；b，LnT向Ln2CT2的结构转变机理：LnT层间的层间电子（IAEs, interlayer anionic electrons）将石墨还原为四价碳阴离子C4-，C4-嵌入双金属层内的八面体间隙位点；c，最终产物Ln2CT2的晶体结构。

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41586-026-10802-2

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费等事宜，请与我们接洽。
作者：黄庆等 来源：《自然》

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