

科学家发现新型MAX相及其优异的弹性性能

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/4687.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！

科学家发现新型MAX相及其优异的弹性性能。MAX相是一类分子式为 $M_{n+1}AX_n$ 的非范德瓦耳兹型层状化合物，其中M为过渡族金属，包括Ti、V、Cr、Zr、Nb、Mo、Hf或Ta，A为主族元素Al、Si、P、S、Ga、Ge、As、Cd、In、Sn、Tl和Pb，X为C或N元素。该系列材料因其优异的综合热学、电学以及力学性能已在很多领域获得应用，尤其是在高温导电部件与高温结构部件领域，受到了广泛的关注。近年来，MAX相通过室温腐蚀等方法去掉主族元素A，可以方便地获得一系列准二维材料MXenes，在储能材料中有着很好的应用前景，也成为材料领域的研究热点之一。

MAX相的研究起始于20世纪60年代，至今已经有70余种MAX相被相继发现，其晶体结构可看作是由单层三棱柱配位的MA层与n层八面体配位的MX层交替排列而成，根据不同的n值，存在有 M_2AX 相、 M_3AX_2 相与 M_4AX_3 相，即211相、312相与413相。费米面附近的能带主要来自MX层的贡献，这是其金属导电的主要原因，AX层主要是起到性能调控作用。在该系列材料中MX八面体层可以为多层，含有多层MA层的MAX目前尚未有报道。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心先进材料与结构分析实验室研究员陈小龙、郭丽伟、副研究员金士锋和博士生陈洪祥等，基于结构设计，开始了对于含有多层化MA层的MAX相的探索。在含有As、P元素的三元体系中发现了分子式为 $M_{n+1}AnX$ ($n=2$)的MAX系列新相，包括 Nb_3As_2C 、 Nb_3P_2C 、 Ta_3P_2C 和 V_3As_2C ，简称321相。通过X射线衍射结构解析与高分辨电子显微图像，确定了其晶体结构。该系列材料空间群为 $P6_3/mmc$ ，结构均含有MA三棱柱与MX八面体的结构基元，晶体结构可以看作由两层三棱柱配位的MA层与单层八面体配位的MX层交替排列而成，不同于含有单层MA结构基元的传统MAX($M_{n+1}AX_n$)相。

该团队与中科院高能物理研究所研究员李晓东和博士杨栋梁合作，通过高压同步辐射X射线衍射，发现 Nb_3As_2C 在高达47 GPa的压力下仍保持着晶体结构的稳定性，并通过不同晶胞体积随着压力变化，得出 Nb_3As_2C 具有高达225(3) GPa的体积模量，该数值为所有MAX相中最高的之一，与第一性原理计算结果相符。其中 Nb_3P_2C 的性能最优，剪切模量 $E_V = 371.8$ GPa，弹性模量 $G_V = 152.0$ GPa。该材料毒性小、密度低，具有潜在的应用前景。

321相是第一个具有化学式为 $M_{n+1}AnX$ 相($n>1$)的MAX系列新相，其发现证明了多层MA也可以与MX结合形成一类全新的MAX。其独特的晶体结构以及优良的力学性能值得继续深入探究，并为人们探索新MAX相提供了新的思路。同时也为合成新的MXenes准二维材料提供了可能。

相关研究成果发表在《德国应用化学》上(Angew. Chem. Int. Ed. 2019 58(14) 4576~4580, doi:10.1002/anie.201814128)。该工作受到国家自然科学基金(51532010, 91422303)、中科院前沿科学重点研究项目(QYZDJ-SSW-SLH013)以及中科院战略性先导科技专项(XDB07000000)的支持。

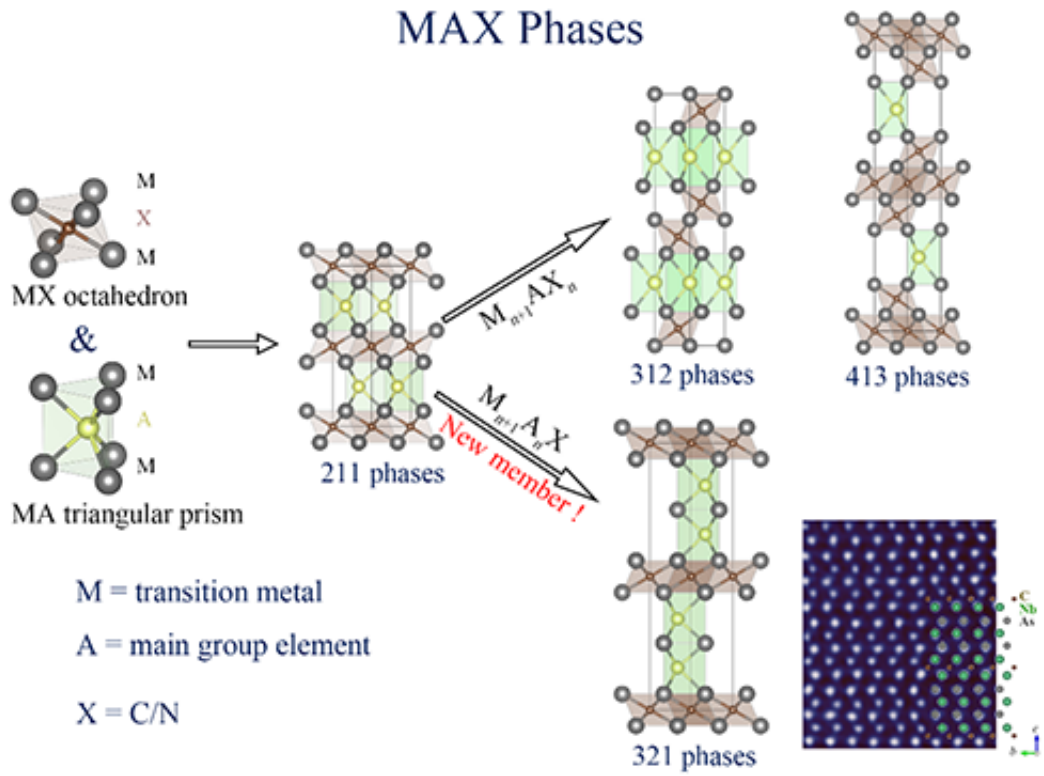


图1：MAX相家族：传统 $M_{n+1}AX_n$ 相与新系列 $M_{n+1}A_nX$ 相的晶体结构。

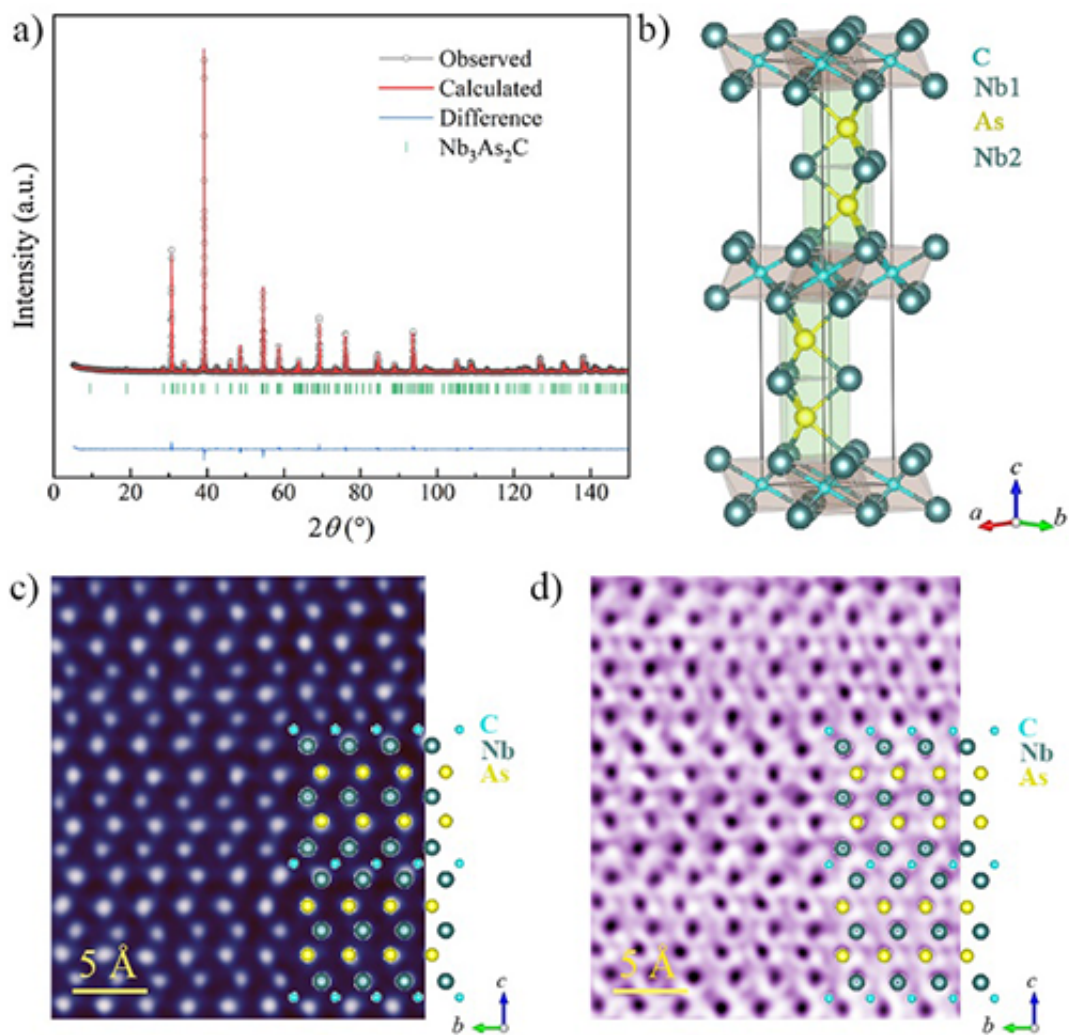


图2：Nb₃As₂C的晶体结构

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