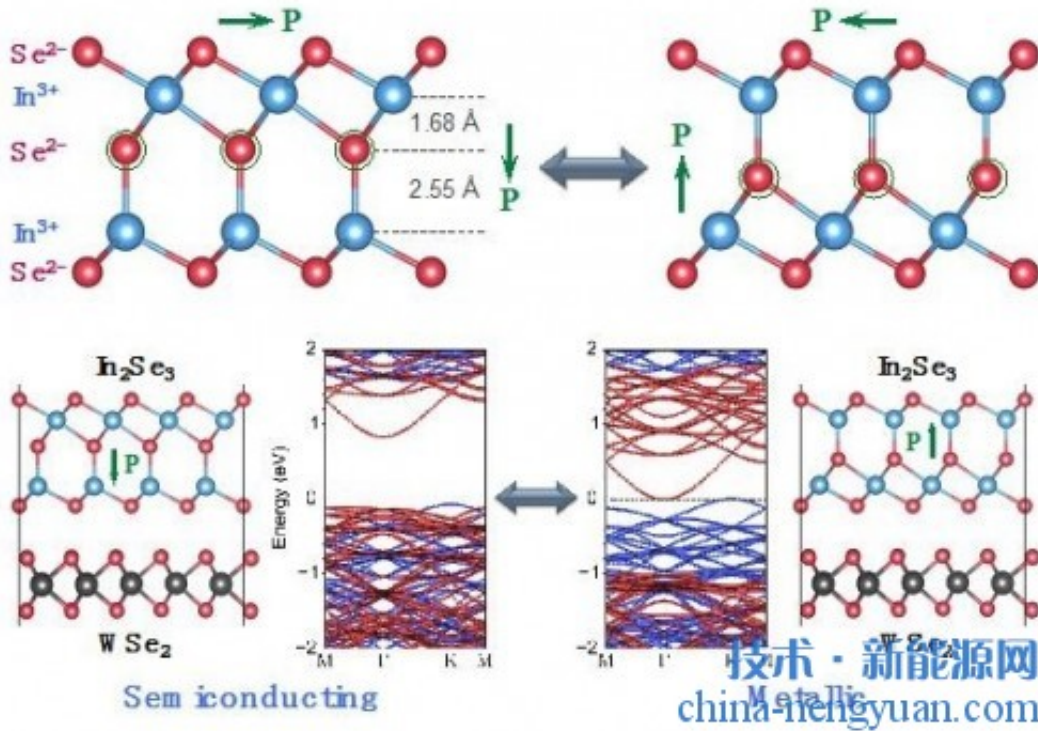


## 中国科大理论预言首类结构稳定的单层二维铁电材料



近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室国际功能材料量子设计中心及物理系朱文光研究组与校外同行合作，通过理论计算预言了首类同时具有面内和面外极化且单层稳定的二维铁电材料。该研究成果以Prediction of intrinsic two-dimensional ferroelectrics in  $\text{In}_2\text{Se}_3$  and other III2-VI3 van der Waals materials 为题，于4月7日发表在《自然-通讯》[Nature Communications 8, 14956 (2017)]杂志上，论文共同第一作者为博士生丁文隽、朱健保、王喆。

作为具有自发电极化且其极化方向可通过外电场反转的体系，铁电材料在信息存储、场效应器件、感应器件等诸多方面具有广泛的应用价值。对传统铁电材料的研究主要集中在以钙钛矿氧化物为代表的材料体系。然而，当将这类铁电材料通过表面外延生长技术制成薄膜时，由于退极化场的作用，其铁电性在某一临界厚度下多会消失。范德华类层状二维体系是近年来材料研究的热点之一。自2004年首次实验成功得到单层石墨烯以来，目前已有上百种新的二维材料被发现并在实验上合成，它们展现出十分丰富的物理与化学性质，为未来器件的进一步微小化和柔性化提供了新的机遇和材料基础。意外的是，在目前所有已知的二维材料中，尚欠缺具有垂直于二维面铁电极化且单层结构稳定的铁电材料。究其原因，是形成垂直方向电极化所需的对称性破缺与材料的稳定性存在内禀矛盾。因此，在范德华类二维材料体系中寻找具有垂直方向电极化且单层稳定的二维铁电材料是一个具有相当挑战性的科学难题。

针对这一挑战，该团队利用第一性原理计算方法，发现已在自然界存在的层状材料 $\text{In}_2\text{Se}_3$ 的单层即为一种同时具有面内和面外极化的稳定二维铁电材料。对于该材料的结构，以往的实验研究已表明它的室温相具有类似于石墨的层状结构，其中每五个原子层通过共价键组成稳定的二维单元，不同单元之间通过弱的范德华相互作用相结合，因此该材料可以被剥离成很薄甚至单层的二维薄膜，但以往的研究对其单个二维单元内原子的堆积结构并不确定。该研究首先确定了单个二维单元的最稳定结构（如图所示），并发现由于其原子层在垂直于二维面方向分布的不对称性，使其产生一个垂直于二维面的面外自发电极化，且其极化的方向可以通过灵巧的多原子协同运动进行反转。进一步的计算表明，面外方向电极化的反转所需要跨越的能量势垒与常规钙钛矿铁电材料相近，并且可以通过施加一个垂直方向的外电场进一步降低相应的能量势垒、打破原本能量简并的两个极化方向的平衡，驱动体系向某一极化方向转变。此外，由于该稳定结构的单层在面内不具有中心反演对称性，导致其同时存在面内方向的自发电极化，并且其极化的方向与面外极化的方向相互关联，以此有望实现电场与极化方向的交叉耦合调控。在此发现的基础上，进一步预言由与 $\text{In}_2\text{Se}_3$ 同族元素组合而成的化合物，如果可以形成类似的层状结构，其铁电相也将同样成为稳定的基态结构。

此类二维铁电材料的发现有效拓展了二维材料家族的功能性，特别是为调控由多种二维材料组成的多层范德华二维异质结体系的物性提供了新的空间。该研究也通过构建二维铁电材料与其它二维材料组成的双层异质结初步展示了其调控能力。如在 $\text{In}_2\text{Se}_3$ 与 $\text{WSe}_2$ 构成的异质结中，通过外电场对 $\text{In}_2\text{Se}_3$ 电极化方向的反转，可以实现体系从半导体性

到近似金属性的转变（如图所示）；在 $\text{In}_2\text{Se}_3$ 与石墨烯构成的异质结中，通过 $\text{In}_2\text{Se}_3$ 电极化方向的反转，可以改变界面间所形成的肖特基势垒的高度。该类新型材料更多的潜在应用有待于进一步探索与研究。

此项研究得到了国家千人计划、国家自然科学基金委、科技部、中科院和教育部的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/107260.html>