二维材料理论: 材之魂, 料之魄

张助华^{1*}, 邹小龙^{2*}

1. 南京航空航天大学纳米科学研究所, 机械结构力学及控制国家重点实验室, 南京 210016;

2. 清华大学, 清华大学深圳国际研究生院和清华-伯克利深圳学院, 深圳盖姆石墨烯中心, 深圳 518055

* 联系人, E-mail: chuwarzhang@nuaa.edu.cn; xlzou@sz.tsinghua.edu.cn

Theory of two-dimensional materials: The soul of the materials

Zhuhua Zhang^{1*} & Xiaolong Zou^{2*}

¹ State Key Laboratory of Mechanics and Control of Mechanical Structures, Institute of Nano Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China;

² Shenzhen Geim Graphene Center, Tsinghua-Berkeley Shenzhen Institute (TBSI) and Tsinghua Shenzhen International Graduate School, Tsinghua University, Shenzhen 518055, China

* Corresponding authors, E-mail: chuwarzhang@nuaa.edu.cn; xlzou@sz.tsinghua.edu.cn

doi: 10.1360/TB-2020-1618

张助华

南京航空航天大学教授、博士生导师, 曾留学于美国内布拉斯加大学林肯分校和 Rice 大学, 长期从事低维材料的微结构调控、多场耦合行为与器件原理的物理力学研究。

自 2004 年石墨烯问世以来, 单个或数个原子厚度的二维材料迅速赢得了学术界的广泛关注。过去十几年里, 许多“明星”二维材料陆续涌现, 包括具有狄拉克色散关系的石墨烯、宽禁带的氮化硼(也称白石墨烯)、具有直接带隙和旋光选择性的二硫化钼、具有各向异性和高载流子迁移率的黑磷、具有丰富多态性的金属性硼烯, 以及一系列二维磁性材料与二维拓扑材料等。以这些明星材料为基础, 二维材料的研究已从单一元素扩展到多元素融合, 从单层材料发展到范德华异质结, 从层间公度拓展到魔角结构, 可谓百家争鸣。目前已报道的二维材料已达数千种之多, 形成了数量庞大的家族体系, 呈现出了多姿多彩的性能, 也承载着基础研究发展和变革性技术创新的无限潜力。

在二维材料的发展历程中, 理论与计算一直发挥着引领作用。例如, 石墨烯的半金属性研究可追溯至 20 世纪 40 年代, 而氮化硼物性的理论研究在 20 世纪 80、90 年代已经发展得相当成熟。更为重要的是, 随着二维材料研究的不断深入, 试错式的实验研究越来越面临着低效和缺乏依据的挑战。通过理论预测与设计引导实验研究是克服这一挑战的理想途径。首先, 结合第一性原理计算与全局结构搜索算法, 人们可大量预测新的二维材料, 如硼烯、锡烯、砷烯、二维磁性材料等, 并有效促进了它们的实验实现。进一步, 二维材料的奇特性质, 如拓扑物性、铁电性、压电性、扰曲电性质等, 更需要理论与计算的准确预测, 从而针对性引导实验技术的发展与测量。再之, 理论与计算还可模拟二维材料在多物理场耦合作用下的奇异响应, 揭示材料物性随外部相互作用变化的深层机理, 为二维材料的物性设计、功能调控与器件构筑奠定科学基础。由此可见, 如果实验是二维材料研究的躯干, 理论计算则是其灵魂。

虽然二维材料的理论与计算研究不断蓬勃发展, 但仍然面临着诸多挑战。首先, 当前所预测的大部分二维材料的结构和物性依然受制于理论方法的局限性, 而高精度的计算方法又受限于现有计算技术的能力, 这使得理论与实验之间依

邹小龙

清华大学深圳国际研究生院副教授、博士生导师, 于 2011 年获得清华大学凝聚态物理学博士学位, 随后在美国莱斯大学材料科学及纳米工程系从事博士后研究. 主要从事二维材料的电、磁和光的耦合现象的理论研究.

然存在着相当大的鸿沟. 因此, 理论研究者一方面需要发展更有效的计算方法和算法, 另一方面更需紧密结合实验改进模型的可靠性. 例如, 物性导向的逆向材料设计仍缺少高效的算法, 而研究由多体相互作用带来的新奇量子现象也亟需准确的描述方法. 其次, 随着二维材料的研究朝着多物理场耦合、多时空尺度关联和服役环境复杂化等特征发展, 相关结构和物性的描述对现有理论研究提出了挑战. 结合物理、力学等领域的理论与方法, 跨尺度研究基于二维材料的多场复杂体系的物理力学行为和物质-信息-能量关联规律为解决这一挑战提供了可能的思路. 挑战与机遇总是并存. 上述挑战为相关理论研究的持续发展提供了强大的生命力. 高性能计算技术、大数据和机器学习等方面的迅速发展与传统的理论方法随之形成了有效的结合, 为二维材料的理论研究开启了新的发展方向.

为集中体现国内外学者在二维材料理论与计算领域的研究成果, 促进同行间的交流, 《科学通报》组织出版二维材料理论与计算专辑, 邀请了相关领域的十多位优秀学者撰稿, 评述和介绍通过理论与计算研究二维材料结构、物性及其应用的进展. 内容涉及了二维材料生长机理、二维能源转换材料(包括光催化材料、合成氨催化剂和储能材料的筛选与设计)、二维功能材料(包括铁电、铁磁、铁弹以及功能化设计)、广义布洛赫方法描述的应变调控和纳米孔的生物传感应用等. 编者期待通过该专辑的出版, 能够帮助读者了解二维材料理论与计算的研究现状和独特魅力, 激发来自物理、化学、材料和力学等学科的研究者对理论与计算研究的兴趣, 促进学科交叉融合, 最终推动理论计算在二维材料的基础和应用研究中发挥更重要的作用.

本专辑的编辑出版得到了美国波多黎各大学、澳大利亚昆士兰科技大学、中国科学技术大学、清华大学、北京计算科学研究中心、南开大学、东南大学、大连理工大学、南京航空航天大学、南京师范大学、清华大学国际研究生院等单位相关研究组的大力支持. 该专辑的成功出版也离不开审稿人以及编辑部工作人员的竭力相助. 在此, 对他们的辛勤工作一并表示衷心感谢!