二维铁电材料在物理化学领域的应用研究进展

汤笑, 寇良志*

School of Mechanical, Medical and Process Engineering, Queensland University of Technology, Brisbane, QLD 4001, Australia

* 联系人, E-mail: Liangzhi.kou@qut.edu.au

2020-08-31 收稿, 2020-10-17 修回, 2020-11-11 接受, 2020-11-12 网络版发表

摘要 铁电材料作为一种重要的功能材料具有内在的自发极化和外电场可控极化反转特性. 这种电极化不仅使得铁电材料产生内部电场; 极化反转以及双稳极化态这一特性可以用于构建非易失性电子器件. 本文从铁电调控磁性、电子性质、气敏应用以及光催化水分解4个方面介绍二维铁电材料在物理性质调控和化学领域的应用研究进展. 最后, 展望了二维铁电材料在电子器件、能源转化方面的应用前景.

关键词 铁电材料, 极化反转, 磁性调控, 电子性质, 气敏应用, 光解水

铁电材料是在一定温度范围内具有自发极化的功能性材料, 在外电场作用下这类材料的自发极化方向能发生反转. 除此之外, 铁电体还具有压电性、热释电性等效应, 因此在非易失性存储、场效应晶体管、传感器等技术领域有着很广泛的应用前景^[1,2]. 铁电效应最早是在罗息盐(酒石酸钾钠)中发现的, 之后可逆自发极化也在磷酸二氢钾(KDP)、硫酸三甘氨酸(TGS)中被发现, 但是铁电性并不稳定. 因此, 随后对铁电材料的研究主要集中在具有钙钛矿型(ABO_3)的双氧化物中. 在这些 ABO_3 型材料中只有对称性低的材料(如 $BaTiO_3$ 、 $PbTiO_3$)才具有铁电性, 因为阳离子A半径较大, 而阳离子B半径较小, 在一定温度下 O^{2-} 以及位于氧八面体中的B离子会发生相对位移从而产生自发极化. 这类材料热稳定性高, 铁电极化强, 使得铁电材料的应用成为可能. 此外, 如果A位和B位被其他离子占据, 还会形成复合型钙钛矿结构化合物, 例如 $Pb(Zr,Ti)O_3$ 、 $Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$ 等, 也具有优良的铁电性能^[3,4]. 有机聚合物材料(如聚氨酯、聚三氟乙烯等)也是一类重要的铁电体, 并且具有良好的热电效应、光学非线性效应等^[5]. 近年来, 随着器件微型化、集成化趋势的发展,

传统的铁电材料已经不能满足现代设备发展的要求. 因为当这些传统铁电材料的尺寸降为纳米量级时, 会受到表面效应、退极化场、边界条件等因素的影响, 从而导致退极化, 居里温度会随着薄膜厚度的减小而下降, 甚至导致某些材料的铁电性完全消失^[6,7], 所以寻找与探究具有稳定自发极化的高性能低维铁电材料至关重要.

1 二维铁电材料

1.1 二维铁电材料的理论研究进展

随着石墨烯的发现, 二维材料(包括过渡金属硫化物、黑磷、磷烯、氮化硼等)迅速发展^[8]. 在电子器件微型化的大趋势下, 二维材料已成为新型功能材料研究的热门领域. 相对于块体材料, 二维材料具有更为优异的性能, 例如高电子迁移率、大机械强度、高光学透过率等, 使其在电子和微纳机电等领域具有广泛的应用前景^[9,10]. 然而绝大多数二维材料的结构都是对称的, 不具备铁电性^[11,12]. 如何在这些二维材料中设计和制备具有稳定铁电性的材料一直备受关注.

引用格式: 汤笑, 寇良志. 二维铁电材料在物理化学领域的应用研究进展. 科学通报, 2021, 66: 580–590

Tang X, Kou L Z. Progress of two-dimensional ferroelectrics in physical and chemical applications (in Chinese). Chin Sci Bull, 2021, 66: 580–590, doi: 10.1360/TB-2020-1100

二维铁电体的主要实现方法是打破二维材料的结构和电荷分布对称性。例如, Shirodkar和Waghmare^[13]通过第一性原理计算与Landau理论分析相结合, 预测了1T相的单层MoS₂存在垂直于平面的铁电性。这主要是由于Mo原子发生了三聚化, 使得原本中心对称的结构(c1T)转为对称性低的d1T结构。d1T结构中三聚化的Mo原子也早在实验中得到证实^[14]。众所周知, 石墨烯等单元素构成的六角结构中, 由于存在中心反演对称所以不具有铁电性。那么由电负性不同的两种原子(AB)构成的六角单层因对称性的破坏则极有可能成为铁电材料。受这一思路的影响, Di Sante等人^[15]通过密度泛函理论计算发现, AB二元化合物单层(A、B属于第IV主族或III-V主族元素)存在铁电性。这种结构由于具有褶皱从而产生极化, 并且极化方向可以通过弯曲角度的翻转而改变。 β -GeSe虽然也已在实验上被合成, 理论上也预测其具有铁电性, 但是还未在实验上被验证^[16,17]。在一些二维材料中, 离子的移动也会打破整个结构的对称性, 从而产生内极化以及铁电性。以AgBiP₂Se₆单层为例, 如图1(a)所示, 由于Ag⁺和Bi³⁺从中心位置反向发生不同程度的位移, 原本的八面体配位结构发生变形, 整个单层结构从顺电相转为铁电相^[18]。除了预测一些固有铁电性的材料, 将非铁电材料

转换为铁电材料也是一种常用的方法。例如, Wu等人^[22]经过第一性原理计算发现羟基化的石墨烯会产生铁电性。不仅在石墨烯中, 通过一些官能团(-OH、-CH₃、-COOH、-NH₂等)的修饰, 很多原本没有铁电性的二维材料(如锗烯、锡烯、MoS₂)(图1(b))会被诱发产生铁电性^[19]。从极化方向分类来看, 铁电材料主要有两类: 面外和面内铁电体。面外铁电体具有垂直方向上的可翻转电极化, 在实际应用中更易于操控, 更有可能用于器件设计和调控^[23,24]。面内铁电体的极化存在于平面内, 例如第四主族单硫化物MX(M = Ge, Sn; X = S, Se, Te)、 γ -SbX(X=As, P)单层等^[25~27]。此外, 中国科学技术大学Ding等人^[12]还预测在III₂~VI₃(III = Al, Ga, In; VI = S, Se, Te)中两个方向的铁电性可以实现共存。

1.2 二维铁电材料的实验进展

在二维铁电材料理论研究发展的同时, 在实验上也取得了令人欣喜的进展。2016年, Chang等人^[28]利用分子束外延技术成功合成了原子级厚度的SnTe薄膜, 并证实了平面内存在稳定的自发极化。相比于体相, 这种二维材料的铁电转变温度可以显著提高至270 K, 在2~4个原胞厚度时其铁电性甚至可以稳定存在于室温

图 1 (网络版彩色)二维铁电材料结构图。(a) AgBiP₂Se₆单层的铁电相(FE)与顺电相(PE)结构^[18]。Copyright © 2017, the Royal Society of Chemistry。(b) -COOH官能团修饰的MoS₂^[19]。Copyright © 2016, American Chemical Society。(c) CuInP₂S₆的结构^[20]。Copyright © 2016, Springer Nature。(d) In₂Se₃中平面外(OOP)与平面内(IP)铁电极化态^[21]。Copyright © 2018, American Chemical Society

Figure 1 (Color online) The structures of 2D ferroelectric materials. (a) Two ferroelectric phases (FE) and the paraelectric phase (PE) of monolayer AgBiP₂Se₆^[18]。Copyright © 2017, the Royal Society of Chemistry. (b) MoS₂ monolayer functionalized by -COOH^[19]。Copyright © 2016, American Chemical Society. (c) The crystal structure of CuInP₂S₆^[20]。Copyright © 2016, Springer Nature. (d) Out-of-plane (OOP) and in-plane (IP) phase images of In₂Se₃ flake^[21]。Copyright © 2018, American Chemical Society

下, 单层和多层SnS中的面内铁电性也已被证实, 并且还可以在栅极电压驱动下实现对铁电性的调控. SnS是一种具有奇偶相关特性的材料, 一般只有当SnS层数为奇数时, 中心对称才会破坏从而展现出铁电性. 但是有研究发现当层数低于临界值时, 奇数与偶数层都会展现较强的铁电性; 并且通过物理气相沉积的方法可以实现对层数的精确控制^[29-31]. CuInP₂S₆薄膜中的铁电性也在实验上得到证实(图1(c)), 即使薄膜厚度从100 nm降至~4 nm, 铁电性也可以在室温下稳定存在^[20,32]. d1T相MoTe₂单层与In₂Se₃(图1(d))中的铁电性也相继在实验中得到验证^[21,33,34]. 最近, Hu等人^[35]通过机械剥离法获得了B-InSe纳米片并利用多种分析技术进行表征. 该材料在室温下具有稳定的面内与面外自发电极化, 且两个方向的铁电极化是协同产生的. 此外, 金属WTe₂中也观测到了铁电现象, 并且铁电性可以存在于室温条件下, 具有应用于纳米电子的潜力^[36]. 这些实验上的巨大突破不仅将许多理论预测变为现实, 也为二维铁电材料在实际中的应用提供了可能. 铁电体固有的可逆极化方向等价于宏观施加的方向可变的电场, 当与其他材料组成异质结时, 可以预见铁电性质必将对电学、磁学以及化学性能产生明显的调控效果, 这一特殊的性质在器件设计 and 应用方面具有巨大的潜力.

2 铁电材料在物理性质调控方面的应用

从本质上来说, 铁电材料内部的电极化可以等效看成是一个电场, 因此理论上, 铁电翻转非常有望成为一种有效的电调控方法. 虽然外加电场或静电掺杂等方法可以对二维材料的物理性质进行调控, 但是这种调控是易失性的, 一旦撤去电场等外界刺激, 调控后的理想状态就会消失^[37,38]. 与外电场调控不同, 铁电体中极化相反的态是能量简并的双稳态, 因此, 利用铁电材料作为辅助层可以实现非易失性调控, 大大降低能耗. 下面以铁电性对磁性和电子性质的调控为例, 概述铁电材料在物理方面的应用.

2.1 铁电材料对磁性的调控

利用电场调控磁性在实际应用(例如高密度数据存储)中有着非常重要的价值. 在磁性半导体中, 电场可以通过改变载流子浓度来影响磁相互作用^[39]; 在磁性金属中, 电场可以移动费米能级的位置来改变轨道占据和界面处的磁各向异性^[40,41]; 在多铁材料中, 则可以通

过磁电耦合效应来实现电和磁的相互调控^[42,43]. 而将铁电材料运用在信息存储器件中可以有希望实现更低的能耗和更高的存储密度. 很多研究表明铁电材料可以用来调节磁性, 例如在La_{1-x}Sr_xMnO₃/PbTiO₃的界面上, 通过调整极化方向可以改变载流子浓度, 从而调控Mn的自旋排布^[44]. Chen等人^[45]预测在 α -Fe₂O₃/BaTiO₃(001)异质结中可以通过BaTiO₃的电极化反转来调控Fe的磁矩; 铁电材料对磁性调控的有效性已在实验上得到了证实, 例如, 偏二氟乙烯与三氟乙烯形成的铁电聚合物P(VDF-TrFE)可以显著改变Co薄膜的磁各向异性和磁畴^[46,47]. 在Fe/BaTiO₃体系中, BaTiO₃的极化方向可调控Fe的磁性, 在界面处可以作为Fe的磁性开关^[48]. 但这些发现主要集中在铁电聚合物或者块体铁电材料中, 限制了其在纳米级电子器件中的发展. 近年来, 二维铁电材料对磁性的调控取得了很大进展. Gong等人^[49]通过第一性原理计算发现, 在由铁磁性Cr₂Ge₂Te₆和铁电性In₂Se₃构成的异质结中, 由于表面杂化存在很强的磁电耦合效应, 如果将In₂Se₃从极化向上反转为极化向下, In₂Se₃的能带将发生整体下移而增强其与Cr₂Ge₂Te₆的杂化, 从而可以改变Cr₂Ge₂Te₆在平面内与平面外的磁晶各向异性(图2(a)). 对于二维铁磁体, 这种磁各向异性的变化可以看作有限温度下铁磁序的开关, 这种异质结在磁存储中有着应用前景. 通过铁电层不仅可以影响相邻铁磁层的磁晶各向异性, 还可以调控铁磁材料的磁基态以及双层铁磁材料之间的磁耦合. Sun等人^[51]通过第一性原理计算发现在FeI₂/In₂Se₃组成的多铁体中, 极化翻转可以将FeI₂由铁磁转变为反铁磁, 这可能主要是通过改变Fe的价态(Fe²⁺/Fe³⁺)进而调控过渡金属原子之间的相互交换作用来实现的. Lu等人^[50]理论上预测了在CrI₃/Sc₂CO₂异质结中, 通过翻转Sc₂CO₂垂直于平面的极化方向可以显著改变异质结的能带排列, 进而改变双层CrI₃磁耦合(图2(b)). 当Sc₂CO₂的极化向下时, 异质结形成type-II能带排列, 价带顶和导带底的贡献分别来源于Sc₂CO₂和双层CrI₃. 但当极化翻转时, 价带顶和导带底接触导致带隙消失形成type-III能带排列, 促进了Sc₂CO₂和CrI₃之间的电子转移及电子掺杂, 从而将双层CrI₃从反铁磁转变为铁磁. 除此之外, 理论上铁电材料还可以通过改变d轨道的占据来调节磁性分子的磁矩. 以过渡金属卟啉分子(MPz)为例, 当这些分子吸附在In₂Se₃表面时, 极化方向的反转可以改变MPz与In₂Se₃之间的电荷转移, 从而通过改变过渡金属原子d轨道的占据来达到调控磁矩的目的^[52]. 目

图2 (网络版彩色)铁电材料的自发极化对电子性质的调控。(a) $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6/\text{In}_2\text{Se}_3$ 异质结^[49]。Copyright © 2019, Springer Nature. (b) 双层 $\text{CrI}_3/\text{Sc}_2\text{CO}_2$ 异质结^[50]。Copyright © 2020, American Chemical Society. In_2Se_3 /石墨烯(c)和 $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{WSe}_2$ (d)异质结及电子结构^[12]。Copyright © 2017, Springer Nature

Figure 2 (Color online) The effect of ferroelectric polarization on electronic properties. (a) $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6/\text{In}_2\text{Se}_3$ heterostructure^[49]. Copyright © 2019, Springer Nature. (b) 2L- $\text{CrI}_3/\text{Sc}_2\text{CO}_2$ heterostructure^[50]. Copyright © 2020, American Chemical Society. In_2Se_3 /graphene (c) and $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{WSe}_2$ (d) heterostructure and corresponding electronic properties^[12]. Copyright © 2017, Springer Nature

前, 研究报道的大部分为实现铁电调磁而设计的异质结, 由于异质结的磁性层是未完全占据d轨道的过渡金属导致, 因此铁电对磁性的调控是通过改变d轨道能级和占据实现的。虽然利用铁电极化来调控磁性的应用潜力在理论和实验上得到证实, 但是利用二维铁电材料来实现这一目的目前只是处于理论预测阶段。

2.2 铁电材料对电子性质的影响

由于空间反演对称性的破坏, 铁电材料的两个表面存在电势差。当其他材料与铁电材料不同的极化面接触时, 会产生不同的能带对齐方式, 电子转移量也有差异。因此铁电材料的极化反转也会对相邻材料的电子性质产生影响。以 In_2Se_3 为例, 当石墨烯吸附在 In_2Se_3 不同的极化表面时, 肖特基势垒将发生改变。如图2(c)所示, 当 In_2Se_3 的极化方向指向石墨烯时, 石墨烯的狄拉克锥相对于费米能级的移动并不明显; 但当极化方向翻转时, In_2Se_3 与石墨烯之间的电子转移明显增加, 石墨烯的狄拉克锥将向费米能级以上移动, 形成P型掺杂^[12,53]。基于这种有效的调控方式, Wan等人^[54]将石墨烯与 In_2Se_3 分别作为导电沟道和栅极介质应用于铁电场效应晶体管中, 经过 10^5 次写入-擦除后, 回滞曲线仍能保持稳定。除了调控和改进石墨烯的性能, 铁电材料还可以对半导体的电子性质进行调控。例如, 在 WSe_2 和 In_2Se_3 构成的异质结中, In_2Se_3 的铁电性可以显著改变体系的带隙(图2(d))^[12]。Zhao等人^[55]预测 Sc_2CO_2 的铁电翻转可以使 CrI_3 由铁磁半导体转变为半金属, 为高密度

数据存储提供了平台。

相比传统铁电材料(大部分是钙钛矿薄膜), 原子尺度的二维材料厚度很小, 很多甚至可达到单层原子厚度, 两侧非对称的电势差会导致非常大的极化强度, 从而使得电子结构调控成为可能。另一方面, 传统的铁电材料大多是带隙较大、迁移率较低的绝缘体, 而二维铁电材料中有很多带隙窄、迁移率高的半导体, 为新型高效的数据读写方式提供了平台^[6,19]。此外, 在铁电与铁磁等构成的二维多铁材料中还可能产生磁电耦合, 可以提高材料的功能性。

3 铁电材料在化学方面的应用

铁电材料的可逆极化方向不仅可以调控相邻材料的物理性质, 还会对材料的表面活性产生影响。1952年, Parravano^[56]首次研究了这种铁电材料对表面化学的影响, 发现CO在 NaNbO_3 、 KNbO_3 以及 LaFeO_3 这些铁电性基底上的催化氧化速率在居里温度附近发生异常。Inoue等人^[57,58]探究了CO在Pd负载的 LiNbO_3 不同极化面上氧化速率的变化, 以及NiO沉积在 LiNbO_3 相反的极化面上时对 H_2 和CO吸附的影响。

之后, 理论上和实验上的很多工作都证实了铁电性不仅可以对分子的吸附、脱附产生影响, 还可以提高表面催化活性^[59-61]。铁电材料在光催化领域也取得了许多进展。早在1986年, Inoue等人^[62]研究了在锆钛酸铅上的光辅助水分解现象, 结果表明在正极化表面上形成 H_2 的活性高于负极化面10~40倍。潜在原因主要

是极化引起的能带弯曲将促进电子-空穴对的分离, 根据极化方向不同, 电子或空穴聚集在表面上, 因此当极化方向为正时, 有利于电子迁移至表面促进析氢反应的发生^[63]. 但这些研究绝大部分是基于 ABO_3 钙钛矿型复合氧化物, 而对二维铁电材料在分子吸附和反应活性方向的研究相对较少.

3.1 二维铁电材料对气体吸附的调控

二维材料由于一般只有一个或几个原子层厚度, 表面积大并且活性位点多, 所以在气体捕获和传感等方面有着非常大的用途^[64]. 相较于普通的二维材料, 具有内部电极化的二维材料会诱发产生具有正负电荷的表面, 例如在Janus过渡金属硫化物中, 由于垂直于平面的对称性破坏而产生的内部极化会导致在上下表面存在电势差, 因此当气体吸附在不同表面时电子转移量与吸附强度不同, 有望用于高性能的气敏材料^[65]. 但是这些材料的极化方向无法反转, 所以无法实现可逆性的吸附与脱附. 虽然有研究表明通过外加电场可以调控气体分子的吸附与脱附^[66,67], 但是精确地将电场作用在纳米级的范围是非常具有挑战性, 而且这也是一个能量损耗的过程. 为了克服这些缺点, 我们尝试探索二维铁电体作为气敏材料. 因为在铁电材料中两个方向完全相反的极化态能量是简并的, 并且可以在外加电场下实现迅速转换. 另一方面, 即使撤去外加电场, 极化仍能保持, 避免了持续的能耗. 实验上很多的探究已经证实了铁电材料的极化方向会对分子的吸附强度等产生影响. 例如, Yun和Altman^[68]通过升温脱附技术发现, 当极性分子乙酸和2-丙醇与 $\text{LiNbO}_3(0001)$ 作用时, 正极化面上的吸附远远强于负极化面. 此外,

H_2O 、 CH_3OH 等极性分子与 $\text{LiNbO}_3(0001)$ 的相互作用也会受到铁电极化的影响^[69]. 因为 H_2O 与 CH_3OH 吸附在表面时是通过氧原子与表面的阳离子相互作用的. 这种相互作用会在表面极化电荷的影响下发生改变, 在正电荷聚集的表面吸附更强. 当 CH_3OH 吸附在 BaTiO_3 上时, 即使极化方向不会对吸附能产生明显影响, 也会改变黏附系数或者吸附速率常数. 通过铁电极化来调控吸附质的吸附强度对于催化反应也有非常重要的意义. 根据Sabatier原则, 吸附剂与反应物种之间的作用不能太强也不能太弱. 因为如果吸附太强, 产物难以脱附, 会造成催化活性位点被毒化, 不利于后续反应的发生; 若作用太弱, 反应物种难以与催化剂结合, 也会影响反应效率. 而在铁电极化表面上, 则可以利用极化方向的改变来控制表面电荷分布等, 从而实现对吸附强度的控制. 例如 PbTiO_3 -Pt薄膜中, 由于 PbTiO_3 基底极化方向的改变可以显著改变 CO 、 O 、 C 、 N 等的化学吸附能, 从而改变 CO 、 O_2 、 N_2 和 NO 的解离路径^[70]. 同样通过铁电极化对吸附强度的调控, 基于 PbTiO_3 的 CrO_2 单层可以实现 NO_x 直接分解与 CO 的氧化, 避免了氧和硫的毒化^[71]. 这种方法还可以拓展到很多化学反应中, 因此在很多领域都有着广泛的应用前景. 二维材料一般只有一个或几个原子层的厚度, 因此相较这些块体材料对极化方向更为敏感. 通过理论计算发现 NH_3 、 NO 、 NO_2 吸附在具有铁电性的 In_2Se_3 表面时, 吸附强度、电子转移等受到极化方向的影响(图3(a)). 根据分析结果, 这些气体在上下极化表面的吸附情况不同主要是因为气体分子与 In_2Se_3 不同表面的电势差不同, 并且由于 In_2Se_3 内部的电极化, 使得气体分子的前线分子轨道与 In_2Se_3 能带边缘之间转移电子的方式不

图3 (网络版彩色)铁电材料的自发极化对气体吸附的调控. (a) NH_3 、 NO 、 NO_2 在 In_2Se_3 不同极化表面的吸附构型和吸附能; (b) NH_3 、 NO 、 NO_2 前线分子轨道与 In_2Se_3 的能带排列^[72]. Copyright © 2020, the Royal Society of Chemistry

Figure 3 (Color online) The effect of ferroelectric polarization on gas adsorption. (a) Adsorption configurations and corresponding adsorption energies of NH_3 , NO , and NO_2 on In_2Se_3 monolayer with opposite polarizations; (b) band alignments between the frontier molecular orbitals of gases and band edge states of In_2Se_3 with different polarization directions^[72]. Copyright © 2020, the Royal Society of Chemistry

同(图3(b)). 由于铁电材料本身也具有压电性, 应变也是调控极化的一种有效方法. 所以尝试对 In_2Se_3 施加应力, 结果证实应变也可以使能带边缘发生移动, 从而改变能带对齐方式和电子转移, 最终对气体的吸附产生影响. 我们发现这些气体不仅在上下极化面的吸附强度不同, 克服一定的能垒后还能实现吸附和脱附. 以 NH_3 为例, 当其吸附在极化向下的 In_2Se_3 表面时, 吸附强度较强, 属于化学吸附, 只需要克服约0.11 eV的能垒就能翻转极化方向继而实现脱附; 而从脱附到吸附的过程则只需要克服约0.05 eV的能垒^[72]. 所以在实际应用中, 铁电材料很有可能实现气体的可逆性吸附与脱附, 为解决环境问题提供可行的方法.

3.2 二维铁电材料在光解水中的应用

光催化作为一种新兴的绿色方式, 可以将太阳能直接转化为化学能, 不对环境产生污染. 特别是光解水, 它可以将水直接转化为高附加值的化学燃料氢气和氧气, 正在成为一种有广泛应用前景和吸引力的技术^[73]. 由于内部极化的存在, 铁电材料在光电催化领域的应用也很有优势. 例如当铁电材料受到光激发时, 产生的电子-空穴对将在内部极化的驱动下有效分离, 并能快速迁移至材料表面进行氧化还原反应, 从而降低复合率, 提高光催化活性和光电转化效率^[74,75]. 此外, 铁电材料还将在两个表面产生不同的真空能级差, 从而使氧化还原电位发生移动^[76]. 铁电材料在光催化领域优势已经得到证实^[77,78]. 二维铁电材料在该领域的探索也取得了一些进展. 下面以光解水为例展示二维

铁电材料在光催化中的研究成果. 2018年, Fu等人^[76]预测二维铁电材料 M_2X_3 ($\text{M} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}; \text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$)中由于内部垂直方向电场的存在, 上下极化面上会存在真空能级差, 将引起 H^+/H_2 和 $\text{H}_2\text{O}/\text{O}_2$ 氧化还原电势的移动(图4(a)). 此外, 上下极化面之间电势差的存在使光激发产生的电子和空穴将分别聚集在不同的表面, 从而分别与水反应产生氢气和氧气. 另一方面, 由于价带与导带分布在不同的表面, 可以抑制载流子的复合. 其中, In_2Te_3 虽然只有1.14 eV的带隙, 仍可以吸收红外光实现水分解, 不仅打破了传统意义上光催化剂带隙必须至少达到1.23 eV的限制, 并且太阳能转氢能的效率达到了32.1%. 但是由于反应的进行, 质子和氢氧根离子也会渐渐聚集在催化剂表面, 材料内部电场减弱并最终消失, 这将导致电子-空穴对在迁移至催化剂表面之前就发生快速复合, 从而降低催化效率. 想要恢复材料的内部电极化, 需要通过施加脉冲电场或超声处理等方式将质子和氢氧根离子从表面移除来恢复铁电性和催化活性^[80].

除了二维 M_2X_3 材料, 另外一种铁电材料 $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$ 也已经被理论和实验证明了在光催化水分解上的潜能. 2017年, Xu等人^[18]预测 $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$ 单层具有平面外电极化的铁电半导体及其具有光催化水分解的可能, 但是这种推测只是基于简单的光吸收和能带分析, 并没有进行深入的分析. 最近, Ju等人^[79]系统地研究了 $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$ 的光学吸收、能带对齐(图4(b), (c))、能量转化效率等, 并分析了铁电性对水分子吸附和光激发载流子的影响, 确认了其在光催化水分解中的潜力. 他们还探索

图 4 (网络版彩色)铁电材料的自发极化对光催化水分解的影响. (a) M_2X_3 ($\text{M} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}; \text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$)单层的能带结构和能带边缘位置^[76]. Copyright © 2018, American Chemical Society. $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$ 单层顺电相(b)与铁电相(c)的能带边缘位置及其价带顶与导带底的电荷分布^[79]. Copyright © 2018, American Chemical Society
Figure 4 (Color online) The effect of ferroelectric polarization on photocatalytic water splitting. (a) Band structures and band edge positions for M_2X_3 monolayers^[76]. Copyright © 2018, American Chemical Society. Band-edge positions and charge distributions for paraelectric (b) and ferroelectric (c) $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$ monolayers^[79]. Copyright © 2020, American Chemical Society

了光催化水分解中 $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$ 铁电相和顺电相的内在影响,结果表明太阳能的转化效率可以从顺电相的6.66%增加到铁电相的10.04%,这是因为铁电具有更高的载流子利用率.对于顺电相,如图4(b)所示,价带顶和导带底都均匀地分布在上表面和下表面,使得析氧反应和析氢反应在两表面具有相同的反应性.相反,对于铁电相,价带顶和导带底主要分布在上表面或下表面(图4(c)),有效地减少了载流子复合,增加了光催化效率.通过对光催化水分解能力的分析表明顺电相具有更强的还原性,而铁电相具有更强的氧化性.因此,在 $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$ 单层中,可以通过调节铁电相和顺电相来调控反应路径.虽然目前实验上取得的进展主要还是基于钙钛矿型的铁电体,但是随着二维铁电材料的发展,一定会在光解水等光催化领域发挥举足轻重的作用^[81,82].

4 展望

二维铁电材料由于具有可逆的自发极化,使其可以被用作调控物理和化学性质.本文从4个方面介绍了二维铁电材料的研究情况:铁电调控磁性、电子性质、可逆气敏调控以及光催化水分解.这些工作使我们更加确定具有自发极化和外电场可控反转特性的二维铁电材料非常有望用于可控性的应用研究.但是,目前合成出来的二维铁电材料种类非常少,限制了对它的广泛而深入的研究.二维铁电体在器件设计 and 应用方面的潜力依赖于室温下能稳定存在的二维铁电材料.另一方面,目前对铁电材料的应用研究主要还是基于

ABO_3 钙钛矿型复合氧化物.例如,石墨烯/锆钛酸铅异质结可用于铁电场效应晶体管,介电常数较大的铁电材料不仅可以增强对石墨烯中载流子浓度的调控,还可以改进石墨烯的功能.但是二维铁电材料在电子器件,例如贴电场效应晶体管、非易失性存储方面的研究还处于初级阶段.多层铁电材料之间的相互作用、应变、温度、光照、空气分子等对铁电材料极化强度以及在电子器件中的影响都有待研究.从化学的角度来看,与可逆气体吸附以及水分解类似,通过电极化的翻转,二维材料的铁电性还可以被用于可逆的氢气储存,可逆的 CO_2 捕获和可控的催化反应如 CO_2 还原反应和固氮反应,从而成为一个反应开关.目前,对铁电材料的探究主要集中于面外铁电体,对于具有面内极化的铁电材料研究较少.虽然面外的自发极化应用更为广泛,但是面外铁电性的可持续性一直是一个长期存在的科学难题.相比之下,面内铁电材料的自发极化发生在平面内,因此不会受到材料厚度的影响.现在已有一些研究开始关注这种平面内的自发电极化,这类材料在铁电光伏、光探测、突触装置等领域的应用潜力也正在被发掘,期待平面内的铁电极化可以得到更为广泛的应用.如上所述,由于目前实验上合成出来的二维铁电材料非常有限,大大限制了人们对二维铁电材料在物理和化学等方面的应用研究.然而这个方向带来的学术和应用前景是十分巨大的.我们认为,本文不仅会增加研究人员对可控物理变化和化学反应的研究兴趣,还会加快探索它们在纳米器件、催化等领域的应用.

参考文献

- 1 Lu H, Bark C W, Esque de los Ojos D, et al. Mechanical writing of ferroelectric polarization. *Science*, 2012, 336: 59–61
- 2 Scott J F. Applications of modern ferroelectrics. *Science*, 2007, 315: 954–959
- 3 Valasek J. Piezo-electric and allied phenomena in Rochelle salt. *Phys Rev*, 1921, 17: 475–481
- 4 Rabe K M, Dawber M, Lichtensteiger C, et al. Modern physics of ferroelectrics: Essential background. In: Rabe K M, Ahn C H, Triscone J M, eds. *Physics of Ferroelectrics*. Berlin: Springer, 2007. 1–30
- 5 Bune A V, Fridkin V M, Ducharme S, et al. Two-dimensional ferroelectric films. *Nature*, 1998, 391: 874–877
- 6 Junquera J, Ghosez P. Critical thickness for ferroelectricity in perovskite ultrathin films. *Nature*, 2003, 422: 506–509
- 7 Lee D, Lu H, Gu Y, et al. Emergence of room-temperature ferroelectricity at reduced dimensions. *Science*, 2015, 349: 1314–1317
- 8 Novoselov K S, Geim A. The rise of graphene. *Nat Mater*, 2007, 6: 183–191
- 9 Geim A K, Novoselov K S. The rise of graphene. In: Rinaldi G, ed. *Nanoscience and Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals*. Singapore: World Scientific, 2010. 11–19
- 10 Mas-Ballesté R, Gómez-Navarro C, Gómez-Herrero J, et al. 2D materials: To graphene and beyond. *Nanoscale*, 2011, 3: 20–30
- 11 Guan Z, Hu H, Shen X, et al. Recent progress in two-dimensional ferroelectric materials. *Adv Electron Mater*, 2020, 6: 1900818
- 12 Ding W, Zhu J, Wang Z, et al. Prediction of intrinsic two-dimensional ferroelectrics in In_2Se_3 and other III2-VI3 van der Waals materials. *Nat Commun*, 2017, 8: 14956
- 13 Shirodkar S N, Waghmare U V. Emergence of ferroelectricity at a metal-semiconductor transition in a 1T monolayer of MoS_2 . *Phys Rev Lett*, 2014,

- 112: 157601
- 14 Wypych F, Weber T, Prins R. Scanning Tunneling microscopic investigation of 1T-MoS₂. *Chem Mater*, 1998, 10: 723–727
- 15 Di Sante D, Stroppa A, Barone P, et al. Emergence of ferroelectricity and spin-valley properties in two-dimensional honeycomb binary compounds. *Phys Rev B*, 2015, 91: 161401
- 16 von Rohr F O, Ji H, Cevallos F A, et al. High-pressure synthesis and characterization of β -GeSe—A six-membered-ring semiconductor in an uncommon boat conformation. *J Am Chem Soc*, 2017, 139: 2771–2777
- 17 Guan S, Liu C, Lu Y, et al. Tunable ferroelectricity and anisotropic electric transport in monolayer β -GeSe. *Phys Rev B*, 2018, 97: 144104
- 18 Xu B, Xiang H, Xia Y, et al. Monolayer AgBiP₂Se₆: An atomically thin ferroelectric semiconductor with out-plane polarization. *Nanoscale*, 2017, 9: 8427–8434
- 19 Wu M, Dong S, Yao K, et al. Ferroelectricity in covalently functionalized two-dimensional materials: Integration of high-mobility semiconductors and nonvolatile memory. *Nano Lett*, 2016, 16: 7309–7315
- 20 Liu F, You L, Seyler K L, et al. Room-temperature ferroelectricity in CuInP₂S₆ ultrathin flakes. *Nat Commun*, 2016, 7: 12357
- 21 Cui C, Hu W J, Yan X, et al. Intercorrelated in-plane and out-of-plane ferroelectricity in ultrathin two-dimensional layered semiconductor In₂Se₃. *Nano Lett*, 2018, 18: 1253–1258
- 22 Wu M, Burton J D, Tsybmal E Y, et al. Hydroxyl-decorated graphene systems as candidates for organic metal-free ferroelectrics, multiferroics, and high-performance proton battery cathode materials. *Phys Rev B*, 2013, 87: 081406
- 23 Li L, Wu M. Binary compound bilayer and multilayer with vertical polarizations: Two-dimensional ferroelectrics, multiferroics, and nanogenerators. *ACS Nano*, 2017, 11: 6382–6388
- 24 Chandrasekaran A, Mishra A, Singh A K. Ferroelectricity, antiferroelectricity, and ultrathin 2D electron/hole gas in multifunctional monolayer MXene. *Nano Lett*, 2017, 17: 3290–3296
- 25 Fei R, Kang W, Yang L. Ferroelectricity and phase transitions in monolayer group-IV monochalcogenides. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 097601
- 26 Yin H, Liu C, Zheng G P, et al. *Ab initio* simulation studies on the room-temperature ferroelectricity in two-dimensional β -phase GeS. *Appl Phys Lett*, 2019, 114: 192903
- 27 Shen S, Liu C, Ma Y, et al. Robust two-dimensional ferroelectricity in single-layer γ -SbP and γ -SbAs. *Nanoscale*, 2019, 11: 11864–11871
- 28 Chang K, Liu J, Lin H, et al. Discovery of robust in-plane ferroelectricity in atomic-thick SnTe. *Science*, 2016, 353: 274–278
- 29 Kwon K C, Zhang Y, Wang L, et al. In-plane ferroelectric tin monosulfide and its application in a ferroelectric analog synaptic device. *ACS Nano*, 2020, 14: 7628–7638
- 30 Higashitaramizu N, Kawamoto H, Lee C J, et al. Purely in-plane ferroelectricity in monolayer SnS at room temperature. *Nat Commun*, 2020, 11: 2428
- 31 Bao Y, Song P, Liu Y, et al. Gate-tunable in-plane ferroelectricity in few-layer SnS. *Nano Lett*, 2019, 19: 5109–5117
- 32 Belianinov A, He Q, Dziazgys A, et al. CuInP₂S₆ room temperature layered ferroelectric. *Nano Lett*, 2015, 15: 3808–3814
- 33 Yuan S, Luo X, Chan H L, et al. Room-temperature ferroelectricity in MoTe₂ down to the atomic monolayer limit. *Nat Commun*, 2019, 10: 1775
- 34 Zhou Y, Wu D, Zhu Y, et al. Out-of-plane piezoelectricity and ferroelectricity in layered α -In₂Se₃ nanoflakes. *Nano Lett*, 2017, 17: 5508–5513
- 35 Hu H, Sun Y, Chai M, et al. Room-temperature out-of-plane and in-plane ferroelectricity of two-dimensional β -InSe nanoflakes. *Appl Phys Lett*, 2019, 114: 252903
- 36 Fei Z, Zhao W, Palomaki T A, et al. Ferroelectric switching of a two-dimensional metal. *Nature*, 2018, 560: 336–339
- 37 Huang B, Clark G, Klein D R, et al. Electrical control of 2D magnetism in bilayer CrI₃. *Nat Nanotechnol*, 2018, 13: 544–548
- 38 Jiang S, Li L, Wang Z, et al. Controlling magnetism in 2D CrI₃ by electrostatic doping. *Nat Nanotechnol*, 2018, 13: 549–553
- 39 Matsukura F, Tokura Y, Ohno H. Control of magnetism by electric fields. *Nat Nanotechnol*, 2015, 10: 209–220
- 40 Nakamura K, Shimabukuro R, Fujiwara Y, et al. Giant modification of the magnetocrystalline anisotropy in transition-metal monolayers by an external electric field. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 187201
- 41 Nakamura K, Akiyama T, Ito T, et al. Role of an interfacial FeO layer in the electric-field-driven switching of magnetocrystalline anisotropy at the Fe/MgO interface. *Phys Rev B*, 2010, 81: 220409
- 42 Taniyama T. Electric-field control of magnetism via strain transfer across ferromagnetic/ferroelectric interfaces. *J Phys-Condens Matter*, 2015, 27: 504001
- 43 Eerenstein W, Mathur N D, Scott J F. Multiferroic and magnetoelectric materials. *Nature*, 2006, 442: 759–765
- 44 Chen H, Ismail-Beigi S. Ferroelectric control of magnetization in La_{1-x}Sr_xMnO₃ manganites: A first-principles study. *Phys Rev B*, 2012, 86: 024433
- 45 Chen D, Zhang G, Sun W, et al. Tuning the magnetism of two-dimensional hematene by ferroelectric polarization. *Phys Chem Chem Phys*, 2019, 21: 12301–12309
- 46 Mardana A, Ducharme S, Adenwalla S. Ferroelectric control of magnetic anisotropy. *Nano Lett*, 2011, 11: 3862–3867

- 47 Huang Z, Stolichnov I, Bernard-Mantel A, et al. Ferroelectric control of magnetic domains in ultra-thin cobalt layers. *Appl Phys Lett*, 2013, 103: 222902
- 48 Asa M, Baldrati L, Rinaldi C, et al. Electric field control of magnetic properties and electron transport in BaTiO₃-based multiferroic heterostructures. *J Phys-Condens Matter*, 2015, 27: 504004
- 49 Gong C, Kim E M, Wang Y, et al. Multiferroicity in atomic van der Waals heterostructures. *Nat Commun*, 2019, 10: 2657
- 50 Lu Y, Fei R, Lu X, et al. Artificial multiferroics and enhanced magnetoelectric effect in van der Waals heterostructures. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2020, 12: 6243–6249
- 51 Sun W, Wang W, Chen D, et al. Valence mediated tunable magnetism and electronic properties by ferroelectric polarization switching in 2D FeI₂/In₂Se₃ van der Waals heterostructures. *Nanoscale*, 2019, 11: 9931–9936
- 52 Tang X, Shang J, Ma Y, et al. Tuning magnetism of metal porphyrine molecules by ferroelectric In₂Se₃ monolayer. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2020, 12: 39561–39566
- 53 Ayadi T, Debbichi L, Badawi M, et al. An *ab initio* study of the ferroelectric In₂Se₃/graphene heterostructure. *Physica E*, 2019, 114: 113582
- 54 Wan S, Li Y, Li W, et al. Nonvolatile ferroelectric memory effect in ultrathin α -In₂Se₃. *Adv Funct Mater*, 2019, 29: 1808606
- 55 Zhao Y, Zhang J, Yuan S, et al. Nonvolatile electrical control and heterointerface-induced half-metallicity of 2D ferromagnets. *Adv Funct Mater*, 2019, 29: 1901420
- 56 Parravano G. Ferroelectric transitions and heterogeneous catalysis. *J Chem Phys*, 1952, 20: 342–343
- 57 Inoue Y, Sato K, Hayashi O. Adsorptive properties of semiconducting thin NiO and TiO₂ films combined with an oppositely polarized ferroelectric support. *J Chem Soc*, 1987, 83: 3061–3068
- 58 Inoue Y, Yoshioka I, Sato K. Polarization effects upon adsorptive and catalytic properties. 1. Carbon monoxide oxidation over palladium deposited on lithium niobate (LiNbO₃) ferroelectrics. *J Phys Chem*, 1984, 88: 1148–1151
- 59 Yun Y, Kampschulte L, Li M, et al. Effect of ferroelectric poling on the adsorption of 2-propanol on LiNbO₃ (0001). *J Phys Chem C*, 2007, 111: 13951–13956
- 60 Li D, Zhao M H, Garra J, et al. Direct *in situ* determination of the polarization dependence of physisorption on ferroelectric surfaces. *Nat Mater*, 2008, 7: 473–477
- 61 Ji W, Yao K, Lim Y F, et al. Epitaxial ferroelectric BiFeO₃ thin films for unassisted photocatalytic water splitting. *Appl Phys Lett*, 2013, 103: 062901
- 62 Inoue Y, Sato K, Sato K, et al. Photoassisted water decomposition by ferroelectric lead zirconate titanate ceramics with anomalous photovoltaic effects. *J Phys Chem*, 1986, 90: 2809–2810
- 63 Kakekhani A, Ismail-Beigi S, Altman E I. Ferroelectrics: A pathway to switchable surface chemistry and catalysis. *Surf Sci*, 2016, 650: 302–316
- 64 Tang X, Du A, Kou L. Gas sensing and capturing based on two-dimensional layered materials: Overview from theoretical perspective. *WIREs Comput Mol Sci*, 2018, 8: e1361
- 65 Jin C, Tang X, Tan X, et al. A Janus MoSSe monolayer: A superior and strain-sensitive gas sensing material. *J Mater Chem A*, 2019, 7: 1099–1106
- 66 Yue Q, Shao Z, Chang S, et al. Adsorption of gas molecules on monolayer MoS₂ and effect of applied electric field. *Nanoscale Res Lett*, 2013, 8: 425
- 67 Zhou J, Wang Q, Sun Q, et al. Electric field enhanced hydrogen storage on polarizable materials substrates. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2010, 107: 2801–2806
- 68 Yun Y, Altman E I. Using ferroelectric poling to change adsorption on oxide surfaces. *J Am Chem Soc*, 2007, 129: 15684–15689
- 69 Garra J, Vohs J, Bonnell D. The effect of ferroelectric polarization on the interaction of water and methanol with the surface of LiNbO₃(0001). *Surface Sci*, 2009, 603: 1106–1114
- 70 Kolpak A M, Grinberg I, Rappe A M. Polarization effects on the surface chemistry of PbTiO₃-supported Pt films. *Phys Rev Lett*, 2007, 98: 166101
- 71 Kakekhani A, Ismail-Beigi S. Ferroelectric-based catalysis: Switchable surface chemistry. *ACS Catal*, 2015, 5: 4537–4545
- 72 Tang X, Shang J, Gu Y, et al. Reversible gas capture using a ferroelectric switch and 2D molecule multiferroics on the In₂Se₃ monolayer. *J Mater Chem A*, 2020, 8: 7331–7338
- 73 Maeda K, Domen K. Photocatalytic water splitting: Recent progress and future challenges. *J Phys Chem Lett*, 2010, 1: 2655–2661
- 74 Giocondi J L, Rohrer G S. Spatially selective photochemical reduction of silver on the surface of ferroelectric barium titanate. *Chem Mater*, 2001, 13: 241–242
- 75 Shi J, Zhao P, Wang X. Piezoelectric-polarization-enhanced photovoltaic performance in depleted-heterojunction quantum-dot solar cells. *Adv Mater*, 2013, 25: 916–921
- 76 Fu C F, Sun J, Luo Q, et al. Intrinsic electric fields in two-dimensional materials boost the solar-to-hydrogen efficiency for photocatalytic water splitting. *Nano Lett*, 2018, 18: 6312–6317
- 77 Grinberg I, West D V, Torres M, et al. Perovskite oxides for visible-light-absorbing ferroelectric and photovoltaic materials. *Nature*, 2013, 503:

509–512

- 78 Yuan Y, Xiao Z, Yang B, et al. Arising applications of ferroelectric materials in photovoltaic devices. *J Mater Chem A*, 2014, 2: 6027–6041
- 79 Ju L, Shang J, Tang X, et al. Tunable photocatalytic water splitting by the ferroelectric switch in a 2D AgBiP₂Se₆ monolayer. *J Am Chem Soc*, 2019, 142: 1492–1500
- 80 Li X, Li Z, Yang J. Proposed photosynthesis method for producing hydrogen from dissociated water molecules using incident near-infrared light. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 018301
- 81 Su R, Hsain H A, Wu M, et al. Nano-ferroelectric for high efficiency overall water splitting under ultrasonic vibration. *Angew Chem Int Ed*, 2019, 58: 15076–15081
- 82 Song J, Kim T L, Lee J, et al. Domain-engineered BiFeO₃ thin-film photoanodes for highly enhanced ferroelectric solar water splitting. *Nano Res*, 2018, 11: 642–655

Summary for “二维铁电材料在物理化学领域的应用研究进展”

Progress of two-dimensional ferroelectrics in physical and chemical applications

Xiao Tang & Liangzhi Kou*

*School of Mechanical, Medical and Process Engineering, Queensland University of Technology, Brisbane, QLD 4001, Australia** Corresponding author, E-mail: liangzhi.kou@qut.edu.au

Ferroelectric materials are intriguing and technologically useful because the spontaneous electric polarization is electrically switchable, leading to fascinating properties and wide range of applications such as field effect transistor, non-volatile memories and sensors. In general, the emergence of ferroelectricity requires an asymmetric structure. Previous studies of ferroelectrics have mainly focused on ABO_3 perovskite compounds such as $BaTiO_3$, $PbTiO_3$. For technological demands, the size of the devices is decreasing dramatically that conventional ferroelectric materials will suffer from many constraints at nanoscale. For example, when the thickness of ABO_3 film falls below a critical value, the ferroelectricity would probably disappear. Therefore, it is essential to search for the low-dimensional materials with stable ferroelectricity. Atomically thin two-dimensional (2D) materials which exhibit abundant electronic, optical and mechanical properties would be ideal candidates and a variety of 2D ferroelectric materials have been proposed accordingly. The first part of this article reviews the recent theoretical and experimental progress of 2D ferroelectric materials. In contrast to conventional 2D materials, 2D ferroelectrics have reversible spontaneous electric polarization which would give rise to an electrostatic potential from the bottom to the top surface. The electrostatic potential difference on two surfaces would lead to distinct band edge alignments and different electron transfer when they are respectively integrated with other materials, thus changing the properties of adjacent layers. On the other hand, switching the polarization direction could change the surface's charge density, making it possible to modulate the binding strength of adsorbed species. According to the Sabatier principle, the adsorbate-surface binding strength must be optimal to achieve the maximum efficiency. A ferroelectric surface with tunable activity can provide a platform to enhance specific catalytic performance. What's more, the intrinsic electric field in 2D ferroelectric materials is also beneficial to separate the photo-generated carriers and inhibit their recombination, which are of great importance in photocatalytic reactions. It is worth noting that, the opposite electric polarizations in ferroelectric materials are bistable, which means the electrical switching of these two states is nonvolatile. The states will remain even the external electric field is retracted. Therefore, it is expected that this intrinsic electric field would be an effective way to achieve nonvolatile control of the properties of adjacent materials and reaction activity. To this end, in the middle part, we focus on four respects, namely the effects of ferroelectric polarization on magnetism, electronic properties, gas adsorption and photocatalytic water splitting to show the applications of 2D ferroelectric materials. Up to now, great efforts have been devoted in ferroelectric materials with out-of-plane spontaneous polarization. Compared to out-of-plane ferroelectricity, in-plane ferroelectrics have unique advantage in terms of preventing vertical perturbations. With the rapid progress of the experimental techniques, 2D ferroelectric materials would hold great potential to be applied in a broader range of applications. At last, a brief overview for 2D ferroelectric materials is presented.

ferroelectric materials, polarization switching, magnetism tuning, electronic properties, gas sensing, photocatalytic water splitting

doi: [10.1360/TB-2020-1100](https://doi.org/10.1360/TB-2020-1100)