

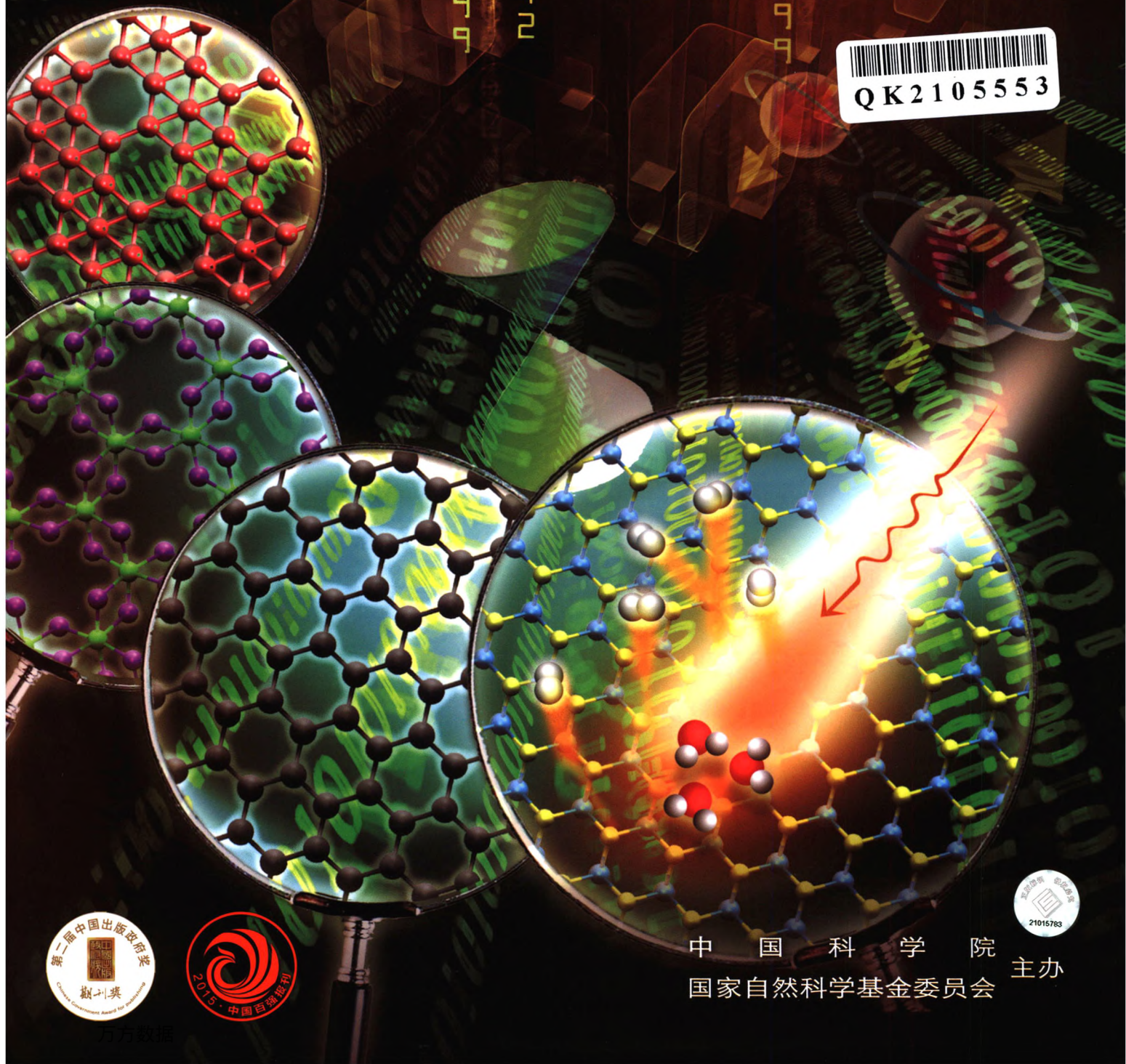
ISSN 2095-9419 (网络) | ISSN 0023-074X (印刷)

科学通报

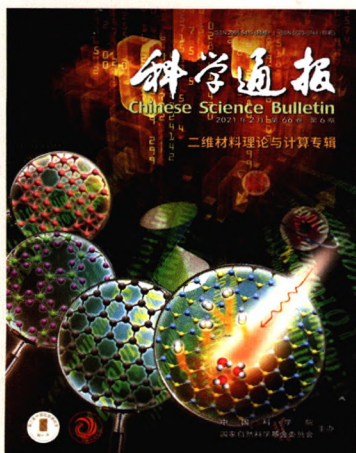
Chinese Science Bulletin

2021年2月 第66卷 第6期

二维材料理论与计算专辑



中国科学院
国家自然科学基金委员会 主办



目次

2021年2月, 第66卷, 第6期

封面说明

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. 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, 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. 封面图片展示了随着大规模高性能平行计算和相关理论方法的发展, 人们能够预测的部分二维材料的晶格结构. 详见本期专辑.

二维材料理论与计算专辑

编者按

- 533 二维材料理论: 材之魂, 料之魄**
张助华, 邹小龙

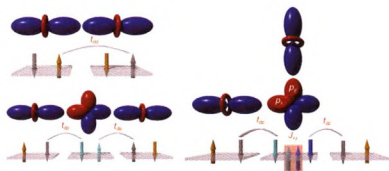
评述

- 535 二维磁性材料的第一性原理计算**
许祇铭, 李洋, 徐勇, 段文晖

介绍了磁性研究的一般理论及第一性原理研究方法. 结合实验和理论计算广泛研究的典型二维磁性材料体系, 阐述第一性原理计算在二维磁性材料研究中起到的作用. 最后指出第一性原理计算在描述二维磁性体系中存在的不足, 并展望了二维磁性材料理论研究的发展趋势.

- 551 二维铁磁材料的理论模拟与设计**
王冰, 周爱桦, 王金兰

基于密度泛函理论的第一性原理计算为新材料的设计和性质的研究提供了一个有效的手段. 本文综述了近年来几种典型二维本征铁磁材料方面的研究进展, 特别是强调了第一性原理计算在二维铁磁材料探索和制备方面发挥的重要作用.



▲ 许祗铭等 p535

563 二维材料的设计及功能化:从理论预测到实验验证

张丽娟,顾金星,陈中方

从二维材料的结构设计及功能化两方面出发,回顾了一些理论计算有效预测新结构和新性质并最终得到实验佐证的案例,通过剖析理论预测和实验研究相互影响的具体细节,探讨理论计算和实验研究相辅相成的关系。

580 二维铁电材料在物理化学领域的应用研究进展

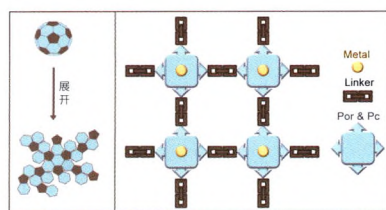
汤笑,寇良志

概述了二维铁电材料在理论和实验上的发展近况,并从磁性、电子性质、气敏应用以及光催化水分解四个方面阐述了二维铁电材料在物理性质调控和化学领域应用的研究进展。

591 二维光解水材料的理论设计

付岑峰,杨金龙

介绍了二维光解水材料的理论研究进展,包括寻找新的二维光解水材料,以及增强二维光解水催化剂光吸收和光生电子空穴分离的各种方法;并对二维光解水材料的理论研究所面临的机遇与挑战作了展望。



▲ 张丽娟等 p563

606 二维材料的高通量筛选与光催化性能预测

陈乐添,陈安,张旭,周震

石墨烯的出现引起了研究者对二维材料的广泛关注。目前,众多二维材料的发现为构建二维材料数据库提供了丰富的数据基础。本文从理论计算与模拟的角度,总结了高通量筛选在二维光催化材料领域的应用。

625 二维电化学合成氨催化剂的理论研究进展

朱晓蓉,李亚飞

电化学合成氨对于农业生产和能源转换具有重要意义,二维材料因为具有表面积大、表面原子比例高等优点,在电化学合成氨领域得到广泛的关注与应用。本文对近年来二维电化学合成氨催化剂的理论研究进行了总结。

640 基于电子结构理论筛选二维材料用于高性能能量存储及转化器件

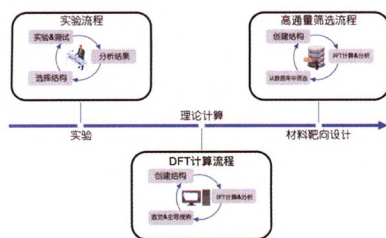
杨鑫,吴曦,李佳

介绍了二维材料在能量存储和转化器件上的应用,并从理论计算的角度出发,总结了多种可用于表征二维材料能量存储和转化性能的描述符,为大规模筛选性能优异的二维材料提供了理论指导。

657 基于二维材料纳米孔的生物传感器:计算和模拟研究进展

周万琦,仇虎,郭宇锋,郭万林

纳米孔传感器在DNA测序、疾病诊断、环境检测等领域具有广阔的应用前景。本文从计算和模拟角度综述了具有最高理论分辨率的二维材料纳米孔传感器的研究历程,分析了制约该领域的关键因素,讨论了未来的研究方向。



▲ 陈乐添等 p606

674 广义布洛赫方法的应用:低维材料物性的非均匀应变调控

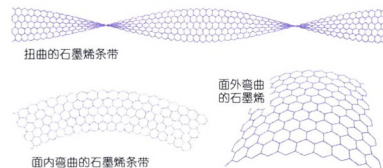
张东波,魏苏淮

介绍了非均匀结构变形下低维材料物性调控的量子力学模拟方法,即广义布洛赫方法;并通过三类例子(电子结构调控,掺杂,以及声子调控)阐述该方法在低维材料研究中的作用。

685 石墨烯和氮化硼层内异质界面生长机理

李仕琪, 张喆, 韩岩, 高峻峰, 赵纪军

以石墨烯和氮化硼横向异质结合成为例, 回顾前期实验生长现象和深入的理论模拟, 初步阐述二维异质结的形成机理, 探讨异质结结构特征和形成机理, 为之后深入研究生长机理、可行性合成和器件的设计提供参考.



▲ 张东波等 p674

i 《科学通报》投稿指南

SciEngine 全流程数字出版平台

助力中国科技期刊走向国际



engine.scichina.com

HTML全文展示

兴趣搜索

邮件推送

统计分析定制

学术社交评价

数据库对接

- 国际标准 XML 制作与排版
- 国际规范出版流程
- 平台交互索引与资源共享
- 一站式运营管理

Volume 66 Number 6 February 2021

Main Contents

- 533 **Theory of two-dimensional materials: The soul of the materials**
Zhuhua Zhang & Xiaolong Zou
- 535 **First-principles calculations of two-dimensional magnetic materials**
Zhiming Xu, Yang Li, Yong Xu & Wenhui Duan
- 551 **Theoretical simulation and design of two-dimensional ferromagnetic materials**
Bing Wang, Qionghua Zhou & Jinlan Wang
- 563 **Structures and functions of two-dimensional materials: From theoretical prediction to experimental realization**
Lijuan Zhang, Jinxing Gu & Zhongfang Chen
- 580 **Progress of two-dimensional ferroelectrics in physical and chemical applications**
Xiao Tang & Liangzhi Kou
- 591 **Theoretical advances in two-dimensional materials for photocatalytic water splitting**
Cenfeng Fu & Jinlong Yang
- 606 **High-throughput screening of two-dimensional materials and prediction of photocatalytic performances**
Letian Chen, An Chen, Xu Zhang & Zhen Zhou
- 625 **Advances in two dimensional electrochemical catalysts for ammonia synthesis**
Xiaorong Zhu & Yafei Li
- 640 **Recent advances in screening two-dimensional materials for high-performance energy storage and conversion devices based on electronic structure theory**
Xin Yang, Xi Wu & Jia Li
- 657 **Two-dimensional material nanopores as biosensors: Recent progress based on computations and simulations**
Wanqi Zhou, Hu Qiu, Yufeng Guo & Wanlin Guo
- 674 **Application of generalized Bloch method: Strain engineering of low dimensional materials through inhomogeneous strains**
Dongbo Zhang & Suhuai Wei
- 685 **Growth mechanism of graphene/h-BN intra-layer interface**
Shiqi Li, Zhe Zhang, Yan Han, Junfeng Gao & Jijun Zhao



科学家交流的平台 | 国际科学研究的展台 | 向世界展示的窗口

科学通报

CHINESE SCIENCE BULLETIN

第 66 卷 第 6 期 2021 年 2 月 28 日出版

(版权所有, 未经许可, 不得转载)

主 管	中 国 科 学 院	出 版	《中国科学》杂志社
编 辑	中 国 科 学 院 《科学通报》编辑委员会 北京 (100717) 东黄城根北街 16 号	印刷装订 总发行处 订购处	北京科信印刷有限公司 北京报刊发行局 全国各邮电局 《中国科学》杂志社发行部
主 编	高 福		

为加强版权保护, 本刊自2020年起在封面加贴《中国科学》杂志社防伪标签. 每个防伪标签上均有编号, 验伪请拨打010-64019709. 凡未贴防伪标签为盗版, 违法必究.



《科学通报》官方
微信订阅号

万方数据

CN 11-1784/N ■ ISSN 0023-074X ■ eISSN 2095-9419
国内邮发代号: 80-213
广告发布登记: 京东市监广登字20170194号
每期定价: 120.00元 全年定价: 4320.00元

ISSN 0023-074X

