

二维层状晶体塑性调控研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41912.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！

二维层状晶体塑性调控研究获进展

。二维层状范德华晶体因其丰富的电学、光学、热电及自旋电子学性质，在柔性电子、光电子与能源转换等领域具有重要应用前景。该类材料具有本征弱层间范德华作用和强层内化学键，由此形成结构与性能上的各向异性特征。

尽管学界在InSe、SnSe₂、GaSe、缺陷Bi₂Te₃

等多种材料中已观测到宏观尺度室温塑性，但其拉伸应变普遍较低。如何在保持优异电性能的同时提升宏观尺度拉伸塑性，是发展高性能柔性、可变形电子材料亟须解决的关键科学问题。

材料的脆塑性由裂纹扩展与塑性变形竞争决定。当外加载荷产生的应力在裂纹形成并扩展前有效释放，材料将优先发生塑性变形；反之，局部应力集中易引发脆性断裂。位错、层错、孪晶等晶体缺陷可通过运动、相互作用与重组耗散外加机械能，从而抑制裂纹扩展。层状范德华晶体的相邻原子层相对旋转可形成周期性晶格调制的莫尔扭转结构，从而在常规晶体缺陷之外，为材料提供额外的结构自由度与应力释放通道。因此，块体层状晶体内可控预置的内莫尔扭转结构，可通过外力作用下的动态演化释放应力，从而提升材料的拉伸塑性。

近日，中国科学院上海硅酸盐研究所等科研团队在二维层状范德华晶体的塑性调控研究方面取得进展。团队提出离轴预压缩调控策略，在块体层状范德华晶体中实现层间莫尔超晶格的可控构筑。该策略有效降低扭转与滑移能垒，使室温宏观最大拉伸应变从8.3%提升至30%，增幅约360%，使材料在保留优异的面内电输运特性的同时，达到目前块体层状范德华晶体室温拉伸应变的最高记录。

团队聚焦三元层状范德华晶体GaGeTe，提出利用离轴预压缩，主动构筑层间莫尔扭转结构的新策略来调控材料的宏观塑性。测试表明，未经处理的GaGeTe单晶在面内方向的最大拉伸应变为8.3% ± 2.7%，而经过离轴预压缩后的扭转GaGeTe晶体最大拉伸应变达30.0% ± 3.3%，相较原始晶体提升约360%，超过已报道的所有块体范德华材料。该结果揭示了拉伸应变与预压缩应变之间的关联，当预压缩应变为10%左右时，材料的拉伸应变达到最大值。

团队结合原位与离位透射电子显微镜，对不同变形阶段的层间扭转行为开展系统表征。结果发现，未经预处理的GaGeTe在拉伸过程中仅形成6°以下的小角度莫尔扭转，而离轴预压缩可通过非均匀应力场产生局域力矩和剪切作用，在晶体内部预先构筑约1°至21.4°的宽角度莫尔扭转结构。在后继续施加拉伸载荷时，莫尔结构进一步发生重构，扭转角分布逐渐向13.1°、21.4°等大角度集中，并与层间滑移协同演化。

理论计算结果显示，在完整晶体中构建初始莫尔扭转需要一定能量，但扭转结构建立后，继续增

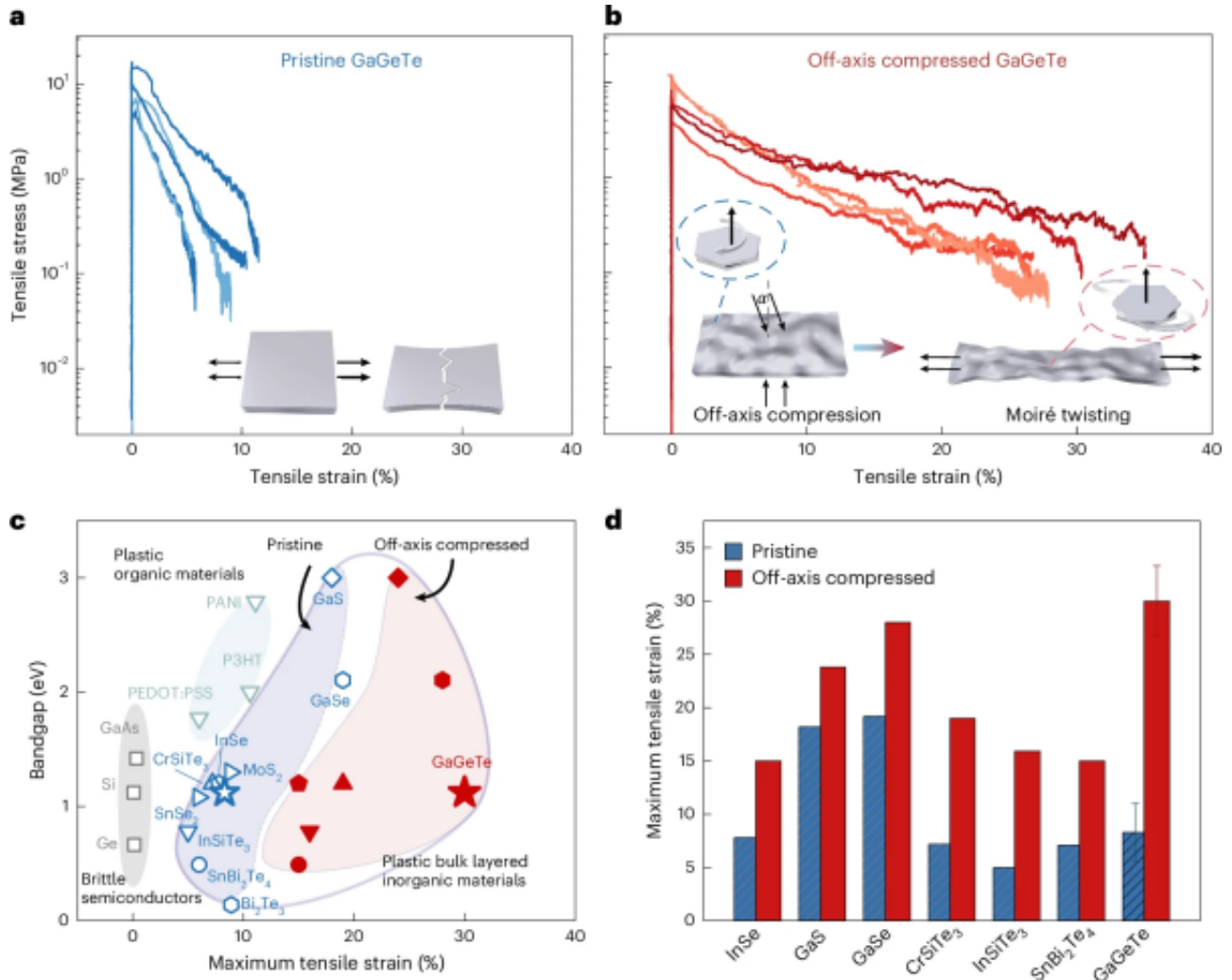
大扭转角所需的能量变化可降低约一个数量级，且莫尔扭转可使GaGeTe的层间滑移能垒降低约两个数量级，而解理能基本保持不变，大幅提高材料发生层间滑移而非解理断裂的倾向。基于上述结果，研究形成了“离轴预压缩预置宽角度莫尔扭转—莫尔超晶格大幅降低层间扭转与滑移能垒—拉伸载荷驱动大角度扭转重组与大规模滑移协同耗散机械能”的塑性变形过程，使材料能够在断裂前，通过持续的层内结构重构承载大幅拉伸应变，实现对材料的塑性行为调控。

团队选取了InSe、GaS、GaSe、CrSiTe₃、InSiTe₃和SnBi₂Te₄等一系列带隙不同的块体层状范德华晶体，验证了离轴预压缩方法的有效性，证实了该策略具有普适性。实验结果表明，无论二元还是三元层状体系，经离轴预压缩处理后，材料拉伸塑性均表现出显著增强。

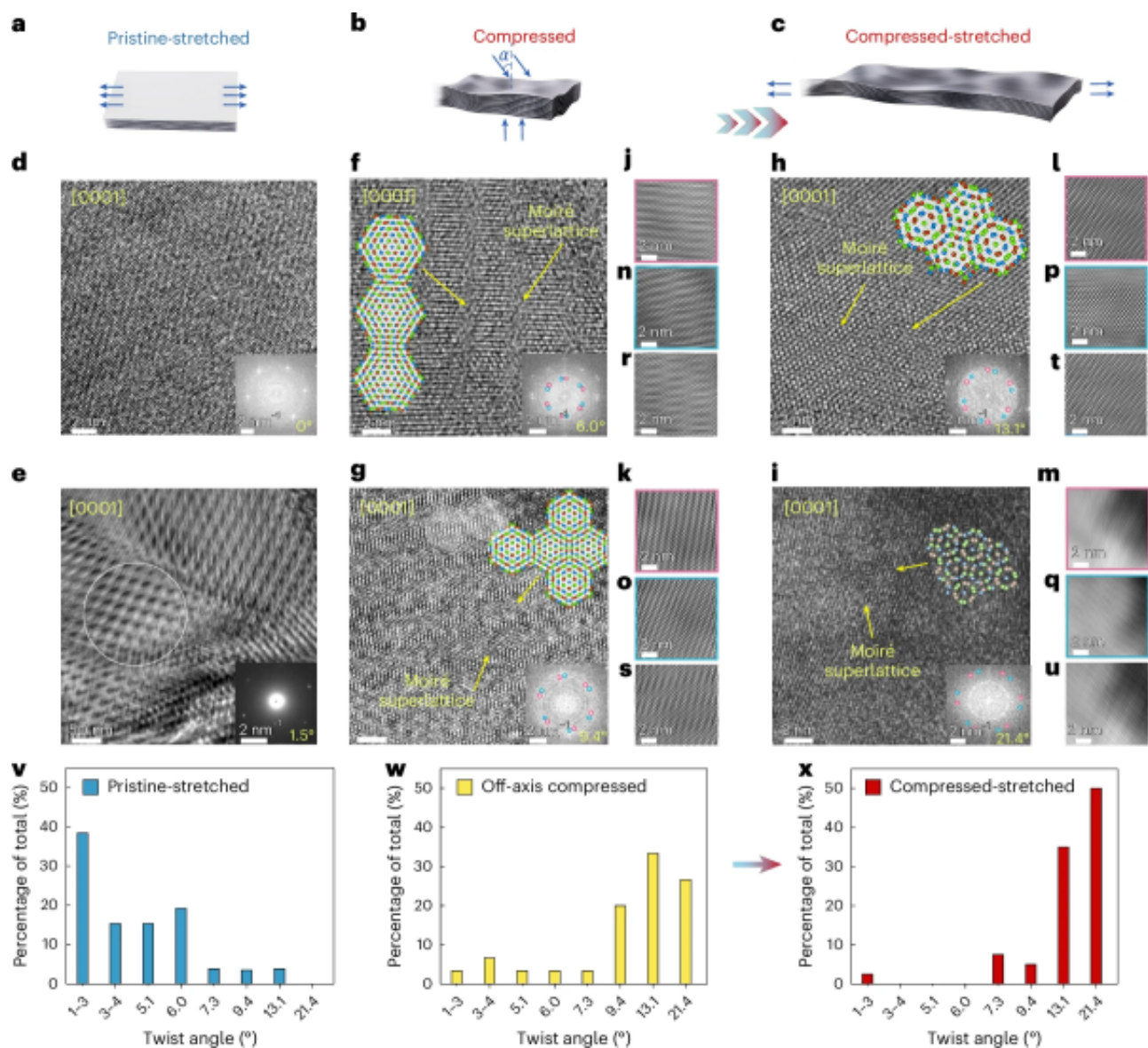
该研究将“莫尔工程”拓展至块体材料宏观拉伸塑性变形调控领域，揭示了层间莫尔扭转作为应力释放与塑性变形调控机制的重要作用，为开发兼具优异电学性能和高机械柔性的层状半导体材料提供了新思路，也为柔性电子、可穿戴器件、可变形半导体器件及高可靠性功能材料的设计提供了新策略。

相关研究成果发表在《自然-材料》（Nature Materials）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、中国科学院等的支持。

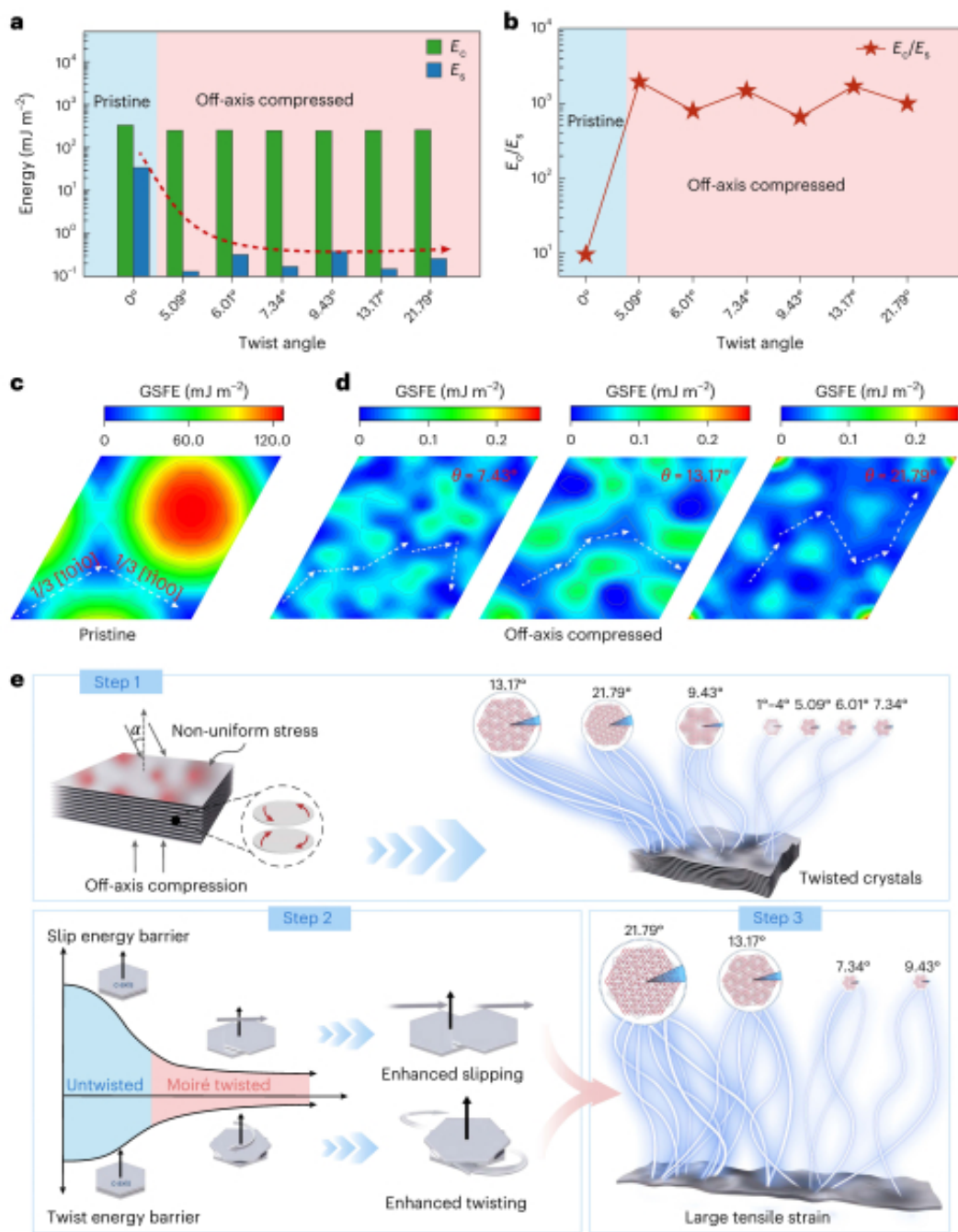
[论文链接](#)



离轴预压缩可控引入莫尔扭转结构从而显著提升块体层状范德华晶体的宏观拉伸塑性



GaGeTe晶体拉伸、离轴预压缩及离轴预压缩-拉伸后的莫尔超晶格结构与扭转角分布



莫尔扭转显著降低层间滑移与扭转能垒及塑性变形机制

研究团队单位：上海硅酸盐研究所

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