二维滑移铁电体研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/42355.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！

二维滑移铁电体研究取得进展
。近日，中国科学院宁波材料技术与工程研究所等在二维滑移铁电体研究中取得进展。研究利用应变工程为原子层厚度的二维滑移铁电体装上“ 方向盘 ”，使这种新型二维材料实现了亚纳米精度的层间定向滑移。

信息存储器件追求小型化、高速、低功耗。新型二维滑移铁电体可通过“ 对齐 ”（AB）与“ 错开“ （BA）两种堆垛构型，实现极化翻转，适合存储应用。但其存在多条等价滑移路径，难以定向调控原子层滑移与极化。如何让原子层在二维原子世界里沿指定方向滑动是领域的一道难题。

研究团队以双层氮化硼材料为范例，利用AI辅助跨尺度模拟计算方法，在超级计算机中搭建起一间“ 数字实验室 ”。团队先用从量子力学基本方程出发的第一性原理计算，澄清材料中电子结构及与应变的耦合机制，进一步借助AI辅助的深度势能分子动力学模拟，就像架设起超高分辨的微观摄像机，追踪数百万个原子在飞秒分辨率上的集体运动轨迹。

团队进一步沿单一方向对材料施加单轴应变，打破其原有的三重旋转对称性，构建出一种由非本征机制主导的方向锁定层间滑移。

研究发现，在外电场下，原子层只能由BA堆垛通过单一路径滑向AB堆垛，如同驶入一条预设的“ 单行道 ”，实现了层间的定向锁定滑移与极化翻转。同时，在三条路径中，通过应变选择其中一条特定滑移路径。完成一次极化翻转仅需约1.7皮秒，比传统铁电材料快3至4个数量级。此外，层间定向滑移过程存在晶格的振荡，可诱导动态磁矩和太赫兹波，为太赫兹光源、动态多铁及亚纳米机电器件设计提供新思路。

相关研究成果发表在《物理评论快报》（*Physical Review Letters*）上。研究工作得到国家自然科学基金等的支持。

应变调控层间滑移方向示意图及极化与应变的非本征耦合机制

层间定向滑移后动态极化振荡诱导的磁矩及太赫兹波

研究团队单位：宁波材料技术与工程研究所

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转发