

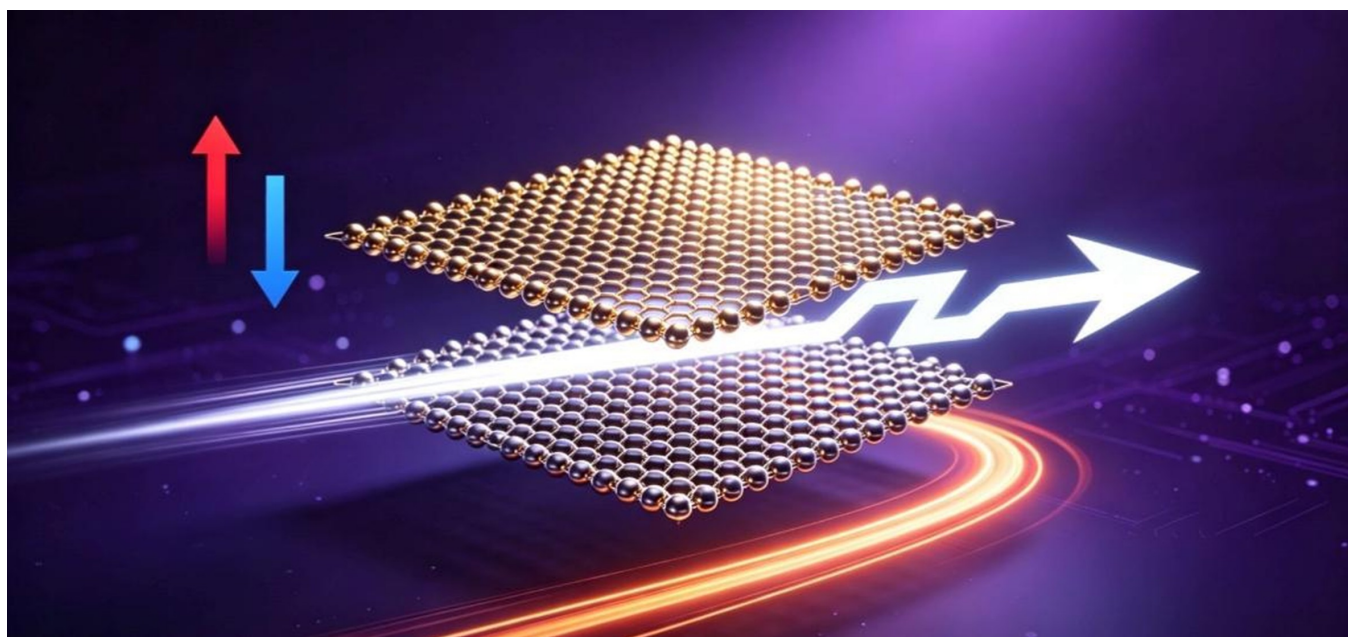
他们为二维滑移铁电体装上原子层“方向盘”

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/42424.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！

他们为二维滑移铁电体装上原子层“方向盘”。近日，中国科学院宁波材料技术与工程研究所柔性磁电功能材料与器件团队联合宁波东方理工大学和宁波大学，在二维滑移铁电体研究中取得重要突破。他们利用应变工程，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，在定向滑移过程中，能够诱导磁矩并辐射太赫兹波，为太赫兹光源、动态多铁以及亚纳米机电器件设计提供思路。相关成果发表于《物理评论快报》。



成果效果图。宁波材料所供图

滑移铁电体，是一类新型二维范德华材料，其原子层能够通过相对滑动，对齐（AB）与错开（BA）两种堆垛构型，实现垂直方向的极化翻转，天然对应着信息存储所需的两个状态，被视为下一代非易失存储的重要候选。然而，理想单畴结构的滑移铁电体，内部存在多条对称等价的滑移路径。

以双层氮化硼为例，其六角晶格具有三重旋转对称性，具有3条等价滑移路径，原子层沿哪一条路径滑动，材料自身说了不算。

如何让原子层在二维原子世界里沿指定方向滑动？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：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；再借助AI辅助的深度势能分子动力学模拟，就像架设起一个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。

在此基础上，团队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，如同驶入一条预设好的单行道，实现了层间的定向锁定滑移与极化翻转，与此同时，在3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，在层间定向滑移过程中，还存在晶格的振荡，从而诱导动态磁矩和太赫兹波，能够为太赫兹光源、动态多铁以及亚纳米机电器件设计提供新思路。（来源：中国科学报张楠，黄莎莎）

相关论文信息src=<http://paper.sciencenet.cn/htmlpaper/2026/10/>：<https://doi.org/10.1103/jq6y-y9ft>

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