摩尔超晶格动力学研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/43081.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！

摩尔超晶格动力学研究获进展
。近年来，二维摩尔超晶格因其独特的结构可调性和丰富的物理性质，成为凝聚态物理与材料科学领域的研究热点。

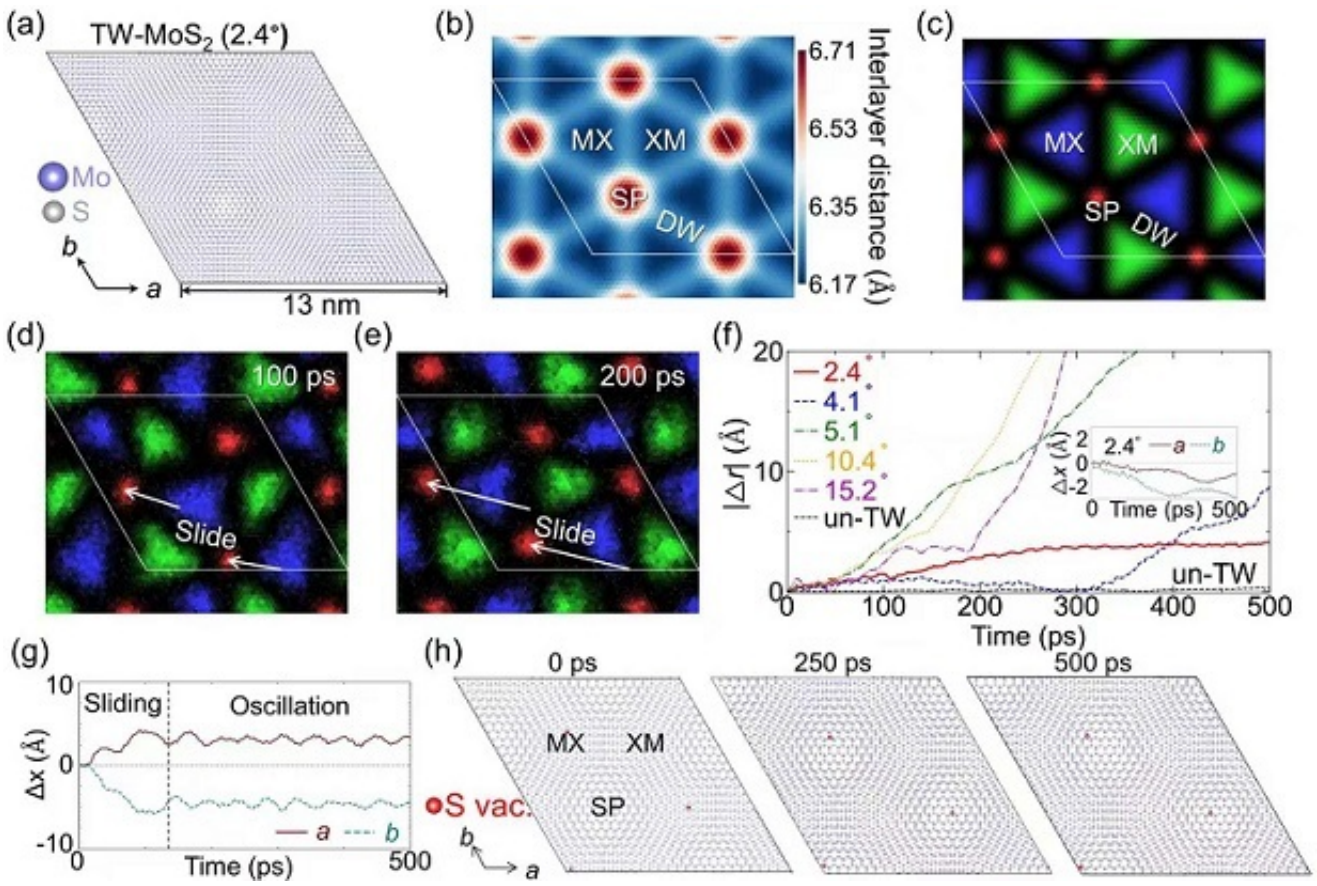
近期，中国科学院国家纳米科学中心与物理研究所等合作，在铁电摩尔超晶格的滑移动力学方面取得进展。研
究团队利用机器学习势与大
规模分子动力学模拟，发现扭转双层MoS_2
摩尔超晶格能够在室温下发生自发的长程层间滑移，揭示了畴壁介导的超低势垒集体滑移机制，以及原子缺陷诱导的滑移钉扎现象。

研究基于高精度机器学习势，实现了对上万原子摩尔超晶格的动力学模拟。研究发现，在理想无缺陷条件下，扭转双层MoS_2
在室温下能够发生约1m/s的自发层间滑移，并伴随摩尔图案的整体漂移。传统刚性滑移模型难以解释这一现象，而在模型中允许畴壁运动与局域原子重构后，滑移能垒降低近两个数量级，揭示了畴壁介导的近乎无势垒集体滑移机制。研究还发现，仅约0.1%的硫空位便足以使长程滑移转变为局域振荡。分析表明，硫空位在畴壁网络交汇处的SP堆垛区域具有最低的相对能量，使其成为优先的钉扎中心。随着摩尔图案的漂移，SP节点可被硫空位产生的局域势阱捕获，而滑移与钉扎之间的竞争取决于缺陷钉扎能与摩尔结构形变能的相对大小。

研究揭示了铁电摩尔超晶格中不同于传统刚性层间平移的集体滑移机制，阐明了畴壁运动与原子缺陷对层间动力学的关键作用，深化了对二维滑移铁电材料及摩尔超晶格集体动力学的理解，并为通过缺陷工程调控摩尔超晶格的动态行为提供了新的理论依据。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（*Journal of the American Chemical Society*
）上。研究工作得到国家自然科学基金、国家重点研发计划、中国科学院相关项目等的支持。

论文链接



摩尔超晶格的室温自发滑移及硫空位诱导的钉扎现象

研究团队单位：国家纳米科学中心

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