

## 二维层间滑移铁电研究进展

钟婷婷 吴梦昊

### Research progress of two-dimensional interlayer-sliding ferroelectricity

Zhong Ting-Ting Wu Meng-Hao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 217707 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20201432

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201432>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

基于滑动势能面的二维材料原子尺度摩擦行为的量化计算

Quantitative calculation of atomic-scale frictional behavior of two-dimensional material based on sliding potential energy surface

物理学报. 2017, 66(19): 196802 <https://doi.org/10.7498/aps.66.196802>

二维本征铁电体及其多铁耦合的研究进展

Recent research progress of two-dimensional intrinsic ferroelectrics and their multiferroic coupling

物理学报. 2020, 69(21): 217710 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201433>

二维材料/铁电异质结构的研究进展

Research progress and device applications of multifunctional materials based on two-dimensional film/ferroelectrics heterostructures

物理学报. 2020, 69(1): 017301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191486>

准二维范德瓦耳斯磁性半导体 $\text{CrSiTe}_3$ 的THz光谱

Quasi-two-dimensional van der Waals semiconducting magnet  $\text{CrSiTe}_3$  studied by using THz spectroscopy

物理学报. 2020, 69(20): 207302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200682>

低维铁电材料研究进展

Research progress of low-dimensional ferroelectric materials

物理学报. 2018, 67(15): 157701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180483>

自驱动柔性生物医学传感器的研究进展

Research progress of self-powered flexible biomedical sensors

物理学报. 2020, 69(17): 178704 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201012>

百岁铁电: 新材料、新应用专题

## 二维层间滑移铁电研究进展

钟婷婷<sup>1)†</sup> 吴梦昊<sup>2)‡</sup>

1) (浙江理工大学物理学系, 杭州 310018)

2) (华中科技大学物理学院, 武汉 430074)

(2020年8月29日收到; 2020年9月15日收到修改稿)

近年来有一系列二维范德瓦耳斯材料铁电性被实验证实, 层间滑移铁电体是其中重要的一类, 该机制是传统铁电所没有, 而很多二维材料普遍具有的. 本文回顾了相关研究, 介绍了这种铁电的起源: 不少二维材料双层中上下两层并不对等, 造成净层间垂直电荷转移, 而层间滑移使该垂直铁电极化得以翻转. 这种独特的滑移铁电可广泛存在于范德瓦耳斯双层、多层乃至体相结构中, 层间滑移势垒较传统铁电低几个数量级, 有望极大节约铁电翻转所需的能量. 目前这种滑移铁电机制已在  $\text{WTe}_2$  和  $\beta\text{-InSe}$  双层/多层体系得到实验证实, 不少预期极化更高的滑移铁电体系 (如 BN) 也有望在近期实现.

**关键词:** 二维范德瓦耳斯铁电体, 层间滑移, 纳米发电机, 铁电莫列超晶格**PACS:** 77.84.-s, 81.07.-b, 73.22.-f, 77.55.fp**DOI:** 10.7498/aps.69.20201432

## 1 引言

近年来在二维范德瓦耳斯铁电体<sup>[1]</sup>方面的进展可能会使铁电材料在纳米电子学中的应用发生变革: 它们原子级的厚度可以促进高密度的集成, 尤其是垂直铁电体; 干净的范德瓦耳斯界面允许晶体外延生长时晶格失配, 可在包含硅在内的多种衬底上进行外延生长, 也使得铁电随机存取存储器元件可集成到半导体电路上; 而且很多二维材料也同时是高迁移率和窄带隙的半导体, 可实现铁电性质与半导体的结合. 自 2013 年以来, 对二维铁电体的设计可分为两类: 1) 已有不少预测可通过化学修饰赋予大多非极性的二维材料铁电性<sup>[2-4]</sup>, 但尚未被实验证实; 2) 在二维材料中预测出的本征铁电性已在几类体系中得到实验证实, 极化位于面内的二维体系有 IV-VI 族材料<sup>[5-8]</sup> 和  $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$  纳米片<sup>[9,10]</sup>, 位于面外的有  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$ <sup>[11,12]</sup>,  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ <sup>[13,14]</sup>

和范德瓦耳斯双层/多层材料<sup>[15-17]</sup>等.

本文将介绍最后一类二维体系中独有的铁电机制和近年来的相关研究: 不少二维材料双层中上下两层并不对等, 造成电荷重新分布和净层间垂直电荷转移, 铁电翻转时没有发生垂直离子位移而是依靠层间滑移使该垂直铁电极化得以翻转. 这种二维铁电独有的层间滑移铁电性可出现在一系列范德瓦耳斯双层/多层系统中, 对很多二维材料是普适的. 下面将通过介绍以 BN,  $\text{WTe}_2$  和  $\beta\text{-InSe}$  双层/多层体系为例的相关研究, 详细阐明这一机制.

## 2 二维层间滑移铁电

## 2.1 二元双层和多层结构的垂直极化: 二维铁电体, 多铁体及纳米发电机

我们在 2017 年首次预测了这种层间滑移铁电<sup>[15]</sup>. 以六角氮化硼 (h-BN) 双层为例, 已有研究表明 AB1 堆叠为体系的基态<sup>[18,19]</sup>, 结构如图 1(a)

† 通信作者. E-mail: zhongtt@zstu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wmh1987@hust.edu.cn

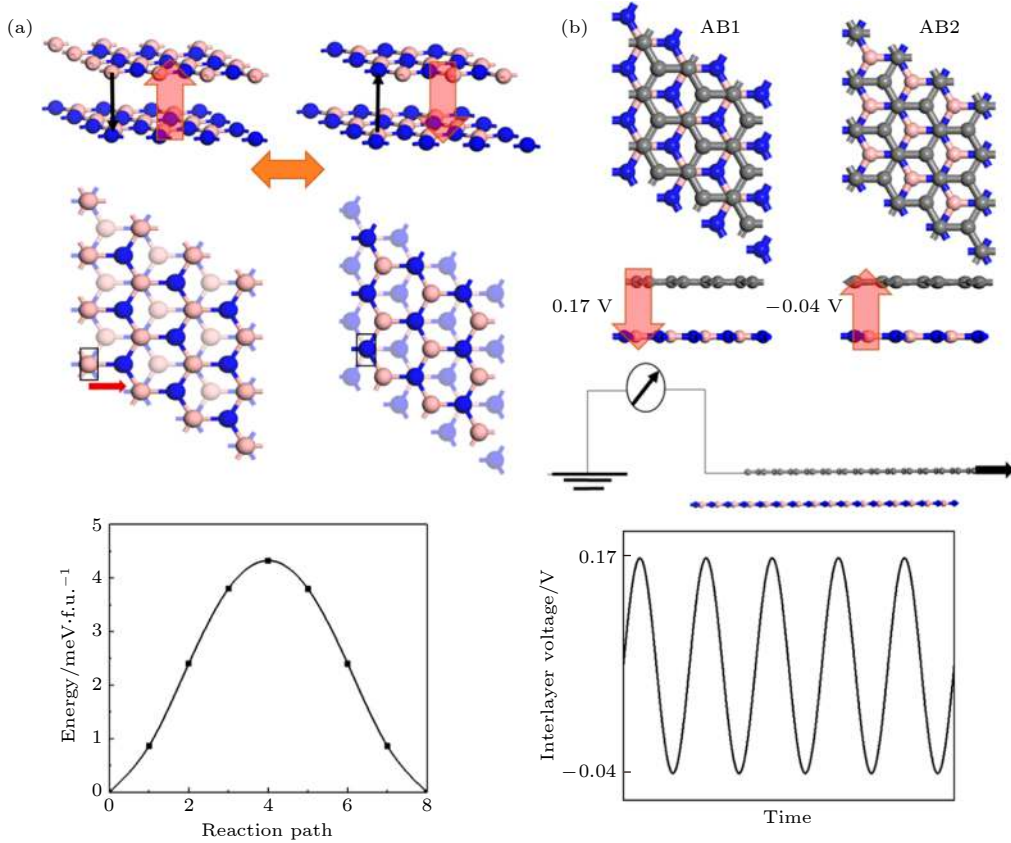


图 1 (a) BN 双层的铁电翻转路径; (b) 石墨烯/BN (C/BN) 异质双层不同堆叠方式会产生不同的层间电势, 可被用作纳米发电; 灰色、粉色和蓝色小球分别代表 C、B 和 N 原子, 黑色和红色箭头分别表示电荷转移和电极化的方向<sup>[15]</sup>

Fig. 1. (a) Ferroelectric switching pathway of BN bilayer; (b) different stacking configurations of graphene/BN heterobilayer with distinct interlayer potentials, which can be utilized as nanogenerators. Gray, pink, and blue spheres denote C, B and N atoms, and black and red arrows denote the direction of charge transfer and polarizations, respectively<sup>[15]</sup>.

所示, 在这个结构中上层中的 N 原子正对着下层的六环中心, 而上层中的 B 原子正对着下层中的 N 原子, 造成了两层之间的不对等. 层间距离也减小为  $3.10 \text{ \AA}$ , 这就导致了电荷重新分布, 使得部分净电荷从上层转移到下层, 如图 1(a) 中黑色箭头所示, 因此体系产生了方向朝上的垂直电极化, 如图中红色箭头所示. 体系的电极化能通过层间滑移一个 B—N 键长的方式实现翻转, 如移动上层使得上层中的 N 原子正对着下层中的 B 原子, 如图 1(a) 所示. 用过渡态搜寻<sup>[20]</sup>方法追踪铁电翻转的路径, 并得到翻转的势垒, 约为每个原胞  $9 \text{ meV}$ , 这表明铁电极化在室温下进行翻转是可行的. 用贝利相位方法, 计算可得二维中的垂直电极化为  $2.08 \text{ pC/m}$ , 换算成三维的电极化为  $0.68 \text{ \mu C/cm}^2$ , 是  $1\text{T}$  相  $\text{MoS}_2$  垂直极化 (约  $0.22 \text{ \mu C/cm}^2$ )<sup>[21]</sup> 的 3 倍多.

石墨烯和 h-BN 的晶体结构很相似, 都是平面蜂窝状结构, 晶格常数方面只有 2% 的差异. 如将

上层 BN 换成石墨烯 (图 1(b)), AB1 堆叠方式也是新体系的基态, 也即 BN 层中的 B 原子正对上层石墨烯中的 C 原子, 而 N 原子则正对石墨烯六环的中心. 新的体系将产生一个大小为  $1.5 \text{ pC/m}$ , 方向朝下的垂直电极化, 此时石墨烯相当于被 n 型掺杂. 利用公式  $U = \frac{qd}{\epsilon S}$  ( $q$  为电荷,  $d$  为层间距离,  $\epsilon$  为相对介电常数,  $S$  为面积) 粗略估算, BN 双层和 C/BN 异质双层的层间电压分别为  $0.23 \text{ V}$  和  $0.17 \text{ V}$ . 对于 C/BN 异质双层, AB2 堆叠 (N 原子与上层石墨烯中的 C 原子正对) 比 AB1 堆叠能量稍高些, 此时体系电极化大小为  $0.33 \text{ pC/m}$ , 方向朝上, 这时石墨烯将变成 p 型掺杂, 层间电势差为  $-0.04 \text{ V}$ . 因此如果能沿着扶手椅形方向拖动 BN 层上的石墨烯, 层间电压将在  $0.17 \text{ V}$  (AB1) 和  $-0.04 \text{ V}$  (AB2) 之间振荡, 产生一个交替变化的电流输出信号, 这个机制可潜在用于纳米发电机<sup>[22–26]</sup>. 类似于之前设计的摩擦电纳米发电机, 利用系统电



势和电容的变化来驱动电子的流动和进行能量捕获. 该体系在压电电子学上也有潜在应用<sup>[27-29]</sup>: 因为层间距离能通过垂直压力减小, 所以电极化和层间电压能进一步增加; 当层间距被压缩 10% 时, BN 双层和 C/BN 异质双层的电极化大约变为两倍; 而且压力也使得石墨烯和单层 BN 构成的异质双层打开一个 0.31 eV 的带隙, 这对于改进无能隙石墨烯在纳米电子学中的应用很有帮助, 可以用作加压场效应晶体管. 类似器件实验上已经在少数层 MoS<sub>2</sub><sup>[30]</sup> 和卤化物钙钛矿<sup>[31]</sup> 中实现, 其中当加压到 56 GPa 时, 卤化物钙钛矿的带隙将关闭. 不同的是, 当压缩 C/BN 双层时, 将使体系从半金属的“开”态转换为半导体的“关”态.

范德瓦耳斯双层结构中层间一个小的扭曲角会产生莫列超晶格<sup>[32,33]</sup>, 在 BN 双层中还会产生铁电畴, 如图 2(a) 所示. AA 堆叠的区域没有垂直极化 (红色圈所示); AB 堆叠的区域中, 上层中的 B 原子在下层中的 N 原子正上面, 记为 AB-up 畴, 为图中黄色圈中区域, 此时极化的方向朝上, 绿色区域中上层中的 N 原子正对着下层中的 B 原子, 记为 AB-down 畴, 此时极化的方向朝下. 对上层和下层施加略有不同的应力还将生成另一种铁电莫列超晶格, 这样的莫列超晶格将包含 AB-up 型、AA 型和 AB-down 型畴周期条纹区域, 以及周期

性变化的层间电压, 如图 2(b) 所示. 类似的莫列超晶格也能在 C/BN 异质双层中出现, 会产生周期性 n 或者 p 型掺杂的石墨烯区域, 也使石墨烯的电子性质可调.

类似的层间滑移铁电可存在于一系列六角晶格二元化合物的 AB 堆叠双层/多层结构中, 比如层状的 AlN, ZnO, SiC 等薄层<sup>[34,35]</sup>, 天然二维半导体如 MoS<sub>2</sub>, InSe 和 GaSe 薄层甚至体态, 如图 3 所示. 其中前者极化远大于后者, 见表 1, 但后者是具有合适带隙和高迁移率的半导体, 使得非易失性存储和优良半导体得以成功结合. 对于有些已被合成的二维铁磁单层, 如 MXenes<sup>[36]</sup>, VS<sub>2</sub><sup>[37]</sup>, MoN<sub>2</sub><sup>[38]</sup> 和室温铁磁材料 LaCl/LaBr<sup>[39]</sup>, 它们的双层还可能具有多铁性. 即便它们的双层是反铁磁耦合, 但由于层间电荷转移和电压差的存在, 它们的净磁矩不为 0. 而且这个净磁矩能随着电极化和层间电压的翻转而发生翻转, 这使得以电场调控其磁性成为可能, 可用作“电写+磁读”型非易失性存储器.

表 1 BN, ZnO, AlN 等双层的电极化值<sup>[15]</sup>

Table 1. Polarization of bilayer binary compounds such as BN, ZnO, AlN, etc.<sup>[15]</sup>.

Polarization/ $10^{-12} \text{ C}\cdot\text{m}^{-1}$	Compounds							
	BN	ZnO	AlN	GaN	SiC	MoS <sub>2</sub>	InSe	GaSe
	2.08	8.22	10.29	9.72	6.17	0.97	0.24	0.46

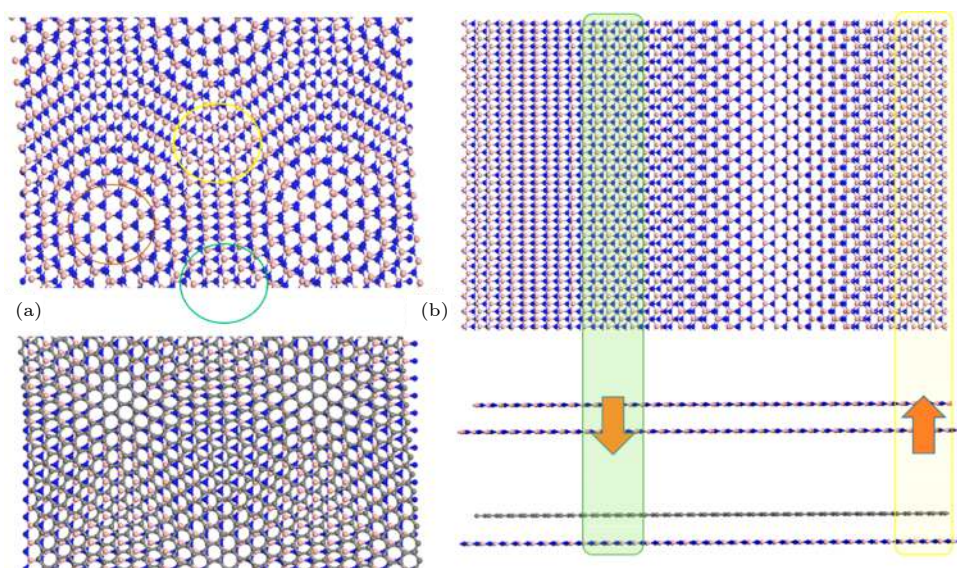


图 2 (a) 层间小的扭转角和 (b) 上层和下层之间轻微的应力差别形成的铁电莫列超晶格 (黄色、绿色和红色圈住的区域分别代表 AB-up, AB-down 和 AA 畴)<sup>[15]</sup>

Fig. 2. Ferroelectric Moire superlattice upon (a) a small twist angle or (b) a slight difference in strain between upper and down layer. AB-up, AB-down and AA regions are marked in yellow, green and red circles, respectively<sup>[15]</sup>.

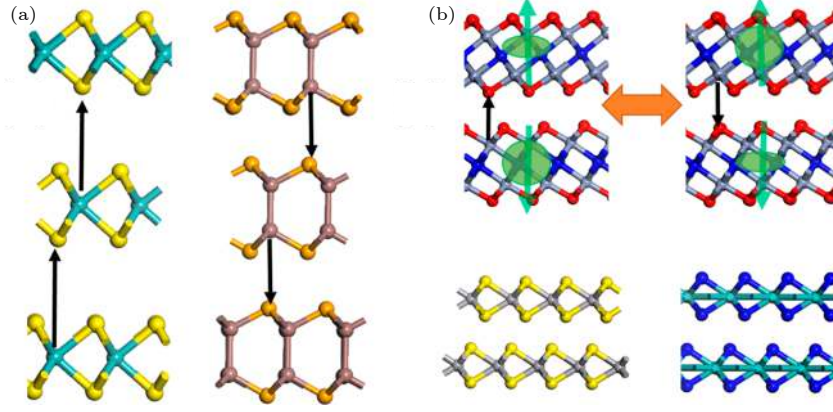

 图 3 (a) 体态 MoS<sub>2</sub> 和 InSe 铁电性; (b) MXene Cr<sub>2</sub>NO<sub>2</sub>, VS<sub>2</sub>, MoN<sub>2</sub> 双层净磁矩随铁电同步翻转<sup>[15]</sup>

Fig. 3. (a) FE in bulk MoS<sub>2</sub> and InSe; (b) switchable magnetization for MXene Cr<sub>2</sub>NO<sub>2</sub>, VS<sub>2</sub> and MoN<sub>2</sub> upon ferroelectric switching<sup>[15]</sup>.

## 2.2 二维拓扑半金属 WTe<sub>2</sub> 中垂直铁电性的实验观测

有关层间滑移铁电的首篇实验报告是 2018 年 Cobden 课题组<sup>[16]</sup>对少层 WTe<sub>2</sub> 进行的实验研究. 三维 WTe<sub>2</sub> 的结构空间群  $Pnm2_1$  是极性的. 它是一个极化金属, 在厚度下降到三层时仍然是金属性的. 实验观测发现两或者三层 WTe<sub>2</sub> 中存在自发面外电极化, 而且这个垂直电极化是能用门电极进行翻转的, 即使面内是金属性仍能表现出较好的铁电性质. 文中设计的器件中, WTe<sub>2</sub> 被夹在 h-BN 之间, 上下是石墨烯门电极. 这个器件在垂直方向被施加了电场. 当施加的垂直电场 ( $E_{\perp}$ ) 方向朝上和朝下时, 可观察到三层和两层各自做成的器件的电导在  $E_{\perp} = 0$  附近温度从 4 K 到室温以上都出现了双稳态, 表现出的是铁电翻转特性. 然而单层中没有出现这样的双稳态, 与单层结构中心对称且表现非极性是一致的.

Cobden 课题组<sup>[16]</sup>也用石墨烯作为电场传感器<sup>[40]</sup>直接探测和量化电极化大小, 测量出的双层的极化密度比传统铁电体如 BaTiO<sub>3</sub><sup>[41]</sup>低 3 个量级, 也远低于表 1 中其他二维双层滑移铁电的极化值. 但这样微弱的电极化居里温度竟然达到 350 K, 350 K 以上将转变为顺电态. 研究者们甚至通过将双层 WTe<sub>2</sub> 直接夹在两个石墨烯层之间构造一个简单的器件, 测量发现石墨烯的电导表现出高度可逆的滞回线, 在室温下保持翻转特性, 这一结果表明 WTe<sub>2</sub> 的铁电翻转特性具有足够的鲁棒性, 在室温下能与其他二维材料相结合, 具有潜在的应用价值<sup>[42,43]</sup>. 他们还调查了门电极诱导的电荷掺杂效

应, 结果表明其铁电性和金属性是共存的, 打破了在某些金属晶体中即使出现极化, 极性也不能被翻转的认识, 并发现可以通过改变载流子浓度来调制其性质.

## 2.3 WTe<sub>2</sub> 双层和多层结构中垂直铁电性分析

单层的 WTe<sub>2</sub> 是无极性的, 但是却能观测到双层 WTe<sub>2</sub> 的自发电极化现象, 为之前对范德瓦尔斯双层/多层材料中存在的滑移铁电性的预测<sup>[15]</sup>提供了实验支持. 下面将从第一性原理计算的角度来解释 WTe<sub>2</sub> 薄层铁电翻转的机理. WTe<sub>2</sub> 双层的二稳态 (态 I 和态 II) 结构如图 4(a) 所示, 两者是镜像对称的, 要使态 I 翻转到态 II 只需要层间滑移. 在态 I 中, 沿着  $-x$  方向, Te0 和 Te2 的水平距离为  $x(\text{Te0}) - x(\text{Te2}) = -a = -0.32 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$ ), Te1 和 Te3 的距离为  $x(\text{Te1}) - x(\text{Te3}) = -b = -0.40 \text{ \AA}$ , 通过将态 I 的上层沿着  $-x$  方向移动  $a + b = 0.72 \text{ \AA}$  的距离就可以得到极化方向相反的态 II, 此时  $x(\text{Te0}) - x(\text{Te2})$  和  $x(\text{Te1}) - x(\text{Te3})$  的水平距离分别变为  $b = 0.40 \text{ \AA}$  和  $a = 0.32 \text{ \AA}$ . 图 4(b) 为采用这种滑移方法得到的翻转势垒, 仅约为每个原胞 0.6 meV.

图 4(a) 还列出了非极性的中间态, 其上下两层是等价的, 如 Te0 和 Te3 的位置是完全等价的, 都带有电荷  $0.075 e$ ,  $x(\text{Te0}) - x(\text{Te2})$  和  $x(\text{Te1}) - x(\text{Te3})$  分别为  $(b-a)/2$  和  $(a-b)/2 \text{ \AA}$ . 然而对于态 I, 由于对称性破缺, 上下两层是不等价的: Te0 和 Te3 的电荷分别为  $0.077 e$  和  $0.073 e$ ; Te0-W2 和



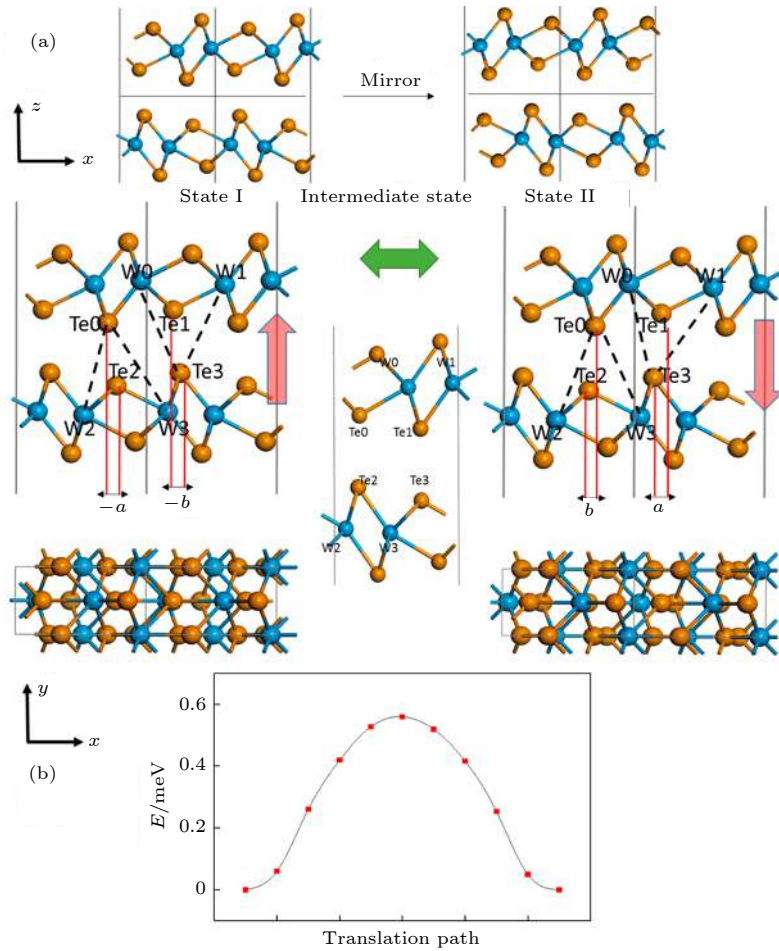


图 4 (a) 最上边的两个结构为双层  $\text{WTe}_2$  的态 I 和相对态 I 的中心水平面进行镜像操作得到极化方向相反的态 II, 下边的图表示滑移的过程; (b) 采用层间滑移的方式使态 I 翻转为态 II 的翻转势垒; 图中天蓝色和橙色的小球分别表示 W 和 Te 原子, 红色箭头代表电极化的方向<sup>[17]</sup>

Fig. 4. (a) Geometric structure of state I of  $\text{WTe}_2$  bilayer and state II obtained by reflecting state I across the central horizontal plane, which can be also obtained by interlayer translation; (b) ferroelectricity switching pathway of  $\text{WTe}_2$  bilayer from state I to state II. Blue and orange spheres denote W and Te atoms respectively, and red arrows denote the polarization direction<sup>[17]</sup>.

$\text{Te0-W3}$  的层间距离分别为  $5.02 \text{ \AA}$  和  $5.71 \text{ \AA}$ , 然而  $\text{Te3-W0}$  和  $\text{Te3-W1}$  的层间距离分别为  $5.23 \text{ \AA}$  以及  $5.42 \text{ \AA}$ . 对于态 II,  $\text{Te0-W2/W3}$  的距离将与  $\text{Te3-W0/W1}$  的距离发生交换,  $\text{Te0}$  与  $\text{Te3}$  上的电荷也将发生交换. 因此上下两层的不等价造成了净层间垂直电荷转移, 产生了垂直电极化, 而层间滑移实现了垂直电极化由向上翻转为向下. 计算的  $\text{WTe}_2$  双层的垂直电极化值约为  $3.2 \times 10^{11} \text{ e/cm}^2$ , 与在  $20 \text{ K}$  下的实验测量值 ( $2 \times 10^{11} \text{ e/cm}^2$ ) 较符合.

如果沿着  $-x$  方向进行层间平移并画出能量曲线, 会出现一个铁电型的双势阱, 表示基态的能量最低点在  $x = \pm (a + b)/2 = \pm 0.36 \text{ \AA}$  处, 对应态 I 和态 II; 如果沿着  $-x$  方向继续进行层间平移, 铁电极化会进一步增大, 在  $x = \pm 0.90 \text{ \AA}$  时极化

达到最大值, 如图 5(a) 所示. 在  $-y$  方向, 能量最低点在  $y = 0$  处, 同时这个点也是极化最大值点, 如图 5(b) 所示. 如果沿着  $-x$  或者  $-y$  方向拖动双层  $\text{WTe}_2$  的上层, 类似之前双层  $\text{BN}$ ,  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{ZnO}$ <sup>[15]</sup>, 层间电压会发生振荡, 产生一个交替变化的电流输出信号, 也可以驱动电子的流动和捕获能量用作纳米发电机. 其层间距离被压缩将导致层间电荷转移增加, 使得垂直电极化进一步增加, 比如层间距压缩 7% 时, 垂直极化将增加 50%, 如图 5(c) 所示.

多层  $\text{WTe}_2$  的铁电翻转机理与双层是相似的, 在此就不再详细介绍. 虽然这些  $\text{WTe}_2$  薄层是金属性的, 但是电子在垂直方向是被限制的, 所以垂直电极化能通过层间滑移被翻转. 这个翻转机制最初还是有争议的, 比如 2019 年《*Science Advances*》上的一篇文章<sup>[44]</sup> 认为多层  $\text{WTe}_2$  是靠层内的等价

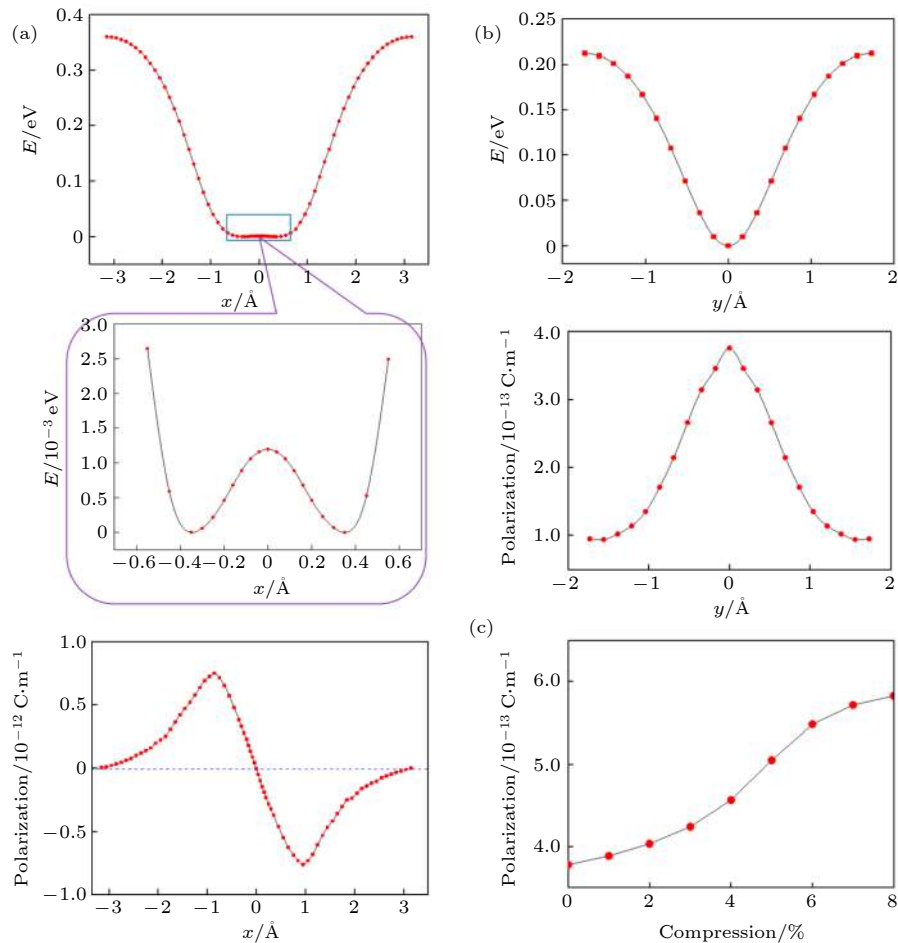


图 5 (a) 当  $y = 0$  时, 沿着  $-x$  方向进行层间平移, 能量和电极化与滑移距离  $x$  的关系; (b) 在  $x = -(a + b)/2$  时, 沿着  $-y$  方向进行层间平移, 能量和电极化与滑移距离  $y$  的关系; (c) 双层  $\text{WTe}_2$  被压缩时, 电极化与层间距被压缩比例的关系<sup>[17]</sup>

Fig. 5. (a) Dependence of energy and polarization on  $x$  along the  $-x$  direction at  $y = 0$ ; (b) dependence of energy and polarization on  $y$  along the  $-y$  direction at  $x = -(a + b)/2$ ; (c) dependence of polarization on the compression of interlayer distance of the  $\text{WTe}_2$  bilayer<sup>[17]</sup>.

形变来翻转铁电极化, 但其势垒较层间滑移高出几个数量级. 而层间滑移的理论解释在 2020 年进一步得到了 Xiao 等<sup>[45]</sup> 研究者的证实: 他们用二次谐波和拉曼光谱测量, 表明在少数层  $\text{WTe}_2$  中电场驱动相的改变, 是源于层间滑移改变了层间堆叠的方式, 同时他们也表明结构堆叠的改变发生在铁电翻转的过程中, 非极性的单斜相为翻转的中间态.

## 2.4 $\beta$ -InSe 薄层中的滑移铁电性

另一个实验证实有层间滑移铁电的体系<sup>[46]</sup> 是  $\beta$ -InSe 薄层, 也是一个典型的二维范德瓦耳斯材料, 可从它的体相中剥离. 它的结构中 In-In 层被夹在两个 Se 层之间, 呈现出无对称中心的典型石墨烯状三角晶格, 如图 6(a) 所示. X 射线衍射的测量结果表明  $\beta$ -InSe 能在室温到  $530^\circ\text{C}$  的温度范围内保持稳定, 比黑磷和  $\text{MoS}_2$  更适合半导体加工.

压电力显微镜 (PFM) 扫描观测到剥离的  $\beta$ -InSe 纳米片 ( $\sim 10\text{ nm}$ ) 在室温下具有明显的面内和面外铁电性质, 如图 6(b) 和图 6(c) 所示. 从图 6(c) 相图中能看见相的翻转大约为  $120^\circ$ , 这一与其他铁电材料不同的地方可能源于本征结构限制了原子位移. 实验还发现在室温下暴露放置 1 个月, 纳米片的蝶形振幅曲线和相翻转  $120^\circ$  滞回线仍然没有改变, 这表明铁电性非常稳定. 同时对它铁电的翻转特性研究发现, 面外铁电相变总是与面内铁电相变一起出现, 面外与面内极化表现出协同效应. 对此解释为层间滑移导致的电荷重新分布能改变层间电势, 造成电子的流动具有方向性, 因此产生了面内与面外电极化. 从图 6(a) 可以看出电荷转移是从下层的 Se 原子转移到上层的 In 原子, 由于层间是范德瓦耳斯力, 因此层间滑移是可行的, 可使层间电荷转移反向, 即实现铁电的翻转.

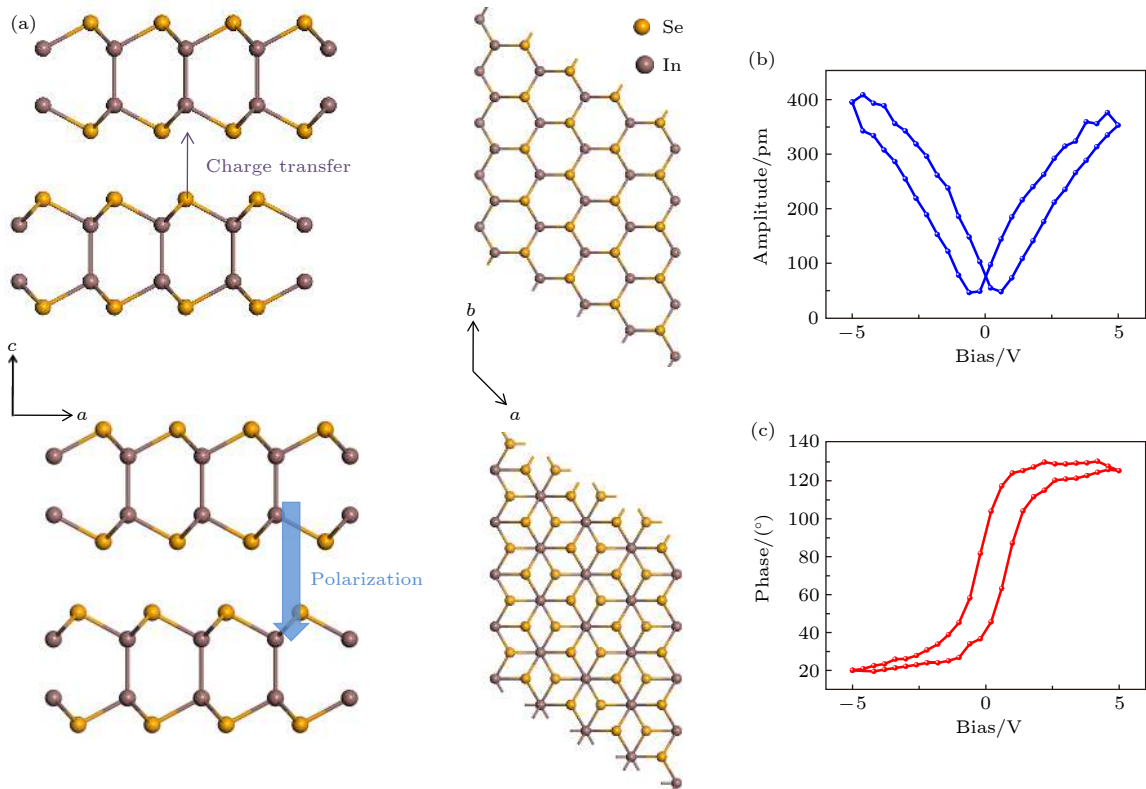


图6 (a)  $\beta$ -InSe 纳米片的晶体结构, 紫色和蓝色的箭头分别表示电荷转移和电极化的方向; 7 nm 厚纳米片的 (b) PFM 振幅曲线和 (c) PFM 相滞回线<sup>[46]</sup>

Fig. 6. (a) Crystal structure of  $\beta$ -InSe. Purple and blue arrows denote the direction of charge transfer and polarizations, respectively; (b) PFM amplitude and (c) PFM phase hysteresis loops on a 7-nm-thick flake<sup>[46]</sup>.

### 3 总结

本文回顾了层间滑移铁电的相关研究, 由于不少双层二维材料的上下两层不对等, 产生了净层间电荷转移和垂直铁电, 并可通过层间滑移翻转. 这种独特的铁电机理可广泛存在于范德瓦耳斯双层、多层乃至体相结构中. 层间平移和电势之间的机电耦合可潜在用于纳米发电机, 而双层系统中层间微小扭角或者应变差能形成具有随空间变化的电势和铁电莫列超晶格. 目前这种滑移铁电机理已经在  $WTe_2$  和  $\beta$ -InSe 双层/多层体系得到实验证实, 我们也期待不少预期极化更高的滑移铁电体系在近期实现.

### 参考文献

- [1] Wu M, Jena P 2018 *WIREs Comput. Mol. Sci.* **8** e1365
- [2] Wu M, Burton J D, Tsybmal E Y, Zeng X C, Jena P 2013 *Phys. Rev. B* **87** 081406
- [3] Kou L, Ma Y, Liao T, Du A, Chen C 2018 *Phys. Rev. Appl.* **10** 024043
- [4] Wu M, Dong S, Yao K, Liu J, Zeng X C 2016 *Nano Lett.* **16** 7309
- [5] Wu M, Zeng X C 2016 *Nano Lett.* **16** 3236
- [6] Fei R X, Kang W, Yang L 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 097601
- [7] Chang K, Liu J W, Lin H C, Wang N, Zhao K, Zhang A M, Jin F, Zhong Y, Hu X P, Duan W H 2016 *Science* **353** 274
- [8] Bao Y, Song P, Liu Y, Chen Z, Zhu M, Abdelwahab I, Su J, Fu W, Chi X, Yu W, Liu W, Zhao X, Xu Q H, Yang M, Loh K P 2019 *Nano Lett.* **19** 5109
- [9] Wu M, Zeng X C 2017 *Nano Lett.* **17** 6309
- [10] Ghosh T, Samanta M, Vasdev A, Dolui K, Ghatak J, Das T, Sheet G, Biswas K 2019 *Nano Lett.* **19** 5703
- [11] Belianinov A, He Q, Dziaugys A, Maksymovych P, Eliseev E, Borisevich A, Morozovska A, Banys J, Vysochanskii Y, Kalinin S V 2015 *Nano Lett.* **15** 3808
- [12] Liu F, You L, Seyler K L, Li X, Yu P, Lin J, Wang X, Zhou J, Wang H, He H, Pantelides S T, Zhou W, Sharma P, Xu X, Ajayan P M, Wang J, Liu Z 2016 *Nat. Commun.* **7** 12357
- [13] Ding W, Zhu J, Wang Z, Gao Y, Xiao D, Gu Y, Zhang Z, Zhu W 2017 *Nat. Commun.* **8** 14956
- [14] Zheng C, Yu L, Zhu L, Collins J L, Kim D, Lou Y D, Xu C, Li M, Wei Z, Zhang Y P 2018 *Sci. Adv.* **4** 7720
- [15] Li L, Wu M 2017 *ACS Nano* **11** 6382
- [16] Fei Z, Zhao W, Palomaki T A, Sun B, Miller M K, Zhao Z, Yan J, Xu X, Cobden D H 2018 *Nature* **560** 336
- [17] Yang Q, Wu M, Li J 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 7160
- [18] Ribeiro R M, Peres N M R 2011 *Phys. Rev. B* **83** 235312
- [19] Constantinescu G, Kuc A, Heine T 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 036104



- [20] Henkelman G, Uberuaga B P, Jónsson H 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 9901
- [21] Shirodkar S N, Waghmare U V 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 157601
- [22] Fan F R, Tian Z Q, Lin Wang Z 2012 *Nano Energy* **1** 328
- [23] Zhang B, Chen J, Jin L, Deng W, Zhang L, Zhang H, Zhu M, Yang W, Wang Z L 2016 *ACS Nano* **10** 6241
- [24] Zhang L, Zhang B, Chen J, Jin L, Deng W, Tang J, Zhang H, Pan H, Zhu M, Yang W, Wang Z L 2016 *Adv. Mater.* **28** 1650
- [25] Zhang L, Jin L, Zhang B, Deng W, Pan H, Tang J, Zhu M, Yang W 2015 *Nano Energy* **16** 516
- [26] Jin L, Chen J, Zhang B, Deng W, Zhang L, Zhang H, Huang X, Zhu M, Yang W, Wang Z L 2016 *ACS Nano* **10** 7874
- [27] Wang Z L, Wang X D 2015 *Nano Energy* **14** 1
- [28] Duerloo K A N, Reed E J 2013 *Nano Lett.* **13** 1681
- [29] Qi J S, Qian X F, Qi L, Feng J, Shi D N, Li J 2012 *Nano Lett.* **12** 1224
- [30] Chen Y, Ke F, Ci P, Ko C, Park T, Saremi S, Liu H, Lee Y, Suh J, Martin L W, Ager J W, Chen B, Wu J 2017 *Nano Lett.* **17** 194
- [31] Jaffe A, Lin Y, Mao W L, Karunadasa H I 2017 *J. Am. Chem. Soc.* **139** 4330
- [32] Wu M, Qian X, Li J 2014 *Nano Lett.* **14** 5350
- [33] Poncharal P, Ayari A, Michel T, Sauvajol J L 2008 *Phys. Rev. B* **78** 113407
- [34] Freeman C L, Claeysens F, Allan N L, Harding J H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 066102
- [35] Sorokin P B, Kvashnin A G, Zhu Z, Tomanek D 2014 *Nano Lett.* **14** 7126
- [36] Naguib M, Mochalin V N, Barsoum M W, Gogotsi Y 2014 *Adv. Mater.* **26** 992
- [37] Ma Y, Dai Y, Guo M, Niu C, Zhu Y, Huang B 2012 *ACS Nano* **6** 1695
- [38] Wu F, Huang C, Wu H, Lee C, Deng K, Kan E, Jena P 2015 *Nano Lett.* **15** 8277
- [39] Wu M 2017 *2D Materials* **4** 021014
- [40] Rajapitamahuni A, Hoffinan J, Ahn C H, Hong X 2013 *Nano Lett.* **13** 4374
- [41] Dawber M, Rabe K, M&Scott J F 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 1083
- [42] Huang B, Clark G, Navarro-Moratalla E, Klein D R, Cheng R, Seyler K L, Zhong D, Schmidgall E, McGuire M A, Cobden D H, Yao W, Xiao D, Jarillo-Herrero P, Xu X D 2017 *Nature* **546** 270
- [43] Mak K F, Lee C, Hone J, Shan J, Heinz T F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 136805
- [44] Sharma P, Xiang F X, Shao D F, Zhang D, Tsymbal E Y, Hamilton A R, Seidel J 2019 *Sci. Adv.* **5** eaax5080
- [45] Xiao J, Wang Y, Wang H, Pemmaraju C D, Wang S, Muscher P, Sie E J, Nyby C M, Devereaux T P, Qian X, Zhang X, Lindenberg A M 2020 *Nat. Phys.* **1** 7
- [46] Hu H, Sun Y, Chai M, Xie D, Ma J, Zhu H 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 252903

SPECIAL TOPIC—Centennial ferroelectricity: New materials and applications

## Research progress of two-dimensional interlayer-sliding ferroelectricity

Zhong Ting-Ting<sup>1)†</sup> Wu Meng-Hao<sup>2)‡</sup>

1) (*Department of Physics, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China*)

2) (*School of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China*)

( Received 29 August 2020; revised manuscript received 15 September 2020 )

### Abstract

In recent years, the existence of ferroelectricity in a series of two-dimensional van der Waals materials has been experimentally confirmed, in which the ferroelectricity induced by interlayer sliding is an important type. This mechanism is not available in traditional ferroelectrics but can be applied to many two-dimensional materials. In this paper we review the relevant researches and introduce the origin of this type of ferroelectricity: in many two-dimensional van der Waals bilayers, the upper layer is not equivalent to the lower layer, thus giving rise to a net interlayer charge transfer and the inducing vertical polarization to be switchable via interlayer sliding. This unique sliding ferroelectricity can widely exist in many van der Waals bilayers, multilayers and even bulk structures. The interlayer sliding barrier is several orders of magnitude lower than that of traditional ferroelectric, which may greatly save the energy required by ferroelectric switching. At present, this type of interlayer sliding ferroelectricity has been experimentally confirmed in  $\text{WTe}_2$  and  $\beta\text{-InSe}$  bilayer/multilayer systems, and more systems predicted to be with much stronger interlayer sliding ferroelectricity (like BN) may be realized in near future.

**Keywords:** two-dimensional van der Waals ferroelectrics, interlayer sliding, nanogenerator, ferroelectric Moire superlattice

**PACS:** 77.84.-s, 81.07.-b, 73.22.-f, 77.55.fp

**DOI:** [10.7498/aps.69.20201432](https://doi.org/10.7498/aps.69.20201432)

---

† Corresponding author. E-mail: [zhongtt@zstu.edu.cn](mailto:zhongtt@zstu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [wmh1987@hust.edu.cn](mailto:wmh1987@hust.edu.cn)