

单层过渡金属二硫化物 1H-1T' 相界面特性研究

Research on the Interface Properties of Monolayer 1H-1T' Transition Metal Dichalcogenides



汇报人：杨磊

导师：夏扬

2023-10-24

目 录

选题背景及意义 (3)

研究方法和内容 (3)

研究计划与进度 (1)

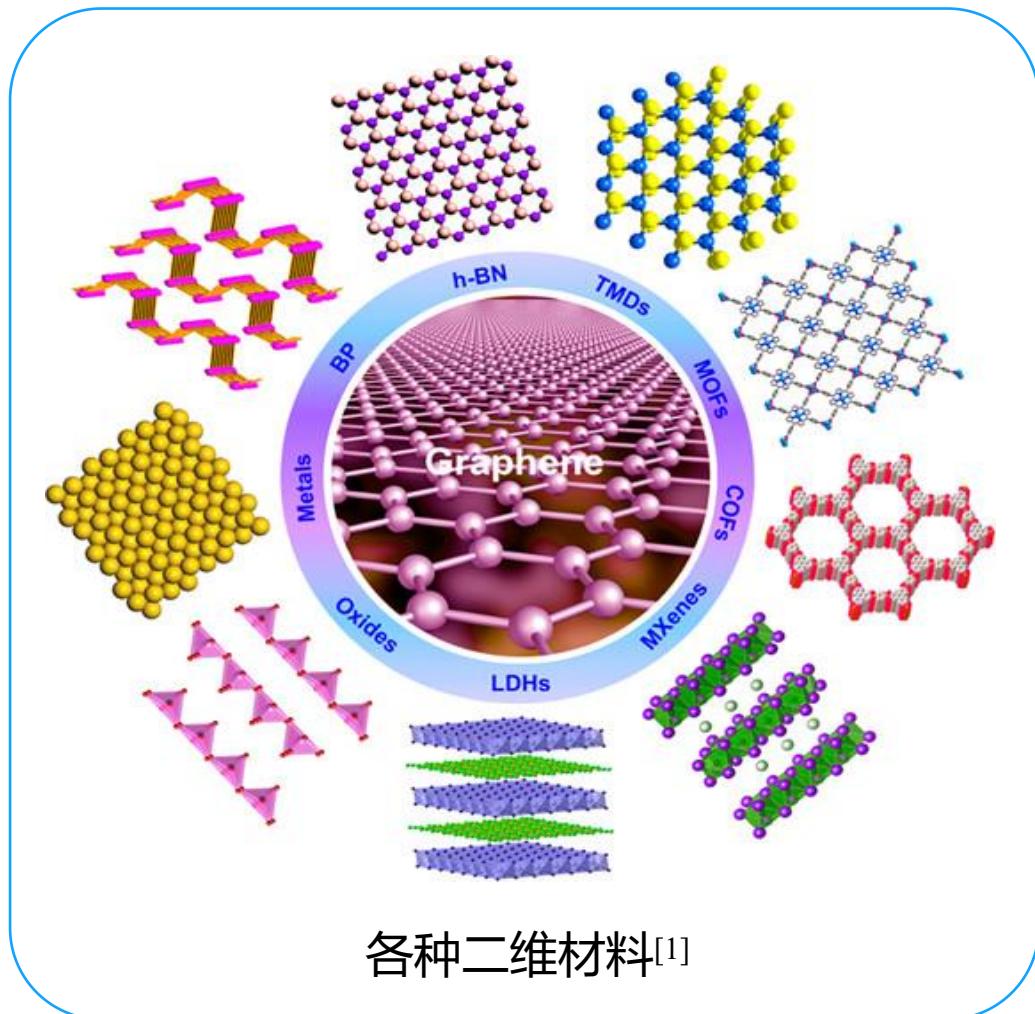
预期成果及创新 (1)



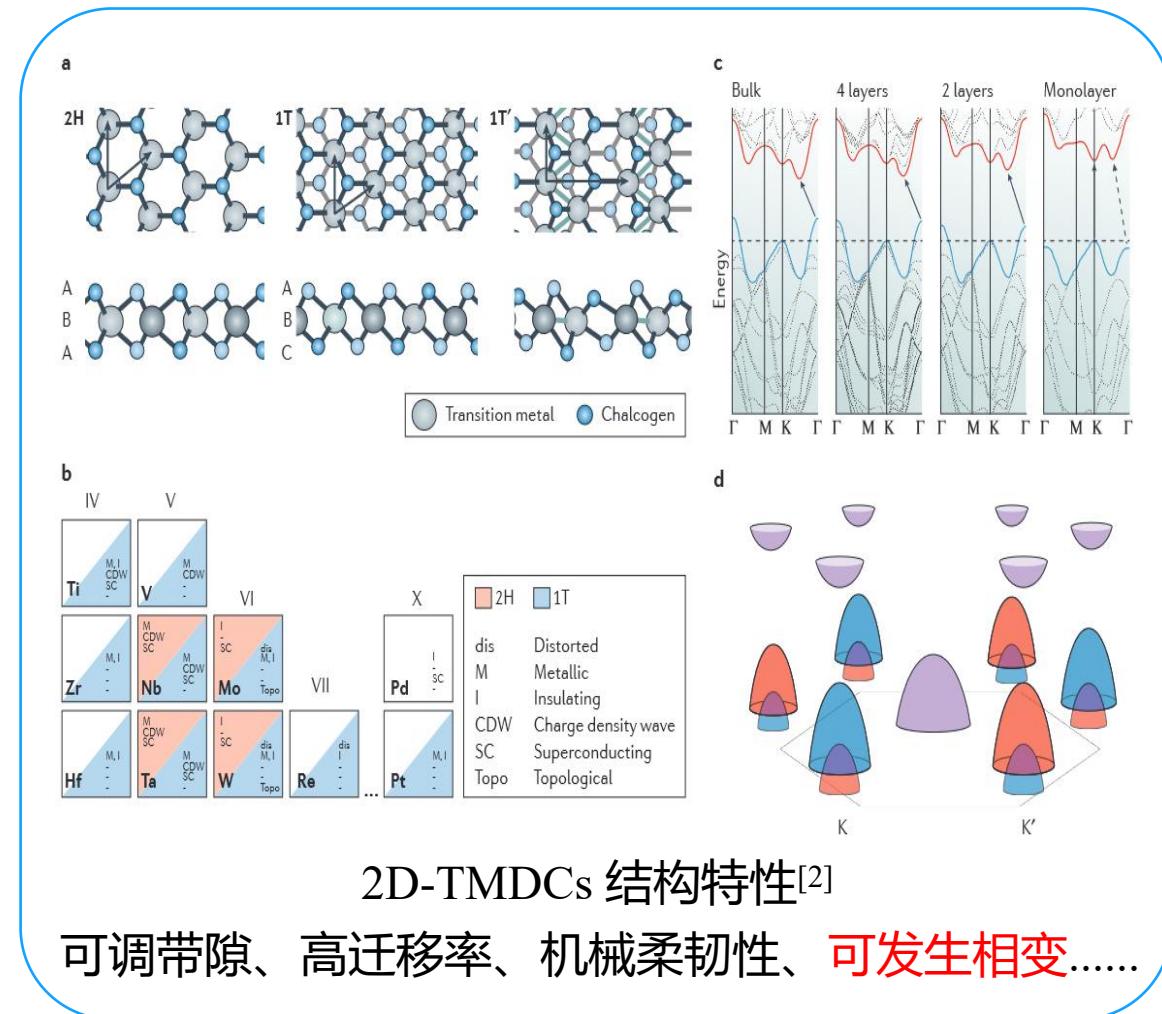
01 选题背景及意义

选题背景及意义

2D material-TMDCs-Properties



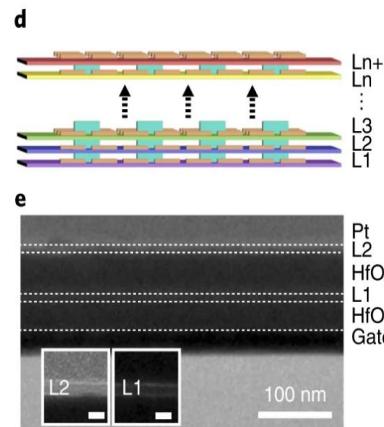
[1] ACS Nano 2015 9 (10), 9451-9469



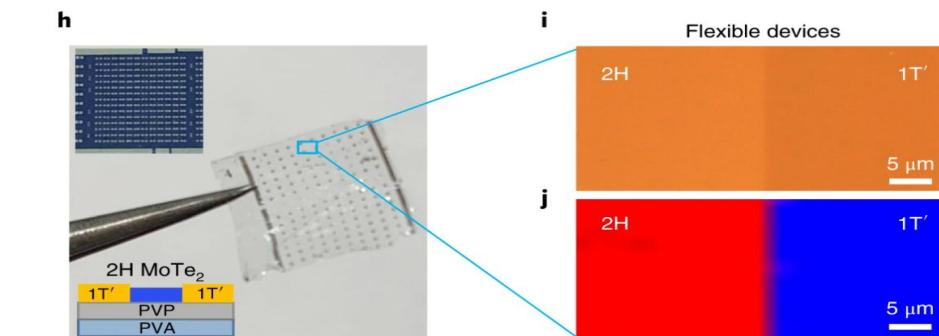
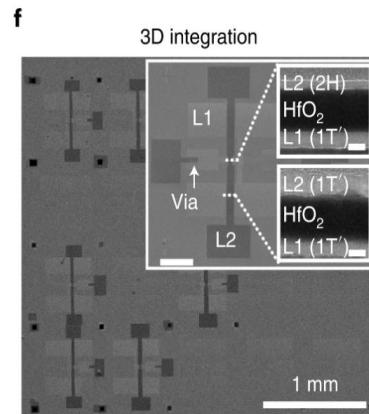
[2] Nat Rev Mater 2, 17033 (2017)

选题背景及意义

TMDCs-2H/1T'-Application

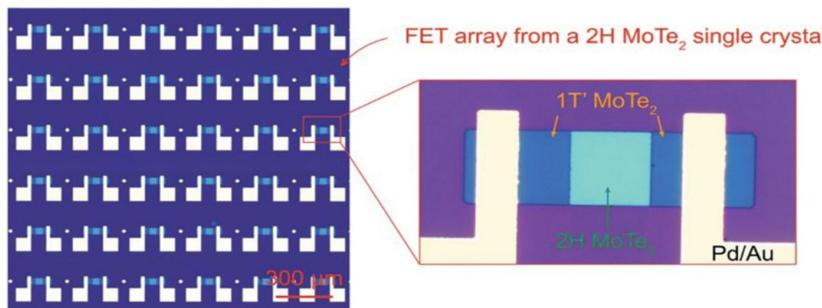


d: 3D集成电路 e, f: MoTe₂ 器件阵列^[2]



h: 可拉伸晶体管阵列的自支撑薄膜^[2]

i, j: PVP/PVA 薄膜上 1T'/2H MoTe₂ 光学图和拉曼图



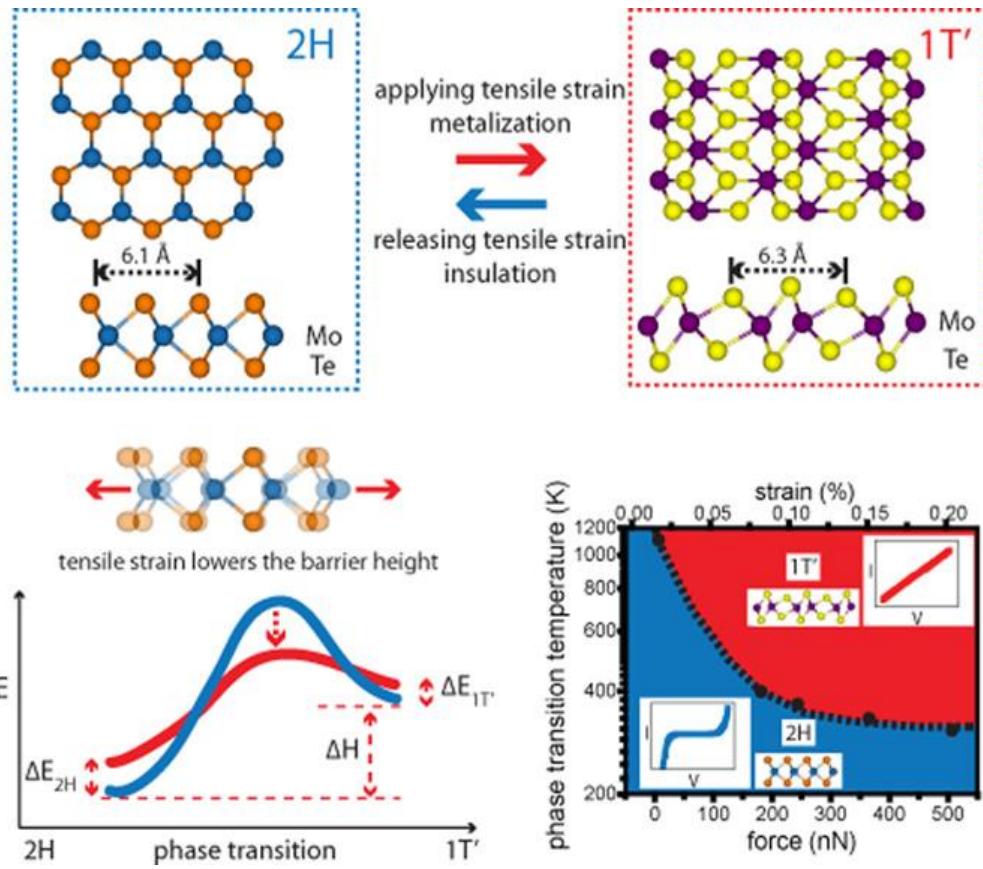
1T'/2H/1T' MoTe₂ FET阵列^[1]



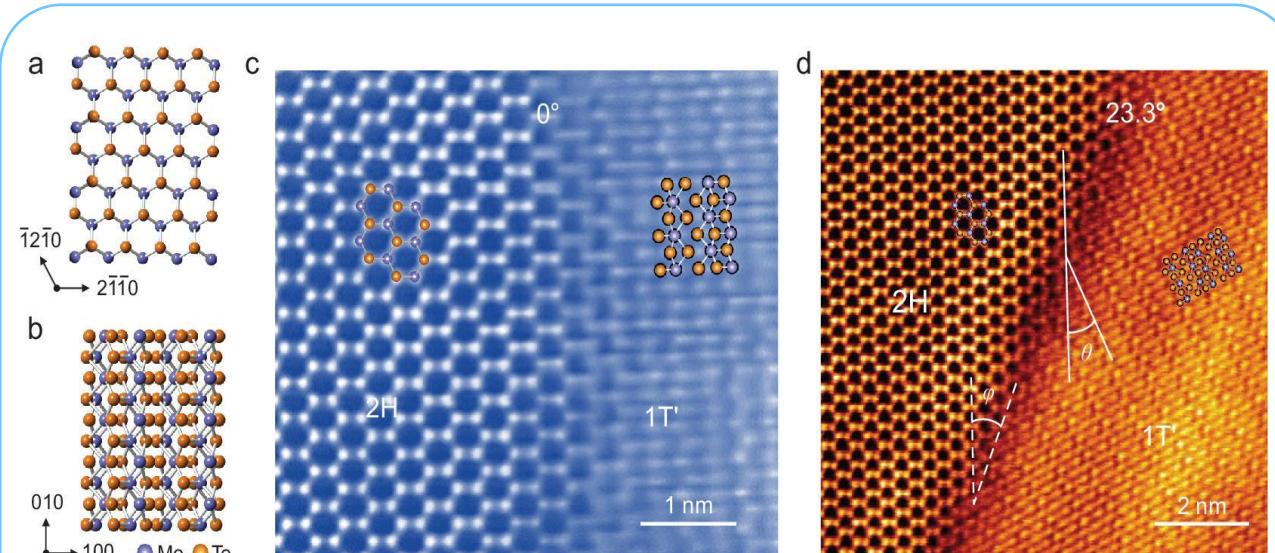
相变可调控性能，利于器件制备
但相变不可避免会产生相界！
目前我们对于相界面的认识尚浅

选题背景及意义

Structural phase transitions in TMDCs



应变诱导 MoTe₂ 发生 2H- 1T' 相转变^[1]



MoTe₂ 2H-1T' 相变产生相界面^[2]



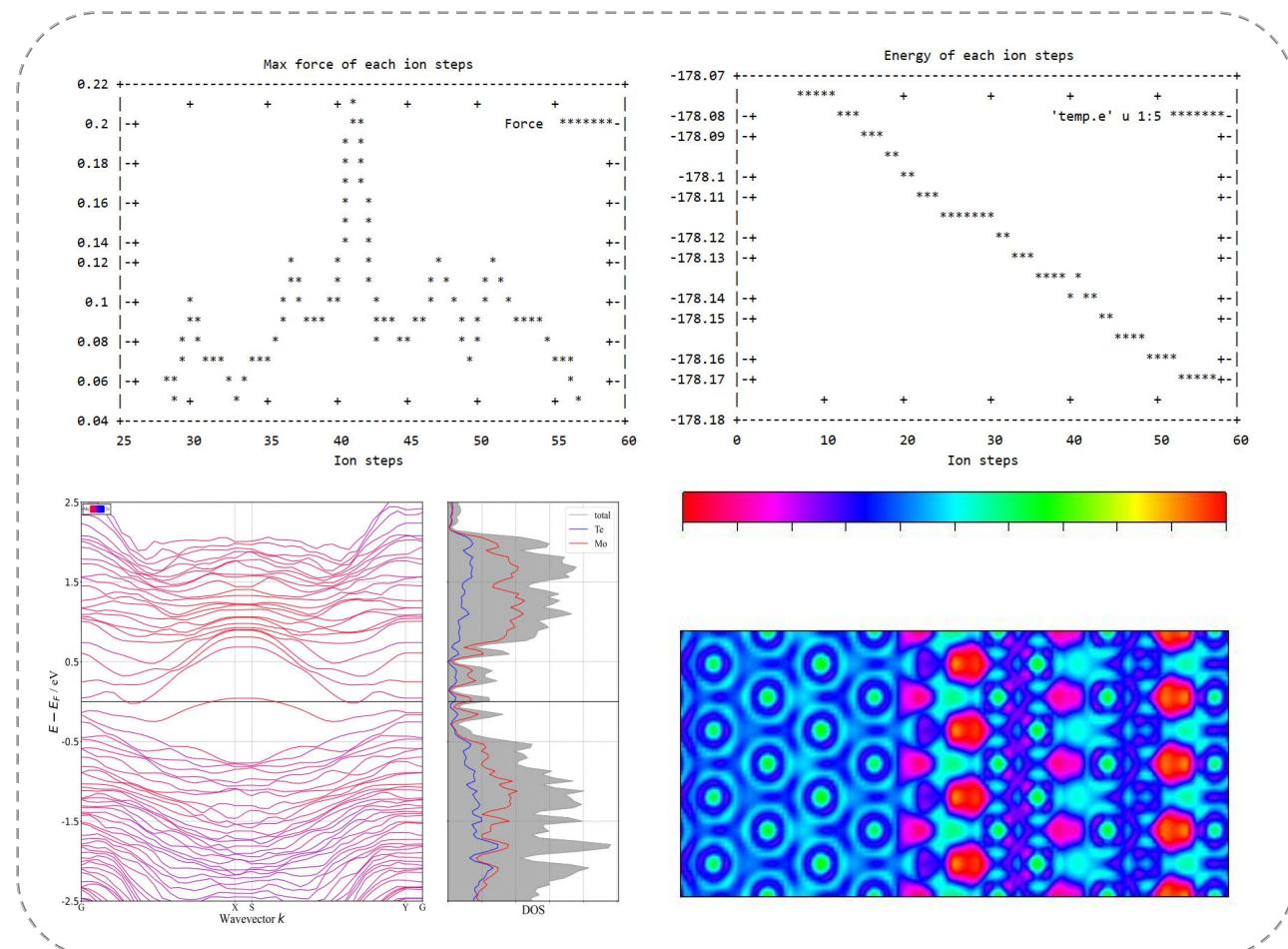
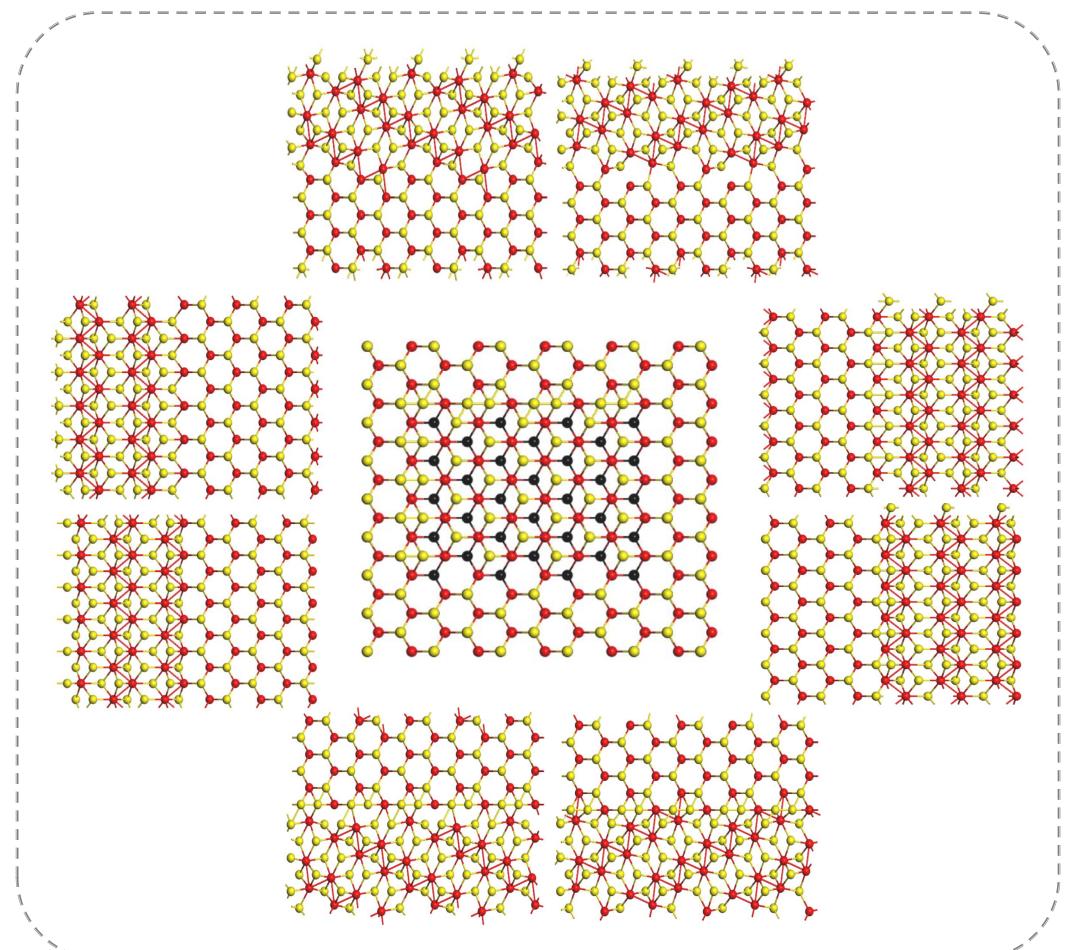
既然相变不可避免会产生相界
那么相界面有哪些类型?
它们各自的性能如何?



02 研究方法和内容

研究方法和内容

单层过渡金属二硫化物 1H-1T' 相界面特性研究

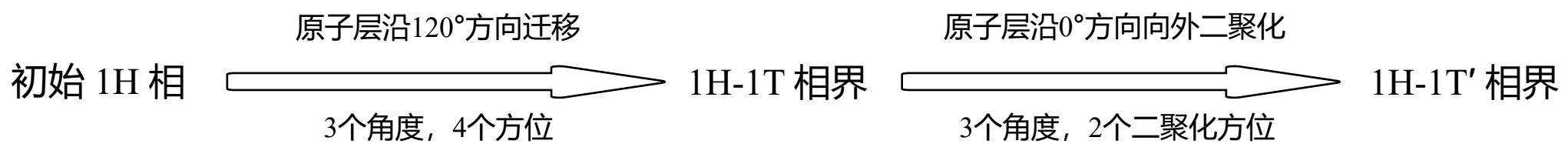
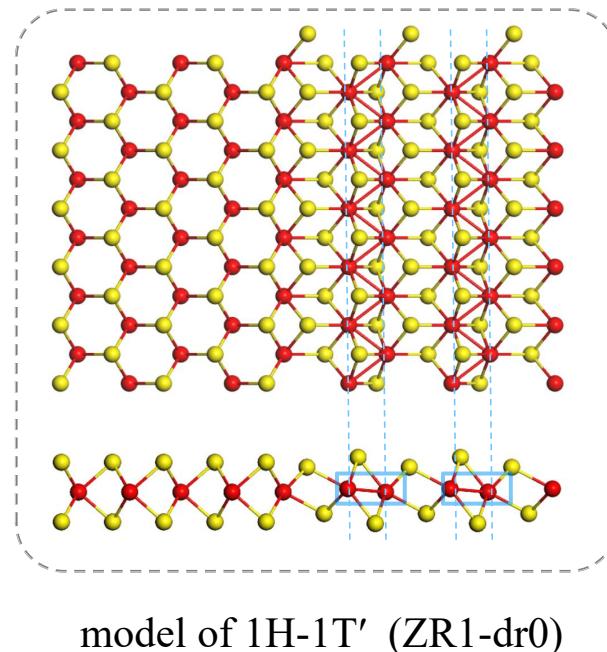
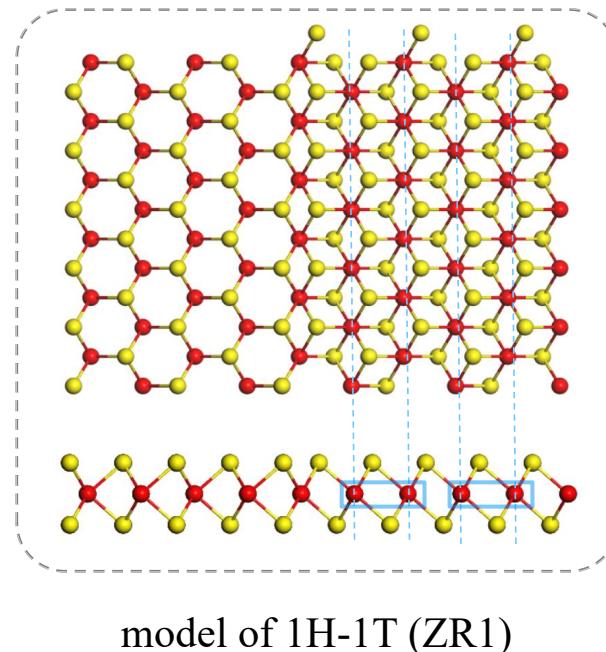
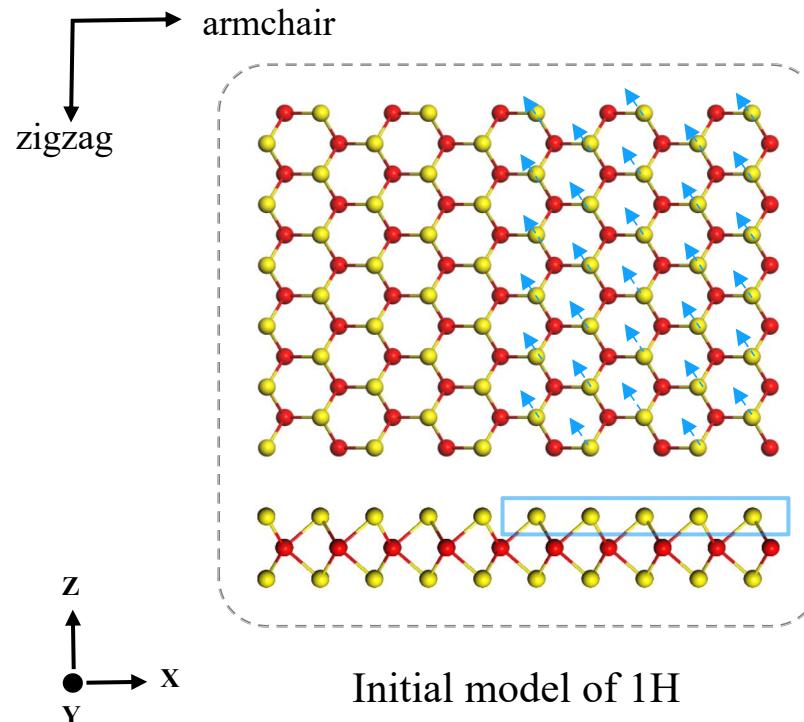


➤ 理论分析：相变法推演 1H-1T' 相界面结构并分类讨论

➤ 性质探究：密度泛函理论分析构型优化、能带、态密度、ELF

研究的前期工作

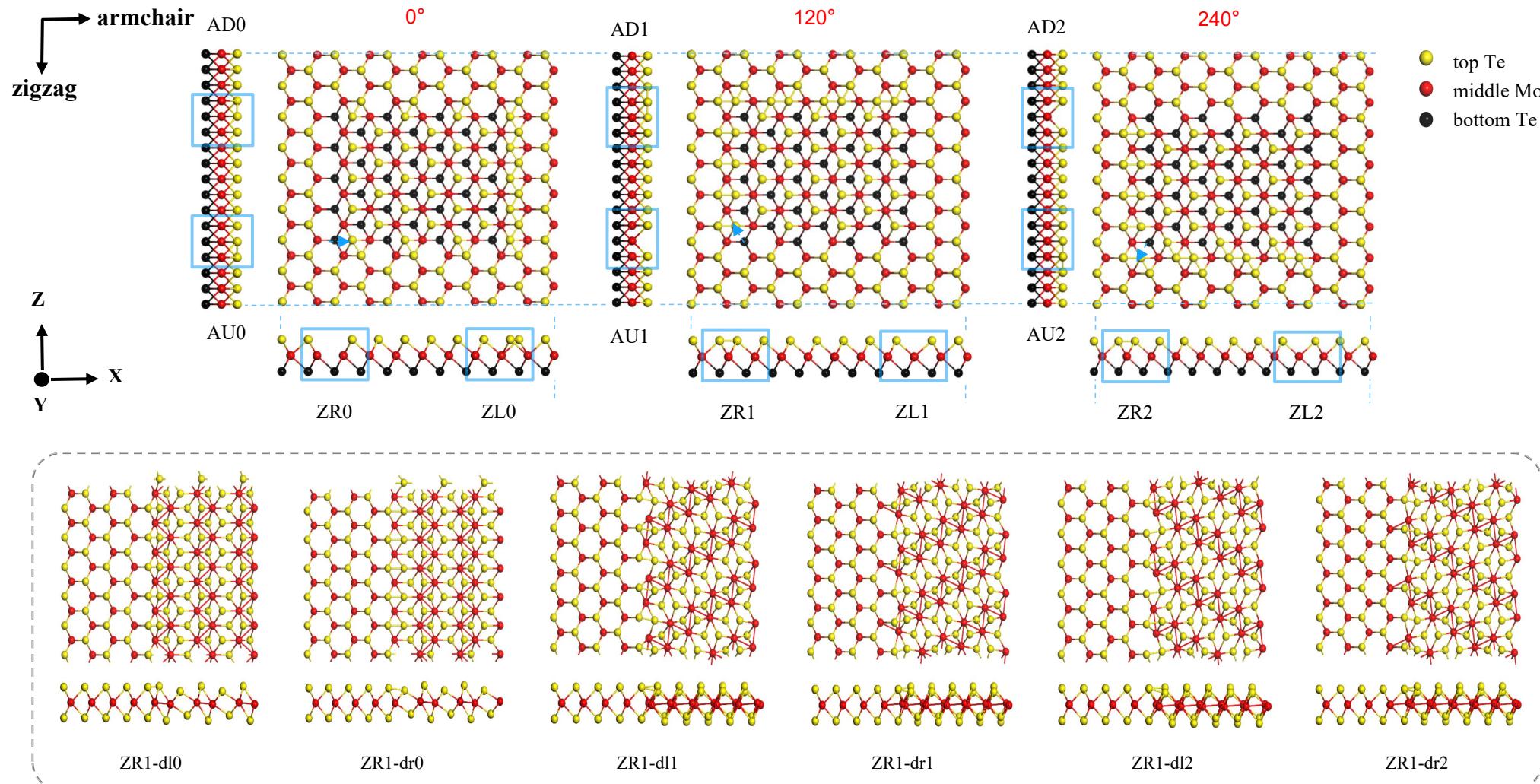
理论分析：原子层迁移相变法推演1H-1T'界面



1H-1T 及 1H-1T' 相界面推演过程

研究的前期工作

理论分析：1H-1T'相界种类



相变法推演结果：60种 1H-1T' 相界模型



03 研究计划与进度

- A 2022.09-2023.03：文献调研；理论学习；熟悉命令行及程序语言；
- B 2023.03-2023.09：搭建计算环境；熟悉计算流程；学习几何建模；
- C 2023.09-2024.03：**建立自由体系相界模型**，完成几何分析及性质计算；
- D 2024.03-2024.06：对数据进行后处理和分析，完成小论文的撰写、修改和投稿；
- E 2024.06-2024.09：建立应变体系相界模型，完成几何分析及性质计算；
- F 2024.09-2024.12：对数据进行后处理和分析，完成大论文的撰写、修改和完善。



04 预期成果及创新



预期成果

从理论上阐明单层第六副族过渡金属二硫化物 1H-1T' 相界种类；明确具有相对最优电学特性的 1H-1T' 相界面结构；



创新点

首次通过相变法系统地分析了单层第六副族过渡金属二硫化物 1H-1T' 相界类型，并结合密度泛函理论探究了不同相界的电学性质，为基于 TMDCs 相工程的器件制备和应用提供了新的思路；

謝 謝
