

南方科技大学优秀硕士学位论文推荐表

学位分会名称： 物理学学科学位评定分委员会 申请人所在院系名称： 理学院物理系

作者姓名	李岱岳	学号	12032023	出生日期	1998.11.16
导师姓名	林君浩	入学年月	2020.09	获硕士学位日期	2023.06
一级学科/专业 学位类别代码	0702	一级学科/专业 学位类别名称	物理学		
论文题目	二维过渡金属硫族化合物的结构修饰与物性研究				
论文英文题目	STRUCTURAL MODIFICATION AND PROPERTY INVESTIGATION OF TWO-DIMENSIONAL TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES				
论文评阅结果	A,A	论文涉及的关键词	过渡金属硫族化合物；二维插层结构材料；超结构；化学气相沉积法；扫描透射电子显微镜		
论文涉及的研究方向	二维材料生长与结构表征；扫描透射电子显微镜				
与硕士学位论文文密切相关的主要创新点	序号	成果名称	成果出处	获得年月	查询信息
	1	Deciphering the structure-photoluminescence correlation at small-tilt-angle grain boundaries in monolayer WS ₂	Applied Physics Letters	2022.08	10.1063/5.0097638
	2				
	3				
	4				
代表成果	5				
论文主要创新点	过渡金属硫族化合物（TMDC）是一类由过渡金属和硫族元素组合而成的范德华材料，其丰富的元素组成和多样的相结构（如 1T、2H、1T'等）使得 TMDC 具有多种物理性质（如半导体、半金属、金属、超导体等），近年来已成为二维材料研究领域的焦点。由于 TMDC 的层间依靠范德华力相结合，因此通过外来原子插入范德华层间形成插层结构的手段，可以改变本征 TMDC				

的层间作用力类型，使其从范德华力转为离子键型或共价键型。并且通过电荷掺杂、轨道杂化等多种效应可以有效改变被插层 TMDC 的本征结构，使其在导电性、光学、磁性等方面展现出独特的性质。然而，关于插层结构的研究多聚焦于块体 TMDC 材料，对二维 TMDC 材料的插层研究十分缺乏。二维插层结构材料不仅同样表现出新颖的物性，而且由于其纳米级别的厚度有利于对插层结构直接进行原子级表征，这对于插层结构材料的结构物性关联研究具有重大意义。

因此，我们合成出一种全新的二维异质插层结构材料——钽插层的二硫化铌（Ta-NbS₂），通过控制 Ta-NbS₂ 的合成条件可以成功调控插层 Ta 原子的插层规律，使 Ta-NbS₂ 展现出不同的周期性超结构。此外，我们在输运测量中发现插层 Ta 原子对母体材料存在显著的调控作用，使 Ta-NbS₂ 表现出反常霍尔效应以及负磁阻效应。论文主要创新点如下：

- 1、我们使用化学气相沉积法（CDV）合成了一种全新的二维异质插层超结构材料——钽插层的二硫化铌（Ta-NbS₂），使用扫描透射电子显微镜精确表征了不同插层浓度下 Ta-NbS₂ 的原子结构，成功解析各个浓度下超结构的形成规律。
- 2、通过控制 CVD 的生长条件可以有效调控插层 Ta 原子的周期性，使 Ta-NbS₂ 在插层浓度分别为 33.3%、43.8%和 44.4%时形成不同的超结构大小和插层规律。在 33.3%浓度时，Ta 原子孤立插层在 NbS₂ 的层间，相距 $\sqrt{3}a$ ，超结构大小为 $\sqrt{3}a \times \sqrt{3}a$ ；当插层浓度提高到 43.8%时，部分 Ta 原子逐渐聚集形成三角形插层 Ta 原子，此时插层原子不仅单个插层在超晶胞的四角，还会在超晶胞内部形成两套取向相反的三角形插层 Ta 原子，此时超结构大小为 $4a \times 4a$ ；插层浓度进一步提高到 44.4%后，插层原子均组成三角形插层 Ta 原子，超晶胞内存在四套三角形 Ta 原子插层，此时超结构大小为 $3\sqrt{3}a \times 3\sqrt{3}a$ 。各个插层浓度的超结构中存在一条内禀的形成规律：所有插层单元互不相邻。即无论是孤立的插层 Ta 原子还是三角形式的插层 Ta 原子，它们与另一个插层单元之间均会被未插层的 Nb 原子间隔。
- 3、在输运测试中我们发现非磁性的插层 Ta 原子会对插层母体材料 NbS₂ 的性质产生显著的调

	<p>控作用。我们发现 Ta-NbS₂ 表现出金属性行为，并且在外场和低温条件下 33.3% Ta-NbS₂ 展现出反常霍尔效应。通过 DFT 计算发现，33.3% Ta-NbS₂ 的反常霍尔由插层 Ta 原子在 d_{xy}、d_{x^2}、d_{z^2} 轨道中不对称的自旋电子态密度所提供的。此外，Ta-NbS₂ 特殊的插层结构使得磁电阻表现出奇特的随磁场增大磁电阻减小的负磁阻现象。</p> <p>综上，我们的工作首次提出了二维异质插层的概念，并且在二维异质插层结构中展现出了奇特的插层规律以及区别于母体材料的新物性，为二维插层研究提供了新的研究思路，对推动低维插层结构材料的合成、表征与物性测量具有重要意义。</p>
培养单位学位 评定分委员会 推荐意见	<p>经审查，本学位论文不涉密，格式规范，“代表性成果”等相关材料和数据准确无误、真实可靠，无学术不端和学术失范行为，满足评选条件，且公示无异议。</p> <p>同意推荐参加校级优秀硕士学位论文评选。</p> <p>学位评定分委员会主任签字：</p> <p>年 月 日</p>

<p>一级学科学位 评定分委员会 推荐意见</p>	<p>经审查，本学位论文不涉密，格式规范，“代表性成果”等相关材料和数据准确无误、真实可靠，无学术不端和学术失范行为，满足评选条件，且公示无异议。</p> <p>同意推荐参加校级优秀硕士学位论文评选。</p> <p>学位评定分委员会主任签字：</p> <p>年 月 日</p>
<p>校学位评定 委员会审定 意见</p>	<p>经校学位评定委员会审定，符合所有申报条件，同意授予本学位论文为“南方科技大学优秀硕士学位论文”。</p> <p>校学位评定委员会</p> <p>年 月 日</p>

注：1. “代表性成果”限填推荐的学位论文作者攻硕期间获得的与硕士学位论文密切相关、并能反映学位论文水平的成果（发表论文为第一作者，或者导师为一作）。可填学术论文、专著、专利、奖励等，但总数不得超过 5 项，且必须是在规定时间内公开发表（含网络在线发表）或审批的。在规定时间内已录用而未发表的学术论文、已受理而未审批的专利和已公示而无批文的奖励等成果，以及在规定时间内外获得的成果一律不计入。

2. “成果名称”栏，可填写论文题目、专著名称、专利名称、奖励名称等。
3. “成果出处”栏，可填写刊物名称、出版机构、奖励发放单位等。
4. “获得年月”栏，可填写论文公开发表、专著公开出版、专利授予、奖励获批的具体年月。
5. “成果查询信息”栏，应填写论文检索号、国际标准书号（ISBN）、专利号、获奖证书号等。填写“检索号”时，若论文被 SCI、SSCI、EI 等检索，则填写论文检索号；否则填写刊物的出版年期。