

# 中国科学技术大学

# 本科毕业论文



## 基于压电阵列的可编程应变控制二 维材料单光子发射

作者姓名： 修中淇

学 号： PB21020666

专 业： 光电信息科学与工程

导 师： 黄声希教授， 王健副研究员

完成时间： 2025 年 6 月 10 日



## 摘要

在单光子发射研究中，二维材料如过渡金属二硫化物，由于其出色的可拉伸性和可调控的电子结构显示出独特的优势。已有研究表明面内应变可以调控二维材料的单光子发射能量，从而实现量子光子学应用中的可调谐单光子源。通过有限元模拟和能带模型的理论结合，研究者们已经深入分析了二维材料中面内应变如何调控其能带结构从而产生需要的单光子发射。但在实际使用中，应变调控如预拉伸，点阵支柱等方法虽然能够实现足够大的面内应变，但其结构上的不可变性导致了应变分布的固定。当实验需要的应变大小改变时，这些方法需要较为复杂且耗时的新基底制备与材料转移。

在工程领域中，研究者们已经对压电材料的力电耦合性质理解较深，确定极化方向后压电材料对外加电压可以精确响应出需要的面内应变。因此，将压电阵列与应变工程相结合，有望实现二维材料单光子发射的可编程控制，为进一步开发量子光子学设备提供了新思路。

本文基于有限元仿真软件，理论上设计并实现了以压电材料阵列作为基底，编程外加电压控制顶部二维材料的面内应变分布。同时，本文对不同电压响应下的上层应变分布做出了理论分析，结合单光子发射理论实现了二维材料中的可调控单光子发射。最后为了使器件的可编程性得到验证，本文基于神经网络构建了电压—应变模型，以仿真结果作为数据集训练后得到应变反馈电压的理论结果并在仿真软件正确验证。

理论表明，通过应变介导的能带梯度调制效应，这种非侵入式应变编程可使过渡金属二硫化物在单层局域区域产生波长可调谐的单光子发射峰。相较于传统机械弯曲应变技术，本方案展现出量子点阵列寻址能力与微纳尺度应变精密操控特性，为光量子芯片的可编程集成提供了新范式。

**关键词：**二维材料，应变，压电材料，单光子发射

## ABSTRACT

Transition metal dichalcogenides, a class of atomically thin two-dimensional (2D) semiconductors, have garnered significant attention in quantum photonics due to their strain-sensitive electronic band structures and mechanical adaptability. Recent advances demonstrate that controlled in-plane strain enables precise tuning of single-photon emission energies in these materials, offering a route toward wavelength-programmable quantum light sources. Theoretical studies integrating finite-element simulations further elucidate how strain gradients locally modify excitonic confinement potentials, thereby activating deterministic single-photon emission sites in monolayer TMDCs. Nevertheless, conventional strain-imprinting methods suffer from fundamental trade-offs: while achieving high strain magnitudes, they impose irreversible strain profiles due to their rigid architectures. Such limitations necessitate repetitive substrate reconfiguration processes. This dichotomy underscores the urgent need for dynamically reconfigurable strain platforms compatible with 2D material systems.

Here, we leverage the voltage-programmable in-plane strain of piezoelectric arrays to enable on-demand control over TMDC band structures. A finite element simulation framework is developed to correlate applied voltages with spatially resolved strain gradients in 2D materials. Quantum optical analysis confirms that these strain gradients induce localized single-photon emission peaks with wavelength tunability.

To validate device programmability, a neural network trained on simulation data establishes a bidirectional voltage-strain mapping and predicts dynamic responses under arbitrary electrical inputs. Cross-verification within the simulation environment confirms nanoscale strain precision.

This non-invasive approach achieves quantum dot array addressing via strain-mediated bandgap modulation, overcoming the spatial resolution limits of mechanical bending techniques. By integrating voltage-driven piezoelectric actuation with 2D material photonics, we advance a reconfigurable platform for scalable quantum light sources, bridging critical gaps in photonic quantum chip integration.

**Key Words:** 2D Material; Strain; Piezoelectric Material; Single Photon Emission

# 目 录

|                           |    |
|---------------------------|----|
| 第一章 绪论 .....              | 2  |
| 第一节 二维材料 .....            | 3  |
| 一、过渡金属二硫化物 .....          | 3  |
| 二、TMDs 的单光子发射 .....       | 6  |
| 第二节 压电材料 .....            | 8  |
| 第三节 神经网络 .....            | 10 |
| 一、神经元基本构成 .....           | 10 |
| 二、神经网络基本算法 .....          | 11 |
| 第二章 单层二硒化钨的单光子发射测量 .....  | 13 |
| 第一节 单层二硒化钨的制备 .....       | 13 |
| 第二节 拉曼光谱测量 .....          | 13 |
| 第三节 光致发光光谱测量 .....        | 14 |
| 第三章 压电阵列设计与面内应变调控 .....   | 18 |
| 第一节 块状压电晶体测试与极化方向选择 ..... | 19 |
| 第二节 压电阵列基础形状设计优化 .....    | 20 |
| 第三节 压电阵列顶层应变控制优化 .....    | 22 |
| 第四节 面内应变分析 .....          | 25 |
| 第五节 基于神经网络的应变-电压控制 .....  | 28 |
| 第四章 总结与展望 .....           | 30 |
| 第一节 工作总结 .....            | 30 |
| 第二节 下一步展望 .....           | 30 |
| 参考文献 .....                | 32 |
| 附录 A 补充材料 .....           | 37 |
| 致谢 .....                  | 38 |

## 第一章 绪论

近年来,由于量子加密算法的进步与量子物理产业的工程部署需求,能产生特定能量单光子发射的各类单光子源也在被大量需要。依靠高纯度与高稳定性的低维单光子源,人们可以仅通过线性光学器件与单光子探测器完成片上的量子光学实验<sup>[1]</sup>。

固态材料中的空位缺陷 (Vacancy defect) 是单晶体系中实现高纯度、高效率量子比特发射的优质候选。这些人工编辑的原子缺陷态具有预定义的自旋态,易于与外加激发光耦合,同时可以在特定偏振下产生稳定的单光子发射 (Single photon emission, SPE)。目前在块状固体材料中,碳化硅与金刚石中的 NV 色心已经被广泛研究,并应用在了各种量子比特的产生上<sup>[2-3]</sup>。但是,这些材料中的光谱扩散 (Spectral diffusion) 明显,相干量子比特阵列产生困难,同时发射的单光子并不在需要的光纤通信波段。所以,开发固态体系中的新型单光子发射源是突破现有技术瓶颈的关键研究方向。

具有单原子厚度的二维材料进入了人们的视野,正如费曼所说:“There’s plenty of room at the bottom”,降低维度后的材料反而具有了作为理想单光子源的潜力。在二维材料体系中,量子限域效应和受限的介质屏蔽作用赋予其独特的光学跃迁特性:辐射跃迁速率和振子强度显著增强;缺陷诱导的辐射复合效率提高;缺陷态能级与带边保持较高隔离度且具有更小的波尔半径<sup>[4-6]</sup>。理论上,二维材料本征的自旋相干时间较长,且其全表面开放特性与平面化构型为光子高效提取、缺陷原子级精准构筑及光电异质集成提供了理想平台。

对于二维材料能带结构的控制,常用的方式有电子束辐射或外加应变,前者通过外加粒子轰击材料表面产生较多的表面缺陷从而发射单光子<sup>[7]</sup>,后者会改变材料的能带结构从而实现单光子发射的选择产生<sup>[8]</sup>。在应变控制领域,对于二维材料来说比较容易的方法为预应变拉伸或纳米点阵支柱,然而这两种方法均缺少了可变性与重复利用性。本文将提出一种新型的压电阵列调控二维材料应变的方式与结构设计,使面内应变实现可编程化调整与重复性使用。

本章将从二维材料特别是过渡金属二硫化物的性质开始,介绍单光子发射的原理与应变调控的机制,然后结合压电材料的力电耦合性质说明压电阵列调控的理论。同时为了使器件可编程化,本章最后将简要说明神经网络训练模型的原理与功能,为应变—电压这一相关关系实现数值模拟的对应。

## 第一节 二维材料

二维材料 (2D Material) 是指原子在二维平面排列的晶体材料，其中的电子仅可在面内与少数层间维度运动。这些材料由一层或几层原子级薄层组成且在一维范围内提供量子约束，可直接与各种光腔和波导集成用于集成光子学<sup>[9]</sup>。二维材料独特的层状结构使其可以在垂直或水平方向通过范德华力堆叠成不同的异质结构，这些成分与光电响应特性各异的堆叠异质结构在光学调制与光电器件领域已经得到了广泛的应用。典型的二维体系除石墨烯外、还包括呈现宽带隙特征的六方氮化硼 (h-BN)、具有各向异性载流子传输性能的黑磷等。在众多的二维材料中，过渡金属二硫化物 (Transition Metal Dichalcogenides, TMDs) 由于其较好的 SPE 波段与丰富的层状结构被深入研究。

### 一、过渡金属二硫化物

#### 1. TMDs 的电子结构

TMDs 材料的化学通式为  $\text{MX}_2$ ，其中 M 是 IVB 到 VII 族的过渡金属（例如 Mo、W、Re 或 Ta），X 表示硫族元素（例如 S、Se 或 Te）。过渡金属层 M 夹置于两个硫族阴离子 X 的六方晶格之间，形成 X-M-X 三明治夹层结构，其中金属原子的电子轨道杂化与硫族元素 p 轨道耦合，赋予其特有的层间范德华间隙和可调谐的介电特性。这类材料不仅展现出跨越绝缘体（如  $\text{MoS}_2$ ）、半导体（如  $\text{WS}_2$ ）、半金属乃至金属（如  $\text{NbSe}_2$ 、 $\text{VSe}_2$  等）的多样导电特性，更蕴含着涵盖量子限域效应、激子物理及自旋轨道耦合等物理内涵，为探索新型量子现象提供了独特的材料平台。

实验证明，从多层样品到单层样品，TMDs 材料的动量空间电子能带结构发生了显著变化，其从多层样品的间接带隙过渡到单层样品的直接带隙，这表明了载流子在这些化合物中的层间跳跃起着重要作用<sup>[10]</sup>。此外，它们的电学特性对应变、压力或温度等外部条件非常敏感，这种调整能带间隙的可能性对于光电纳米器件的实际调谐应用非常有价值。TMDs 具有很强的自旋轨道相互作用，由于缺乏反转对称性，单层样品中能带的自旋变性得以解除。由于时间反转对称性必须得到保留，因此不等价谷中的自旋分裂必须是相反的，这就产生了所谓的自旋-谷耦合。根据密度泛函理论 (Density function theory, DFT) 的计算，表 1.1 展示了不同 TMDs 价带 (Valence band, VB) 与导带 (Conduction band, CB) 在布里渊区相关点的带隙和劈裂。

表 1.1 DFT 计算单层 TMDs 材料带隙结果<sup>[11]</sup>

| 材料                | 带隙 (eV) | VB (K) (eV) | CB (K) (eV) | CB (Q) (eV) |
|-------------------|---------|-------------|-------------|-------------|
| MoS <sub>2</sub>  | 1.715   | 0.153       | 0.0041      | 0.0832      |
| WS <sub>2</sub>   | 1.659   | 0.439       | 0.0333      | 0.339       |
| MoSe <sub>2</sub> | 1.413   | 0.193       | 0.0258      | 0.0         |
| WSe <sub>2</sub>  | 1.444   | 0.439       | 0.0396      | 0.275       |

第一性原理计算表明, 单层 MX<sub>2</sub> 材料均呈现典型的直接带隙半导体特性, 其带隙极值点分布在六方晶格第一布里渊区内具有空间反演对称性的 K/K' 谷 (具体能带间隙见表 1.1)。从轨道成分分析发现, 价带顶 (VBM) 主要由过渡金属 M 的  $d_{x^2-y^2} + d_{xy}$  轨道与硫族原子 X 的  $p_x + p_y$  轨道通过  $\sigma$  型杂化形成, 这种强轨道耦合作用会产生在 K 点附近显著的能谷劈裂效应。另一方面, M 的  $d_{3z^2-r^2}$  对导带边缘的贡献较大, 而 X 的  $p_x$  和  $p_y$  轨道的贡献较小。

TMDs 整个布里渊区的能带结构, 可以通过包含 11 个带的 Slater-Koster 紧束缚模型来描述。这些能带对应于金属 M 原子的五个 d 轨道和单元晶格中两个 X 原子的六个 p 轨道, 基矢可以表示为:

$$(p_x^t, p_y^t, p_z^t, d_{3z^2-r^2}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2-y^2}, d_{xy}, p_x^b, p_y^b, p_z^b) \quad (1.1)$$

其中 t 和 b 代表了 TMDs 的顶部平面与底部平面。

这个较大希尔伯特空间中的模型可以通过幺正操作简化, 将顶部和底部的 x 层的 p 轨道转换成它们相对于 z 轴的对称和反对称组合后, 在降阶希尔伯特空间中间隙上下的相关带内基矢可以表示为:

$$\psi = (d_{3z^2-r^2}, d_{x^2-y^2}, d_{xy}, p_x^S, p_y^S, p_z^A) \quad (1.2)$$

其中 S 和 A 上标是指硫族 p 轨道对称和反对称, 有  $p_i^S = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_i^t + p_i^b)$  和  $p_i^A = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_i^t - p_i^b)$ , 其中  $i = x, y, z$ 。

由以上基矢定义的实空间紧束缚哈密顿量为:

$$H = \sum_{i,\mu\nu} \epsilon_{\mu,\nu} c_{i,\mu}^\dagger c_{i,\nu} + \sum_{ij,\mu\nu} [t_{ij,\mu\nu} c_{i,\mu}^\dagger c_{j,\nu} + \text{H.c.}] \quad (1.3)$$

其中  $c_{i,\mu}^\dagger$  表示于降阶后的希尔伯特空间中, 在原子轨道  $\mu = 1 \dots 6$  的单元格  $i$  中产生一个电子。

## 2. 单层 TMDs 的应变响应

TMDs 的另一个优秀的特性是其高度的可拉伸性以及利用外部应变操纵其电子和光学特性的可能性。因此，应变工程为二维 TMDs 的工程化应用提供了一个完美的平台<sup>[12-14]</sup>。有研究表明，单层 MoS<sub>2</sub> 在受到 2% 的单轴拉伸应变时会经历直接带隙到间接带隙的转变，而在 10%-15% 的双轴拉伸应变下则会发生半导体到金属的转变<sup>[15-17]</sup>。这种从 1.8 eV 至接近 0 eV 的巨大电子带隙可调性在 TMDs 单层中尤为显著，因为这些材料的高拉伸性能够使其在不破裂的情况下承受如此巨大的应变。

鉴于哈密顿方程即式 (1.3) 涵盖了金属原子与硫族原子间的杂化作用，因此在考虑外加应变效应下，它是推导二维 TMDs 有效低能态模型的一个合适出发点。在动量场和应变场中进行泰勒展开，然后在两个低能带(价带和导带)上进行正则投影。类似碳纳米管和石墨烯，我们可以推导出包括由应变引起的跳跃积分修正的影响的哈密顿量。在 K 点附近的应变相关的哈密顿量，可以写成  $H = H_0 + H_{so}$  且有：

$$H_0 = \frac{\Delta_0 + \Delta\sigma_z}{2} + \mathcal{D} + t_0 a_0 \left( \mathbf{q} + \frac{e}{\hbar} \tau \mathbf{A}_1 \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}_\tau + \frac{\hbar^2}{4m_0} \left( \left| \mathbf{q} + \frac{e}{\hbar} \tau \mathbf{A}_2 \right|^2 \alpha + \left| \mathbf{q} + \frac{e}{\hbar} \tau \mathbf{A}_3 \right|^2 \beta \sigma_z \right) \quad (1.4)$$

$$H_{so} = \left\{ \frac{\lambda_0 + \lambda\sigma_z}{2} + \delta\lambda + a_0^2 \left( \left| \mathbf{q} + \frac{e}{\hbar} \tau \mathbf{A}_4 \right|^2 \lambda'_0 + \left| \mathbf{q} + \frac{e}{\hbar} \tau \mathbf{A}_5 \right|^2 \lambda'_0 \sigma_z \right) \right\} \tau s \quad (1.5)$$

其中  $e$  是基本电荷， $m_0$  是自由电子质量， $\boldsymbol{\sigma}_\tau = (\tau\sigma_x, \sigma_y)$  是  $2 \times 2$  能带空间中的泡利矩阵， $s = \pm 1$  和  $\tau = \pm 1$  分别是自旋指数和谷指数。 $a_0 = \frac{a}{\sqrt{3}}$  与  $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$  是相对于 K 点的相对动量。 $\Delta_0, \Delta, \lambda_0, \lambda, \lambda'_0, \lambda', t_0, \alpha$  和  $\beta$  均为应变无关参数，可直接由式 (1.3) 哈密顿量中的 Slater-Koster 参数得到。

如果在一个特定的区域使单层 TMDs 变形（例如 AFM tip），我们可能获得一个连续变化的局部应变剖面。当 TMDs 薄膜的中心点发生变形时，周围的电子、空穴和激子的能级也会被动产生应变相关的调制。在外加光束激发产生电子-空穴对时，由于激子结合能在形变点附近的梯度存在，它们被迫聚集并向膜中心迁移，其中应变最大处带隙最小。因此，应变梯度可以用来将激子集中在晶体的一个小区域，激子的空间凝聚对于基础物理的发展具有重大意义。

在 Castellanos-Gomez et al.<sup>[18]</sup> 2013 年的实验工作中，单层 MoS<sub>2</sub> 层受到大小为 2.5%，由弹性体基底的可控分层诱导的局部褶皱应变。研究者利用扫描拉曼

光谱和光致发光成像表征，在空间上发现了由局部应变引起单层 MoS<sub>2</sub> 的高达 90 meV 的直接带隙降低；同时，研究者观察到了激子的漏斗聚集效应，其中激子在重新结合之前漂移了数百纳米到较低的带隙（较高应变）区域，表明激子位置受到局域应变的调控。

因此，面内应变调控 TMDs 能带这一工作为开发新型量子信息处理技术开辟了全新的道路。通过精确控制应变，我们可以有效地调节单层 TMDs 的光学和电学性能，从而实现对单光子发射的精细操控，这对于下一代量子通信和计算设备至关重要<sup>[19-20]</sup>。

## 二、TMDs 的单光子发射

单光子发射（Single photon emission, SPE）来源于能级量子系统中的光学跃迁，其每次仅发射一个光子。最简单的情况下，SPE 可以由二能级系统产生：从基态被驱动到激发态后，激发态的自发辐射或受激辐射会产生具有特征速率  $\gamma_{sp}$  的单个光子。在非共振光致发光（Photoluminescence, PL）光谱中，材料中的 SPE 是一个离散的峰（零声子线），理想情况下其谱宽仅由  $\gamma_{sp}$  决定。

从 2015 年单层与双层 WSe<sub>2</sub> 中的 SPE 被发现开始，WS<sub>2</sub> 与其他 TMDs 中的 SPE 谱线均被逐步观察到并证实其发射出单光子的反聚束效应<sup>[21-23]</sup>。测量谱线中显示，TMDs 中的 SPE 能量低于二维自由激子 10-200 meV 且是正交线性极化的，同时谱线表现出较大的塞曼效应并产生了 1 meV 的零磁场谱线劈裂<sup>[24-26]</sup>。这表明单层 TMDs 中的 SPE 可能来源于单层缺陷中各向异性约束势俘获的中性激子，其中零磁场劈裂来源于电子-空穴交换相互作用产生的精细结构分裂（Fine-structure splitting, FSS），而这个劈裂的数量级较大则是由于 TMDs 中的强库仑相互作用。时间分辨 PL 显示，单层 TMDs 中的 SPE 寿命在几十纳秒，同时  $g^{(2)}(0) \ll 0.5$  表明其具有反聚束效应与较高纯度，但其缺陷在于 SPE 仅能在低温（10 K）下获得，且单个光子缺陷态发射的微观解释仍有争议<sup>[9,27]</sup>。

为了更好调控 TMDs 中的 SPE 产生，研究者们尝试将 WSe<sub>2</sub> 薄片转移到光刻制造的阵列纳米柱上，产生点状应变扰动从而局部修改电子能隙<sup>[13,28-30]</sup>。基于式（1.4）与式（1.5）进行的 DFT 计算与实验结果均证实，在高度 200 nm 和直径为 300 nm 的纳米柱上 WSe<sub>2</sub> 薄片可以产生带宽为 50 meV 的应变。在这个局部应力点附近的光学激子能够扩散到势能最小值处（即应变最大处），为 SPE 的产生构建了一个有效的激子聚集漏斗。

值得注意的是，纳米柱或者纳米气泡产生的局部应变尺度在 100 nm 左右，

显著大于 TMDs 中激子的玻尔半径。这表明应变附近的 SPE 产生不完全来源于局部应变，而是局部应变与环境和晶体缺陷的结合。<sup>[19,31]</sup>

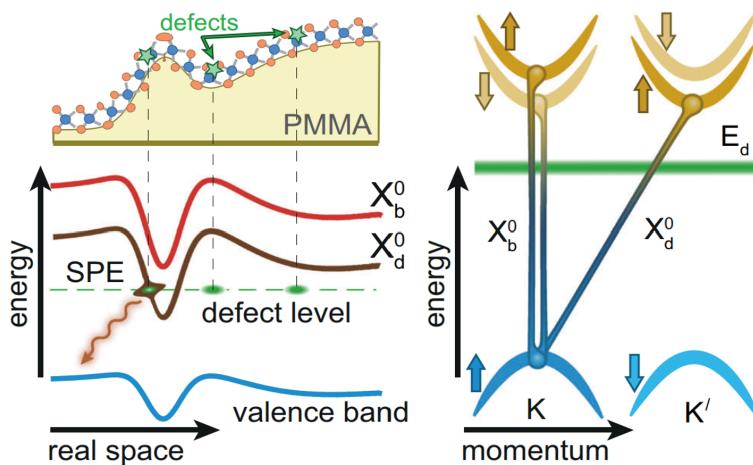


图 1.1 二维材料在应变调控下，实空间与动量空间电子结构示意图<sup>[8]</sup>

如图 1.1 所示，通过施加面内应变梯度，晶格对称性破缺将导致布里渊区  $K$  点处的光学暗激子 ( $X_0^d$ ) 与点缺陷局域态 (绿色虚线) 形成能量匹配。这种暗激子态具有禁戒光学跃迁特性，在散射过程中占据缺陷态时，其跃迁选择定则被部分解除，从而实现量子态亮化。当外场施加面内应变时 (对应的应变能约 1-20 meV)，TMDs 单层的禁带宽度将发生 0.05-0.5 eV 的连续可调变化。<sup>[19,31]</sup> 此过程中，缺陷态对应变响应较小，而暗激子能级则通过形变势耦合 (100 meV/%) 敏感响应应变场调控，二者产生动态匹配最终实现了 SPE。<sup>[20]</sup> 引入线性坡度应变 (纳米柱) 可构造量子点状限域势场，通过调控局域态密度增强激子-缺陷散射概率，使得单光子发射效率提升 1-2 个数量级<sup>[32-35]</sup>。这种机械-光电耦合机制不仅为单光子源的按需构筑提供重要手段，更展现出了 SPE 的动态可重构性与波长可编程性，同时应变产生的均匀应力分布可抑制晶格振动模式混叠，使得激子退相干时间延长<sup>[36-37]</sup>。

在 hBN 双层封装的单层 MoS<sub>2</sub> 体系中，通过氦离子束光刻选择性剥离硫原子形成 S 空位复合中心，研究者实现了 SPE 的寿命延长与单光子纯度的提高，结合栅压调控还可以得到 SPE 阵列中某些位点的可逆激活<sup>[12,38]</sup>。通过范德华异质结构与能带工程设计，薄层 TMDs 中的 SPE 可以实现单光子 LED 发光：研究者采用 Gr/hBN/TMDs 水平异质结，石墨烯电极与 MoS<sub>2</sub> 对齐形成欧姆接触。当施加横向偏压时，hBN 势垒触发 Fowler-Nordheim 隧穿，最终实现了整个器件的高注入载流子浓度与量子效率<sup>[39]</sup>。

目前 TMDs 中的 SPE 有以下热门的研究方向：(1) 片上集成：硅波导耦合实

验显示, SPE 与氮化硅光子晶体腔的集成使可以极大提高光子提取效率; (2) 波长调控: 通过双轴应变与载流子浓度的非线性耦合, 实现范围内单个 SPE 的连续光谱调节; (3) 时间同步: 电泵浦激发的光子发射时序抖动降低, 满足量子密钥分发的时间窗口要求。

## 第二节 压电材料

压电现象与压电材料的系统性研究可追溯至 19 世纪末。1880 年, Pierre Curie 在研究热释电效应与晶体结构对称性关联时, 首次在  $\alpha$ -石英单晶中观测到机电耦合现象, 并据此研制出首台压电式精密测量装置。在理论方面, Voigt 于 1894 年通过宏观热力学势函数推导建立了完整的压电本构方程体系, 同时他分析了压电效应与晶体对称性的关系并定义了压电张量与弹性张量等物性参数。目前压电学已经形成了较为系统的理论体系, 并且建立了十分完善的基于应力应变分析的压电效应理论。<sup>[40]</sup>

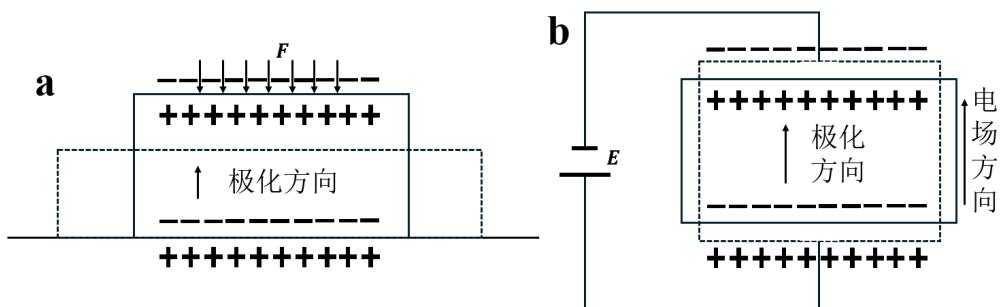


图 1.2 材料内部压电效应示意图  
a. 正压电效应, 外加应力产生电荷。b. 逆压电效应, 外加电势产生形变。

如图 1.2 所示, 在机械应力加载条件下, 压电晶体会在特定晶向表面产生自发极化电荷分布, 表现出严格的电荷对称特性——即相互平行的晶面会产生等量异号表面电荷。这种不依赖外电场激励, 纯粹由应变诱导的本征电极化的行为被定义为正向压电效应, 从热力学角度而言, 该效应本质上是晶体点阵应变与极化矢量之间的线性耦合响应。与正压电效应相反, 当外加晶体极化方向的电场时, 晶体会在感应极化的同时产生整体的应变与内部的应力, 这种电场诱导晶体内部应变产生的现象称为逆压电效应。正逆压电效应常应用与机械能和电能的转换, 分别用于传感器与驱动器上, 压电效应也反映了晶体弹性性能与节点性能的耦合。

具有显著压电响应的介电材料统称为压电材料, 根据晶体结构特征与制备工艺差异, 现代压电材料主要呈现三类典型形态: (1) 本征压电单晶: 以石英晶

体为代表。包括  $\text{LiNbO}_3$  等非中心对称单晶材料；(2) 铁电多晶陶瓷：典型代表为锆钛酸铅 (PZT 系列)；(3) 功能复合压电材料：涵盖压电半导体 (如  $\text{ZnO}$ )、弛豫铁电单晶 (PMN-PT) 及有机压电聚合物等新兴体系。由于石英晶体的压电响应较差且价格偏贵，所以实验常用人工极化的压电陶瓷 PZT，其灵敏度高且工艺完善，多用于逆压电执行器<sup>[41-42]</sup>。

压电常数可以直观反映材料的压电性能，压电常数大的材料其压电性能越好，在实际使用时灵敏性就越好。该参数不仅体现力学激励到电信号响应 (正压电效应) 的转换能力，同时也表征反向电驱动产生形变 (逆压电效应) 的效率，二者遵循能量互易性原则。正压电效应描述了晶体感生的电极化强度  $\mathbf{P}$  与所施加应力  $\mathbf{T}$  之间的线性关系，可写成：

$$\mathbf{P} = \mathbf{dT} \quad (1.6)$$

式中， $\mathbf{d}$  为压电常数，其物理意义为单位应力所产生的电极化强度，也称为压电应变系数，压电材料逆压电效应压电常数与正压电效应压电常数相等。三阶耦合张量  $\mathbf{d}$  的每个分量  $d_{ij}$  表征三个空间维度间的机电耦合程度，其中索引  $i$  对应极化平面法线方向， $j$  表示施加力学激励的方向。对于三维空间晶体，式中的应力  $\mathbf{T}$  是二阶张量，电极化强度  $\mathbf{P}$  是矢量， $\mathbf{d}$  为一个三阶张量，应该包括 27 个分量。由于应力张量可以简化为列向量  $\mathbf{T}_i$  ( $i=1,2\cdots,6$ )，同时考虑到晶体对称性约束和 Voigt 记法优化，完整的 27 分量张量  $\mathbf{d}$  可降维映射至简化的 6 自由度体系，形成简化压电常数矩阵：

$$(d_{ij}) = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

压电材料的本构方程称为压电方程，它们是一对反映压电体中力学量  $\mathbf{S}, \mathbf{T}$  和电学量  $\mathbf{E}, \mathbf{D}$  之间相互关系的方程组。其机电耦合行为可通过热力学状态函数进行系统描述。在忽略磁化强度影响 ( $\nabla \times \mathbf{H} \approx 0$ ) 的准静态条件下，通过 Legendre 变换构建 Gibbs 自由能函数：

$$G(\mathbf{T}, \mathbf{E}) = \frac{1}{2} s_{ij}^E T_i T_j + d_{mk} T_m E_k + \frac{1}{2} \epsilon_{kn}^T E_k E_n \quad (1.8)$$

当压电执行器满足机械自由边界 ( $\mathbf{T}|_{\partial\Omega} = 0$ ) 与电学短路条件 ( $\mathbf{E}|_{\partial\Omega} = 0$ ) 时，通过对势函数求偏导可获得第一类压电方程：

$$S_i = \left. \frac{\partial G}{\partial T_i} \right|_{\mathbf{E}} = s_{ij}^E T_j + d_{ki} E_k \quad (1.9)$$

$$D_m = -\frac{\partial G}{\partial E_m} \Big|_T = d_{mj} T_j + \epsilon_{mk}^T E_k \quad (1.10)$$

上述三表达式中力学指标满足 Voigt 标记规则:  $i, j \in \{1, \dots, 6\}$ , 电学分量遵循笛卡尔坐标:  $m, k \in \{1, 2, 3\}$ 。其中的材料参数定义为:

- $s_{ij}^E|_{E=0}$ : 短路弹性顺度常数 (电场为零时的机械响应);
- $\epsilon_{mk}^T|_{T=0}$ : 自由介电常数 (应力等于零时的电极化能力);
- $d_{ki}, d_{mj}$ : 机-电耦合系数张量 (满足能量互易性  $d_{ki} = d_{ik}^T$ )。

### 第三节 神经网络

人类大脑皮层约包含 860 亿个神经元, 通过突触连接形成复杂的信号传递网络。这种生物神经网络展现出的分布式计算、容错性及自适应学习能力, 启发科学家们开发出了人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN)。1943 年, McCulloch 和 Pitts 首次提出二元阈值神经元模型<sup>[43]</sup> (M-P 模型), 通过数学抽象描述神经元的激活特性: 神经元放电是一种二进制操作, 仅当输入刺激总和超过阈值时产生脉冲输出

$$y = \Theta \left( \sum_{i=1}^n w_i x_i - \theta \right) \quad (1.11)$$

其中  $\Theta$  为阶跃函数,  $\theta$  为神经元的触发阈值。

#### 一、神经元基本构成

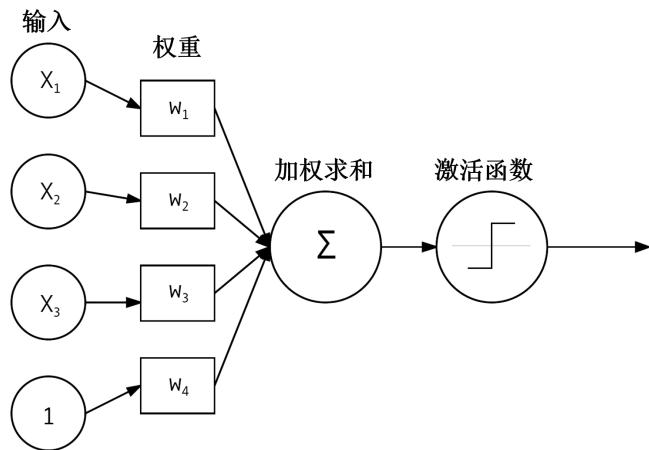


图 1.3 单个神经元运算功能示意图

一个基本 ANN 如图 1.3 所示, 它对输入  $x_1, x_2, x_3$  执行简单的加权求和 (权重为  $w_1, w_2, w_3$ ) 并判断激活函数输出。常数值 1 类似线性回归中的零次项, 是 ANN 的偏置单元。将这些输入视为 ANN 的输入特征向量, 设神经元激活函数为

$f(x)$ , 神经元输出为  $h(x)$ , 则上面的 ANN 可以表示为:

$$h_{\omega}(x) = f(\omega^T x) \quad (1.12)$$

由于非线性激活函数  $f(x)$  的加入, 神经网络由简单的线性求和变为了非线性的拟合判断, 由此我们可以通过 ANN 拟合非常复杂的非线性函数。

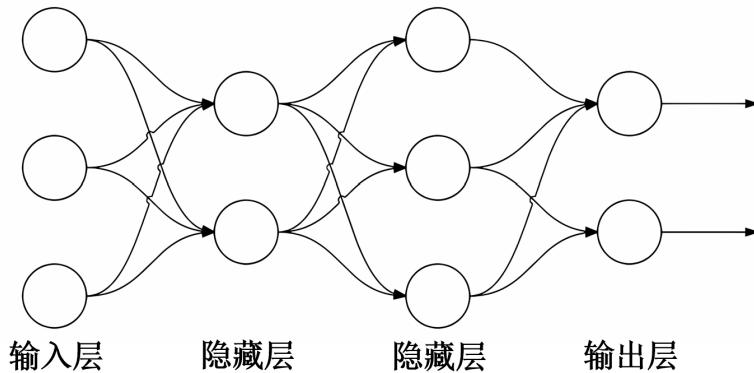


图 1.4 完整 ANN 模型示意图

一个较为完整的前馈 ANN 模型如图 1.4 所示, 初始层级负责接收外部特征数据称为输入层, 末端层级生成最终预测结果称为输出层, 介于两者之间的层级集合统称为隐藏层。完整模型的实际表征能力主要取决于其隐藏层结构的深度(层数)与宽度(单层节点数量), 当隐藏层拓扑复杂度提升时显然其可构建更具普适性的函数映射, 但同时增加的复杂度会导致梯度优化空间呈现更高维度的非凸性, 即模型更难以训练完成。<sup>[44-45]</sup> 需要特别说明的是, 网络中的可训练参数特指通过反向传播算法自适应优化的连接权重与偏置量; 而网络拓扑元参数(如总层数、隐藏层节点个数层数配置等)作为静态架构约束, 需在训练前通过超参数搜索策略确定。

给神经网络提供输入向量  $x$ , 让它根据自己的权重矩阵  $\omega$  输出对应的激活函数值  $f(\omega^T x)$  的过程称为前向传播。由此我们可以通过第  $n$  层的激活函数值与第  $n+1$  层的权重递推出第  $n+1$  层的激活函数输出。

## 二、神经网络基本算法

为了实现神经网络的自学习功能, 让神经网络根据最终层输出值  $h_{\omega}(x)$  和真实值  $y$  之间的差别, 反向更新权重矩阵  $\omega$  使之拟合得更好的过程称为反向传播。对于只有一个输出值、一个样本、一共  $L$  层的神经网络, 以平方误差代价函数为例:

$$J(\omega) = (h_{\omega}(x) - y)^2 = (a_1^{(L)} - y)^2 \quad (1.13)$$

其中  $a_1^{(L)}$  为 L 层隐藏层处的输出激活函数值。

通过链式法则求取的  $J(\omega)$  每一个参数的偏导  $\frac{\partial J}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}}$  进行梯度下降。记线性组合的结果为  $z_1^{(L)} = \omega_1^{(L-1)} a^{(L-1)}$ , 这样有  $a_1^{(L)} = f(z_1^{(L)})$ 。由此我们可以推出任意  $ij$  参数的梯度:

$$\frac{\partial J}{\partial \omega_{ij}^{(l)}} = a_j^{(l)} g' \left( z_i^{(l+1)} \right) \frac{\partial J}{\partial a_i^{(l+1)}} \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial J}{\partial a_i^{(l)}} = \begin{cases} \sum_k \omega_{ki}^{(l)} g' \left( z_k^{(l+1)} \right) \frac{\partial J}{\partial a_k^{(l+1)}}, & l \neq L \\ 2(a_i^{(L)} - y_i), & l = L \end{cases} \quad (1.15)$$

同时, 我们可以记  $\delta_i^{(l)} = g' \left( z_i^{(l)} \right) \frac{\partial J}{\partial a_i^{(l)}} = \frac{\partial J}{\partial z_i^{(l)}}$ , 这样就有  $\frac{\partial J}{\partial \omega_{ij}^{(l)}} = a_j^{(l)} \delta_i^{(l+1)}$

其中  $\delta$  的递推式为:

$$\delta_i^{(l)} = \begin{cases} f' \left( z_i^{(l)} \right) \sum_k \omega_{ki}^{(l)} \delta_k^{(l+1)}, & l \neq L \\ 2f' \left( z_i^{(L)} \right) (a_i^{(L)} - y_i), & l = L \end{cases} \quad (1.16)$$

通过以上的公式计算, 随机初始化神经网络中的所有权重参数  $\omega$  后, 我们可以使用批量梯度下降法完成对整个 ANN 模型的训练:

---

**算法 1.1** 单次梯度下降

---

```

1  $\Delta_{ij}^{(l)} = 0$  (for all  $i, j, l$ );
2 for  $index = 1$  to  $m$  do
3    $a^{(1)} = x^{(index)}$ ;
4   Forward calculation  $a^{(l)}$  (for  $l = 2$  to  $L$ );
5   Backward calculation  $\delta^{(l)}$  (for  $l = L$  to 2);
6    $\Delta_{ij}^{(l)} := \Delta_{ij}^{(l)} + a_j^{(l)} \delta_i^{(l+1)}$ ;
7 end
8

```

$$D_{ij}^{(l)} = \begin{cases} \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)} + \lambda \omega_{ij}^{(l)}, & \text{if } j \neq 0 \\ \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)}, & \text{if } j = 0 \end{cases}$$

$$\omega_{ij}^{(l)} := \omega_{ij}^{(l)} - \alpha D_{ij}^{(l)};$$


---

## 第二章 单层二硒化钨的单光子发射测量

### 第一节 单层二硒化钨的制备

单层二硒化钨 ( $\text{WSe}_2$ ) 从高质量助熔剂生长的块状晶体中使用胶带机械剥离后，利用光学显微镜通过颜色对比度鉴别出单独的薄片如图 2.1.a 所示。采用干转移拓印法制备异质结构样品，使用聚丙烯碳酸酯聚合物薄膜吸附上层碱性氮化硼薄片。之后， $\text{hBN}$  被用来逐个拾取所有单层  $\text{WSe}_2$ ，通过熔融聚丙烯碳酸酯膜，将整个聚合物堆放在预制的纳米柱上，然后用丙酮洗去残渣。

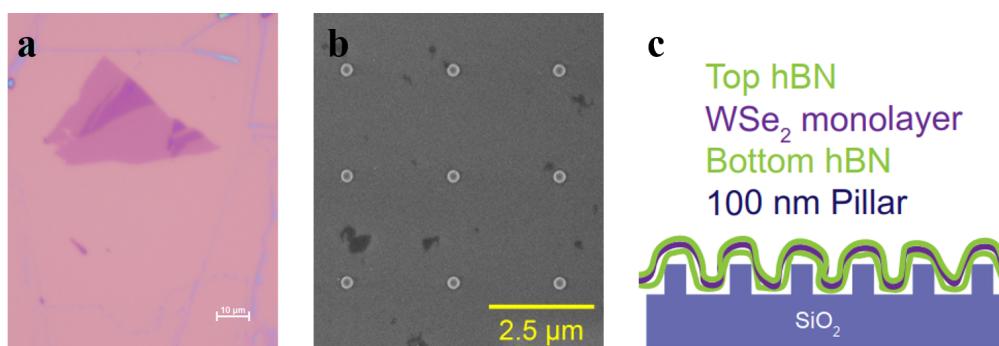


图 2.1 样品的成像与结构示意图

a. 硅片上剥离得到的单层二硒化钨在显微镜下图像。b. 纳米柱阵列的光学成像。c. 置于基底上的“三明治”结构示意图。

实验中采用  $285 \text{ nm SiO}_2/\text{Si}$  衬底制备纳米柱阵列。单柱的直径为  $200 \text{ nm}$ ，高度为  $100 \text{ nm}$ ，柱子之间的距离为  $2.5 \mu\text{m}$ 。该阵列由 PMMA 保护外加电子束刻蚀得到，用铬酸盐腐蚀剂腐蚀铬硬质掩模。<sup>[46]</sup> 最终得到纳米柱阵列结构的扫描电子显微镜成像如图 2.1.b 所示，整体的测量样品结构如图 2.1.c 所示。

### 第二节 拉曼光谱测量

样品制备后，首先对单层  $\text{WSe}_2$  区域进行拉曼光谱 (Raman spectrum) 扫描测量，在以下 8 个点处发现了存在单层  $\text{WSe}_2$  的峰特征。图 2.2.a 测量了  $100 \text{ cm}^{-1}$ - $3500 \text{ cm}^{-1}$  的拉曼位移，发现在  $150 \text{ cm}^{-1}$ - $450 \text{ cm}^{-1}$  区间内，这八个点在图 2.2.b 所示位置均存在类似的激子峰响应 ( $520 \text{ nm}$  处为 Si 基底的 Raman 响应)。

将特征点提取出来，在给定区域峰位置做洛伦兹曲线的拟合，得到图 2.3.a 的结果。与图 2.3.b 的拉曼声子模式参考图对比，发现以下特征峰位置与其对应的声子模式： $223.3 \text{ cm}^{-1} E'^-$ ;  $240.3 \text{ cm}^{-1} A'$ ;  $252.2 \text{ cm}^{-1} E'^+$ ;  $264.6 \text{ cm}^{-1} 2LA$ 。其中  $A'$  是一种离面声子模式，其中顶部和底部的硫原子在相反的方向振动，而  $E'$

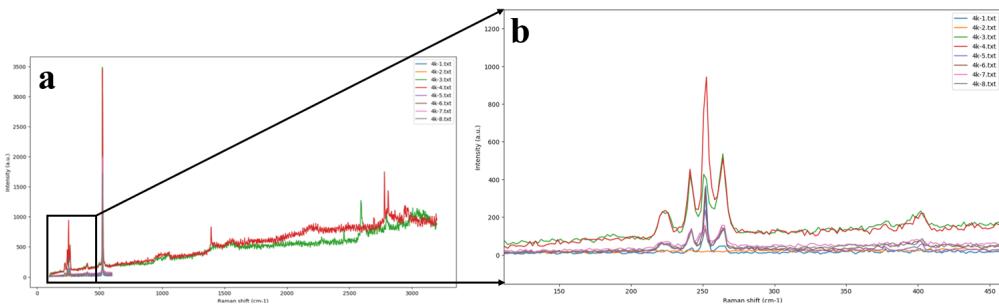


图 2.2 样品特征点拉曼光谱测量结果图  
**a.**100 cm<sup>-1</sup> 到 3500 cm<sup>-1</sup> 的拉曼光谱。**b.**150 cm<sup>-1</sup> 到 450 cm<sup>-1</sup> 的拉曼光谱。

是面内模式，其中金属原子与硫原子在相反的方向振动。双简并  $E'$  模在应变作用下分裂为  $E'^+$  和  $E'^-$ ，其中  $E'^+$  模的位移特征矢量与应变方向正交，而  $E'^-$  模的位移特征矢量与应变方向平行。2LA 模式是由来自 LA 分支的两个声子的双共振过程产生的。二阶过程通常可以在拉曼光谱中产生复杂的线形，然而在 WSe<sub>2</sub> 的情况下，单个洛伦兹可以很好地模拟 2LA 模式线形<sup>[14]</sup>。

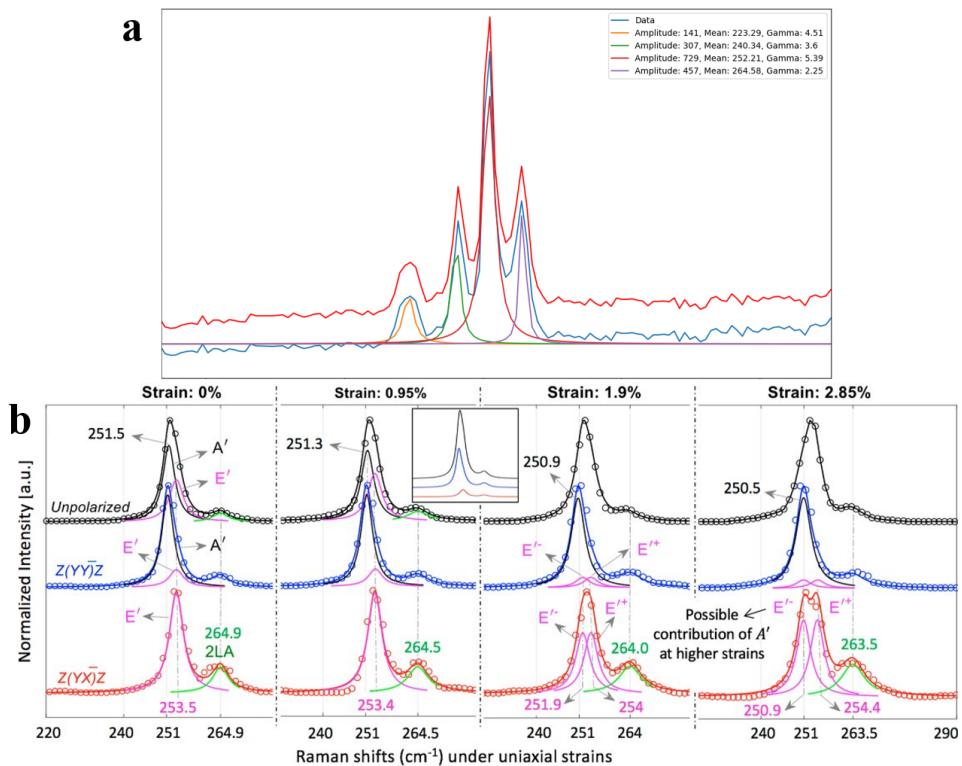


图 2.3 拉曼特征峰拟合结果与对照图  
**a.**拉曼光谱特征峰拟合结果。**b.**拉曼光谱特征峰对应声子模式示意图<sup>[14]</sup>。

### 第三节 光致发光光谱测量

在使用拉曼光谱完成对单层 WSe<sub>2</sub> 标定与检测后，使用光致发光光谱扫描单层 WSe<sub>2</sub> 部分以观察可能 SPE 存在的位置。光致发光光谱测量在共聚焦显微镜系统上进行，光路连接到液氦循环光学低温恒温器。将真空适用的 100 倍高数

值孔径物镜安装在低温恒温器内。样品在真空中处于接近 4 K，采用中心为 532 nm，最大输出功率为 52 mW 的连续激光器作为激发源。在所有测量中，入射激光功率保持在 100 nW 以下，以消除局部加热。

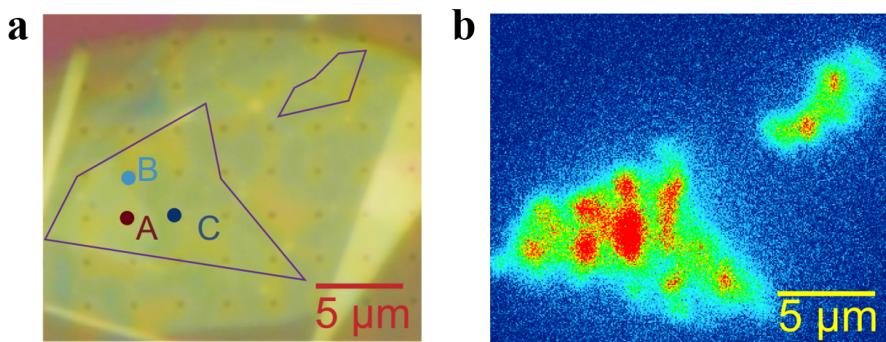


图 2.4 样品成像与区域光谱扫描图

**a.** 制备并转移完成的待测单层 WSe<sub>2</sub> 光学成像。**b.** 光致发光光谱扫描热力图，红色区域信号较强。

在图 2.4.a 的显微镜成像图中，紫色线条框出了“三明治”异质结构中的单层 WSe<sub>2</sub> 区域。从图 2.4.b 的光致发光扫描热力图中可以看到，光谱强度较高的点均位于单层 WSe<sub>2</sub> 部分，同时也体现出了可能的 SPEs 位置。

图 2.5.a 展示了其中一个可能 SPE 点位的光致发光光谱图，同理参考图 2.5.c 的文献对比，我们可以分离出类似的 SPE 峰结构：其中 1.7-1.75 eV 峰为中性激子 (1.73)/ 负三激子 (1.71)；1.65-1.70 eV 峰为缺陷相关的局域态转变 (1.66) 双激子发射 (1.68)；1.63 eV 主峰为缺陷相关的局域态转变；1.61 eV 峰为 A 激子的重组成 (最低能态激子转变)。

观察并分离到 SPE 相关的缺陷态特征峰后，我们对测量区域进行扫描电镜成像，发现如图 A.1.a 中的缺陷存在，同时图 A.1.b 中的缺陷位置附近的高度变化也证实了 Se 空位与 SPE 的相关关系。为了证实发射的单光子特性，实验上对 1.637 eV 处的 PL 峰进行时间相关测量与二阶自相关测量。时间相关单光子计数测量基于与时间计数模块耦合的显微镜进行。样品放置在低温恒温器中，使用 509 nm, 40 MHz 的脉冲激光激发样品，为避免样品加热激光功率小于 50 nW。发射信号由特定峰值能量 (FWHM = 10 nm) 的带通滤波器过滤，然后由单光子雪崩光电二极管 (Single Photon Avalanche Diode, SPAD) 收集。

二阶自相关测量由一个 50:50 分束器和两个 SPAD 组成的 HBT 干涉仪进行，两个 SPAD 之前的发射信号由两个带通滤波器过滤后与时间分辨模块连接。脉

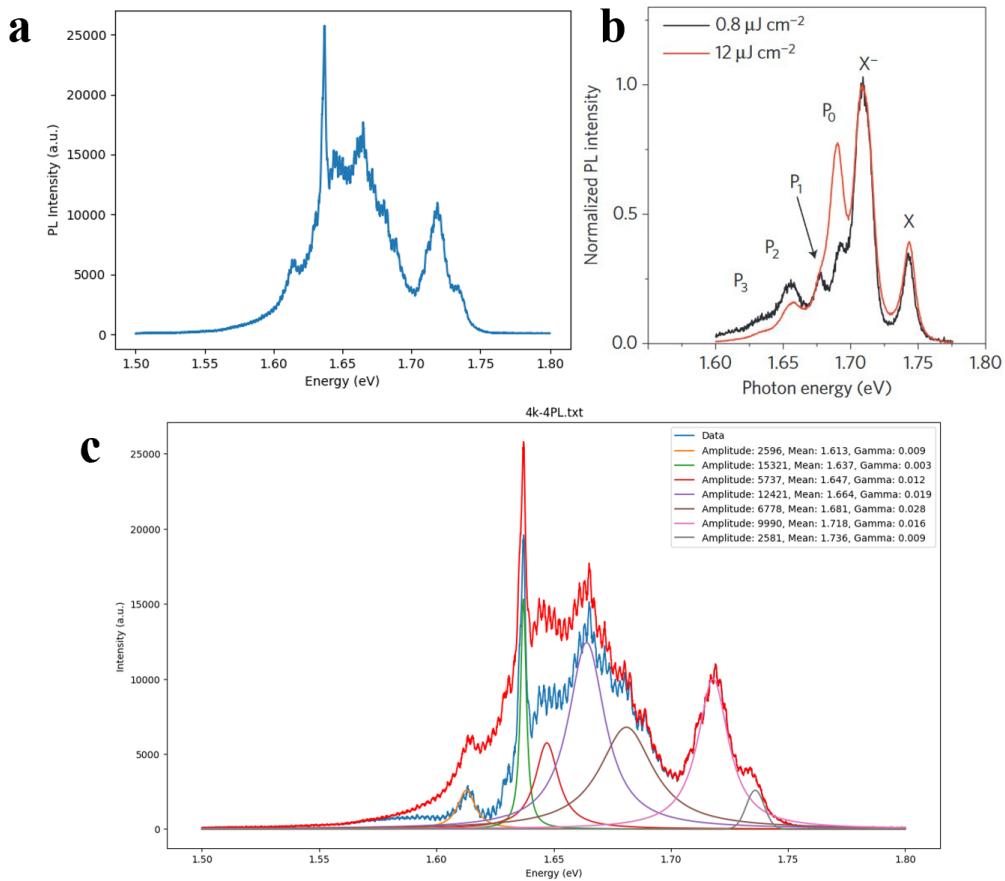


图 2.5 光致发光光谱测量结果与拟合对照

a. 光致发光光谱测量结果。b. 光谱峰分析参考图<sup>[47]</sup>。c. 光致发光光谱特征峰拟合结果。

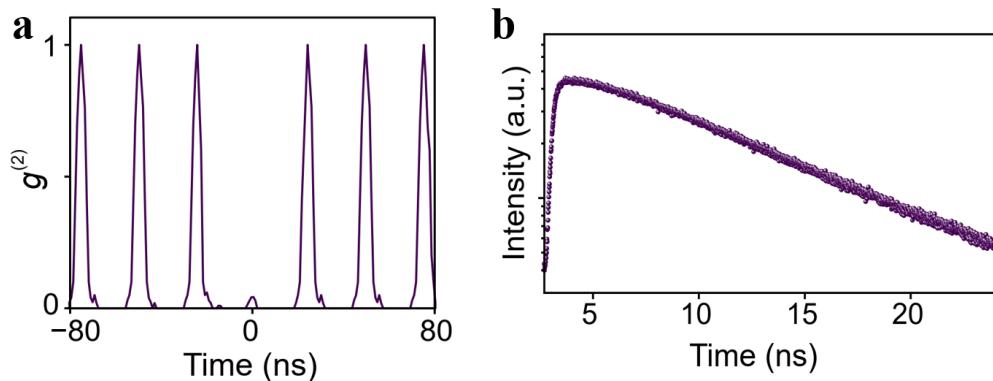


图 2.6 时间相关单光子计数测量结果图

a. SPE 峰处  $g^2$  的脉冲测量结果。b. 时间相关 SPE 峰处光强测量结果。

冲测量拟合函数定义如下：

$$D(t) = \sum_{n=0}^N \left( a + b_n \cdot \exp \left( - \left| \frac{t - t_n}{\tau_n} \right| \right) \right) \quad (2.1)$$

其中  $n$  表示第  $n$  个峰， $a$  是偏置常数， $b_n$  是峰值高度因子， $t_n$  表示峰值中心位置， $\tau_n$  是相应的衰变寿命。将每个峰的高度因子  $b_n$  设置为各自的最大值，以确保更多的重叠和更精确的峰面积计算。在拟合确定  $a$ 、 $b_n$ 、 $t_n$  和  $\tau_n$  的值后，在区间

$[t_n - 15, t_n + 15]$  积分计算第  $n$  个峰的面积  $A_n$ :

$$A_n = \int_{t_n - 15}^{t_n + 15} \left( a + b_n \cdot \exp \left( - \left| \frac{t - t_n}{\tau_n} \right| \right) \right) dt \quad (2.2)$$

而最终需要的  $g^2(0)$  可以由  $g^2(0) = \frac{A_0}{A_{adj}}$  计算得到, 其中  $A_0$  为零延迟峰曲线包裹的面积,  $A_{adj}$  为其他峰曲线包裹面积的平均。这种方法可以最大限度地减少个别峰值变化与仪器环境不均匀的影响, 确保了  $g^2(0)$  可靠和准确的测量。

图 2.6 展示了以上测量方法的结果, 通过式 (2.1) 与式 (2.2) 的拟合方式, 最终得到了以 1.637 eV 为峰中心的 SPE, 其具有  $g^2(0) = 0.03 \pm 0.003$  的二阶非相干函数与  $\tau = 12.05 \pm 0.09$  ns 的辐射寿命。SPE 发射峰与图 A.2.a 中展示的缺陷态跃迁能带匹配, 与图 A.2.b 中的纯净能带不相符, 证明其起源与表面缺陷空位的强相关。 $g^2(0) \ll 0.5$  的反聚束效应也证实了纳米柱预应变调制下单层 WSe<sub>2</sub> 中单光子发射的存在与其较高的发射纯度。

### 第三章 压电阵列设计与面内应变调控

验证完成需要的单层 TMDs 材料中的 SPE 后，为了实现对二维平面面内应变的控制，本文选用压电材料作为 Si 片上的基底。在与转移后的单层 TMDs 通过无荧光胶水粘连后，压电晶体上层的应变可以很好的传导到 TMDs 晶体上。

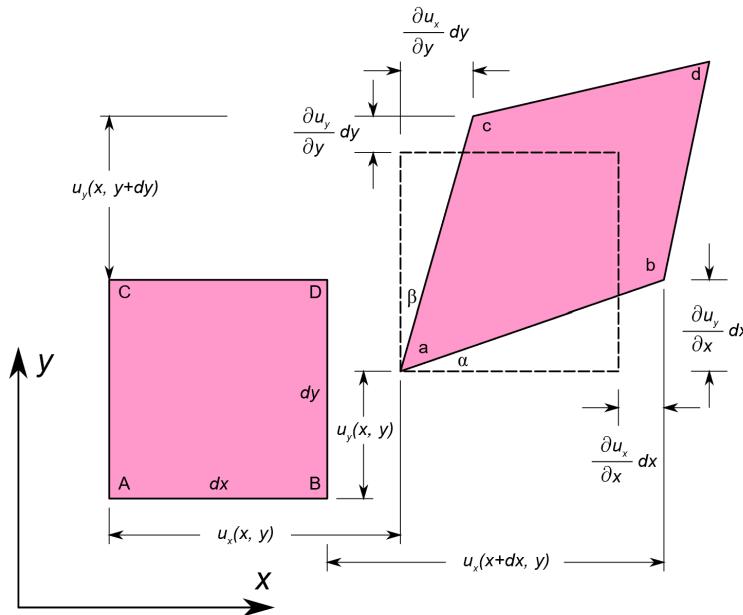


图 3.1 平面内形变与应变的示意图

有限元软件模拟仿真之前，我们先对二维空间中面内应变的定义做说明。如图 3.1 所示，考虑一个二维无穷小，具有  $dx \times dy$  尺寸的矩形单元，它在变形后呈右上角的菱形。变形可以由位移场  $\mathbf{u}$  描述，从几何形状我们可以得到：

$$\begin{aligned}
 L(ab) &= \sqrt{\left(dx + \frac{\partial u_x}{\partial x} dx\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} dx\right)^2} \\
 &= \sqrt{dx^2 \left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x}\right)^2 + dx^2 \left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)^2} \\
 &= dx \sqrt{\left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)^2}
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

当位移梯度较小时，可以忽略平方项，此时可以得到：

$$L(ab) \approx dx \left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x}\right) = dx + \frac{\partial u_x}{\partial x} dx \tag{3.2}$$

简单差值比值即可以定义沿 x 方向上的应变大小：

$$\epsilon_x = \frac{\text{形变}}{\text{原始长度}} = \frac{L(ab) - L(AB)}{L(AB)} = \frac{\partial u_x}{\partial x} \tag{3.3}$$

为了计算压电晶体的力电耦合效应我们也可以定义三维的弹性应变张量：

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) & \frac{\partial u_y}{\partial y} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

由于我们考虑的二维材料仅受面内应变的影响，在计算面内应变大小时我们仅用上述矩阵的左上部分取迹：

$$Trace \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} \end{bmatrix} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \quad (3.5)$$

注意到以上的二阶应变张量具有对称性，在有限元软件中，我们可以使用预定义的参数 solid.eXX 与 solid.eYY 直接计算出材料与几何坐标系下的面内应变大小。

## 第一节 块状压电晶体测试与极化方向选择

完成应变的理论分析后，在有限元仿真软件中对块状的压电晶体进行建模。使用预定义的材料参数 PZT-5H，设定材料的极化方向沿 z 轴，在材料的上下底面加入稳定的电势差与力电边界条件，计算后得到图 3.2.a-d 的结果。

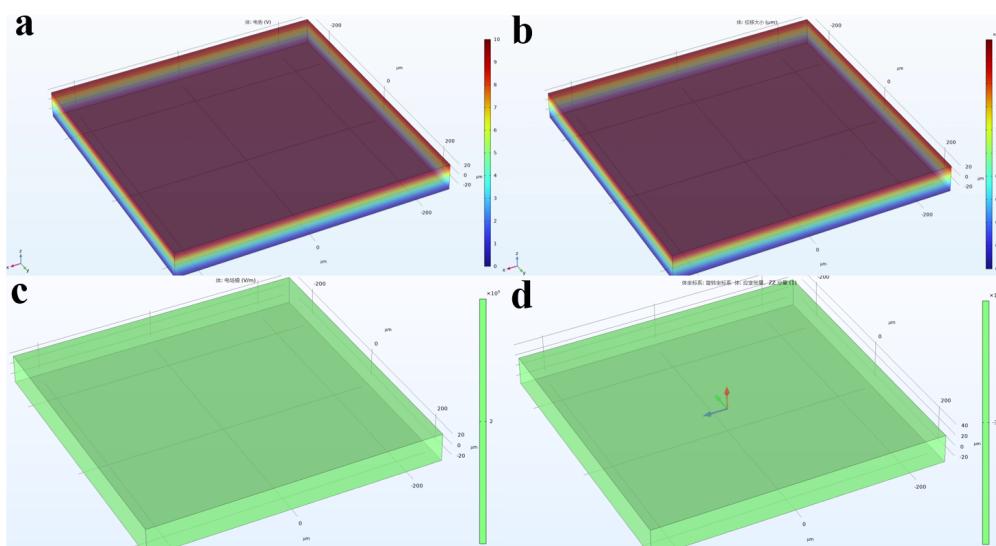


图 3.2 块状压电晶体仿真结果图

**a.** 压电晶体的体电势分布。**b.** 压电晶体的体形变分布。**c.** 压电晶体的电场强度分布。**d.** 压电晶体的 z 轴应变分布。

如图 3.2.a 所示，当在上顶面与下底面施加稳定的电势，四个侧面应用周期性边界条件时，电势分布出现了均匀梯度的分布。图 3.2.b 展示了上述条件下压电晶体的位移大小。由于仿真软件中力学条件的限制，在固定下底面后整个压电晶体产生了均匀梯度的 z 轴方向位移，由式 (3.3) 简单计算得到，z 方向上的应

变应同样是均匀的。图 3.2.c 与图 3.2.d 展示了仿真结果中压电晶体的电场强度分布与 z 方向应变大小的分布。与理论预测的一致，在整个晶体中由于边界条件的存在和 z 轴极化方向的确定，我们最终得到了全同性的仿真结果。

注意到，上述仿真过程中为了验证压电效应被正确计算，块状压电晶体的极化方向选择了 z 轴，这也就导致了当我们在 z 方向施加稳定的电场强度时，顶层的面内应变  $\epsilon_x$  与  $\epsilon_y$  均为零。而我们正需要的是对二维材料面内应变的控制（无预应变或褶皱的情况下，整体的 z 方向应变对 xy 方向展开的单层 TMDs 材料没有影响），所以尝试将材料坐标系的极化方向旋转到 xy 平面上，此时当我们在侧面施加相应的电势时，顶层的面内应变将会被稳定产生。

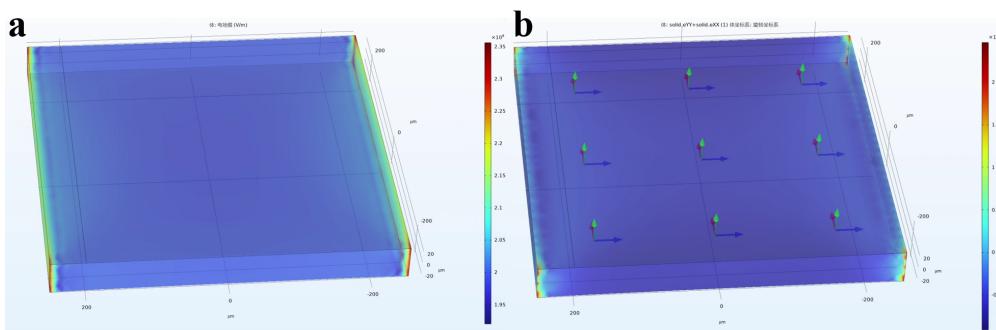


图 3.3 横向极化压电晶体仿真结果图

**a.** 横向极化时的体电场强度分布。**b.** 横向极化时的极化轴应变分布。

图 3.3 展示了极化方向设置为 y 轴时，在 y 轴两侧平面施加电势并固定约束，块状压电晶体的仿真结果。图 3.3.b 展示了这种状态下 solid.eYY 即空间坐标系下 y 方向上的应变大小分布，可以发现除了四角边缘由于网格划分导致出现的特殊值，在上顶面上 y 方向的应变大小  $\epsilon_y$  分布较为均匀，符合单层 TMDs 材料的调控应变需求。同时我们可以发现，图 3.3.a 画出的电势分布与图 3.3.b 的应变分布  $\epsilon_y$  有明显的大小对应关系，这也证实了块状压电晶体 PZT-5H 的均匀应变响应性质。

## 第二节 压电阵列基础形状设计优化

在完成了块状压电晶体的基本力电耦合性质测试与极化方向选择后，为了更好的实现类似纳米柱调控上层材料应变的效果，我们考虑设计以压电晶体为材料的基底阵列来完成对应变分布的确定性点位创建。

参考已经实现的固定器件来创建应变<sup>[48]</sup>，我们设计并仿真计算了在块状压电晶体上创建方形与圆形孔洞后，上层材料的形变与响应的应变分布。

图 3.4.c 与图 3.4.d 展示了不同孔洞形状下复刻设计的仿真体应变结果，数

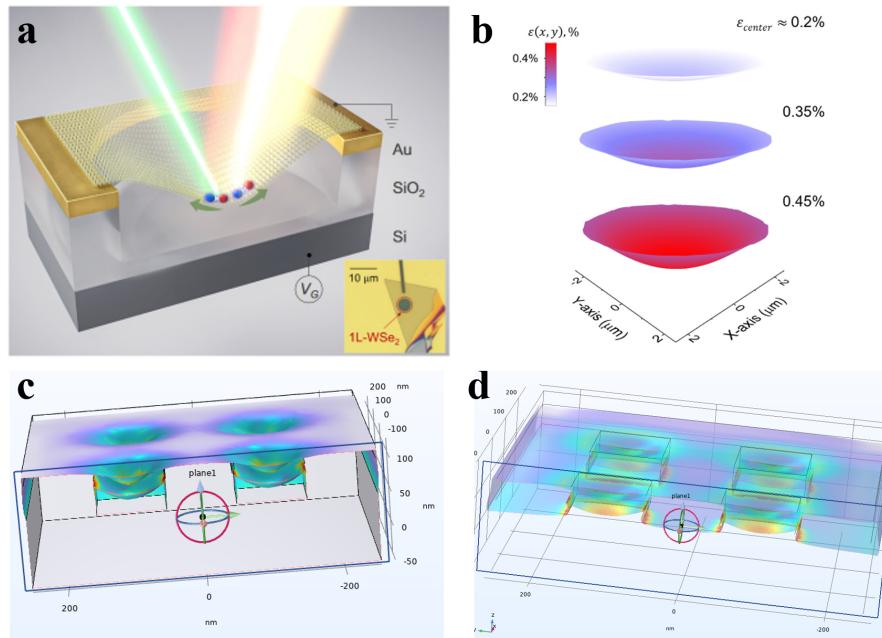


图 3.4 孔洞设计参考与仿真结果图

- a. 单孔应变调控器件示意图<sup>[48]</sup>。b. 孔洞内的应变分布<sup>[48]</sup>。c. 圆形孔洞设计的体应变分布。d. 方形孔洞设计的体应变分布。

值上分析发现：虽然这种孔洞设计可以创建出如图 3.4.b 较好的确定应变分布形状，但这种设计不能利用压电材料的伸缩特性完成对给定电压的应变控制，在 y 方向施加电压后应变分布与极值变化较小，同时孔洞的形状也由于横向形变发生不均匀的扭曲，使上层的二维材料面内应变不可控。

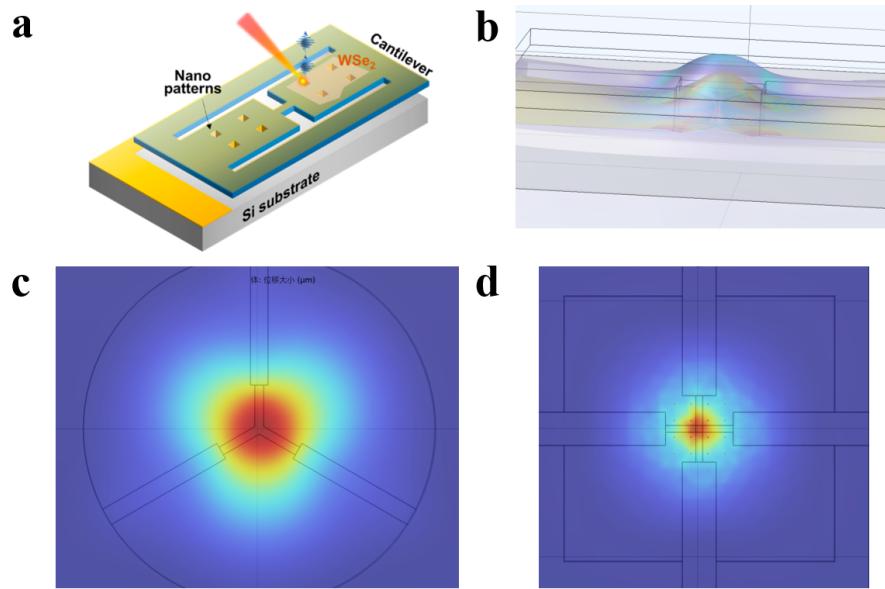


图 3.5 桥接拉伸设计参考与仿真结果图

- a. 桥接拉伸应变调控器件示意图<sup>[49]</sup>。b. 双向压电柱挤压中心材料应变分布。c. 三向桥接拉伸调控应变分布。d. 四向桥接拉伸调控应变分布。

同样地，参考桥接拉伸的结构设计出图 3.5 中的结构并完成相应的仿真<sup>[49]</sup>。

数值分析与电压扫描发现，这些设计均无法做到在具有大应变极值的同时对应变极值点附近的分布完成控制，因为在外加电压控制源中我们只有两个输入，这种仅有双自由度的输入层面控制在三维器件上远远不够完成对面内应变的调控。

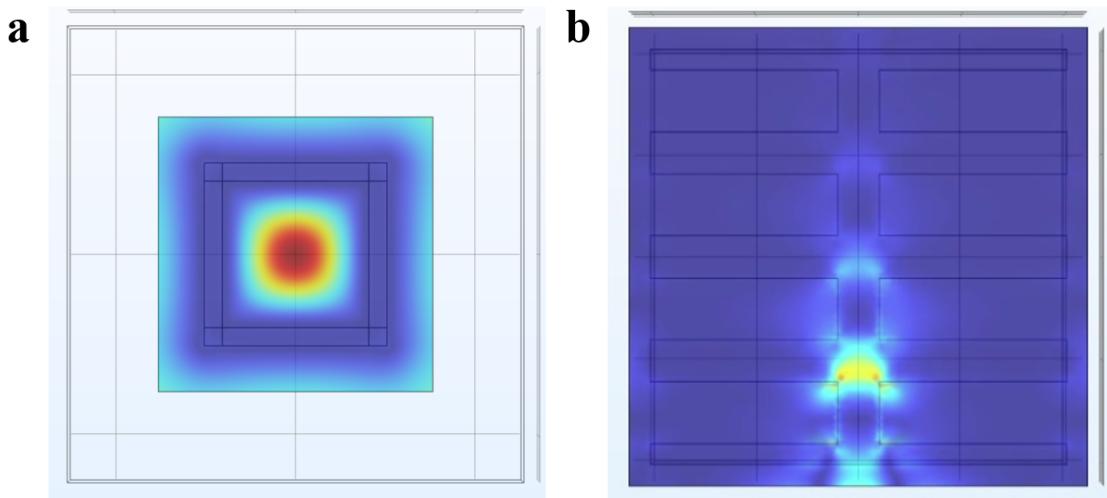


图 3.6 交叉棍状设计仿真结果图

**a.** 采用框形压电晶体的应变分布。**b.** 采用交叉形压电晶体的应变分布。

为了增大输入自由度即施加电势面的个数，由图 3.6.a 的优秀应变分布启发，设计采用图 3.6.b 的交叉棍状压电晶体设计。相较于之前的阵列设计，这种结构增加了侧面电势的区域划分，在保留图 3.6.a 中心较好的位移梯度场的同时完成了顶面多个区域的控制。

在横竖矩形的交叉处，我们由仿真结果可以看出这里具有别于其他区域的应变极值分布。通过改变上下电压的相对大小，我们可以十分简单的控制应变极值所处的位置与具体的分布形状。同时，由于横向电压的控制加入，理论上我们也可以通过调整极值所在行的左右电势大小来改变横向的分布状态。在有限元仿真软件中使用“参数化扫描”选项，对上下左右四个电压进行各自等步长区间扫描，仿真结果也证实了上述控制面内应变形状的理论。

### 第三节 压电阵列顶层应变控制优化

上一节中，我们完成了基础压电阵列的设计，最终得到的交叉棍状压电晶体可以初步完成对区域应变的控制。这一节中，我们将从单个交叉十字开始，对上层面内应变的控制与十字矩形相对尺寸的大小进行优化，并逐步添加横纵支数完成对最终压电阵列单元的设计。

图 3.7 展示了对 1x1 十字交叉结构的扫描结果切片。通过控制上下左右四个施加的电压，我们可以较为精确的控制交叉区域的极值点区域分布与其形状。值

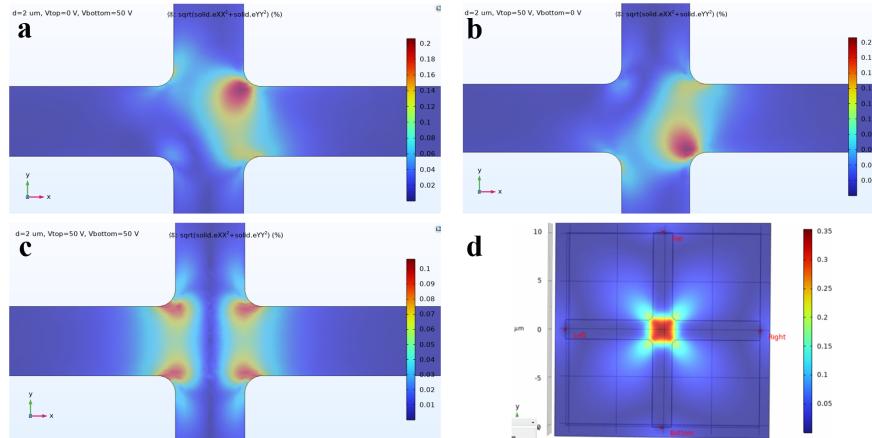


图 3.7 十字交叉结构的应变分布图

**a-c.** 扫描四端口电压得到的十字交叉结构应变分布变化。**d.** 改变相对尺寸后的应变分布。

得一提的是，在图 3.7.c 中，我们取上下电压为相同值，左右电压与上下电压各相差一个正负差值，这种电势施加造成的应变分布较为有趣，基本符合我们对四个拐角处产生 SPE 的应变需求。

同时，在图 3.7 中我们对十字交叉结构的相对大小做了扫描。仿真结果发现，当各支的宽度较小时，应变将会如图 3.7.d 所示产生极值点与极值区域的融合，当我们需要一个较大的 SPE 点位时，这种应变分布将对调控十分有效。当各支的宽度较大时，由于四角产生的应变极值点分离较远，此时的应变分布更接近图 3.7.c 所示，当我们需要一个面上的 SPE 阵列时，这种等距排布的面内应变极大值点将较好的对不同点位的单层材料能带进行相同面内应变的调制。

在对  $1 \times 1$  的十字交叉结构完成电压扫描后，为了验证此种设计应用在阵列后的可行性，我们在有限元计算软件中逐步增加纵横的交叉支数，重新完成建模并参数化扫描各端口电压，图 3.8.a-f 展示了部分扫描结果。如图 3.8.a 所示，从  $1 \times 3$  结构开始，当我们在二维平面内的上下端口施加相同电压，左右端口施加正负同差值的电压时，应变极大值点会出现在电压降最大的拐角处同时具有上下的对称性。在最中心的交叉点处，由于其举例左右的偏压端口距离较远，同时受到了相邻端口的同电压影响，此处的局部应变极大值点处的面内应变绝对值相较于两侧明显偏小。但是由于二维材料中缺陷态的位置不确定性，我们仍可以利用不同应变的调制效果，对上层材料可能出现的 SPE 位置进行导带能量的改变。

图 3.8.b 中展示的  $2 \times 2$  结构形成的四个交叉区域模型，是无限压电阵列的一个基本重复单元。由于这种结构的中心对称性，我们可以固定左右电压，仅通过对上下各两个端口的电压值进行扫描。这种情况下，扫描得到的结果图 3.8.c 进行简单的中心 90 度旋转，即可得到在四个交叉点位中任意需要的应变极值点分

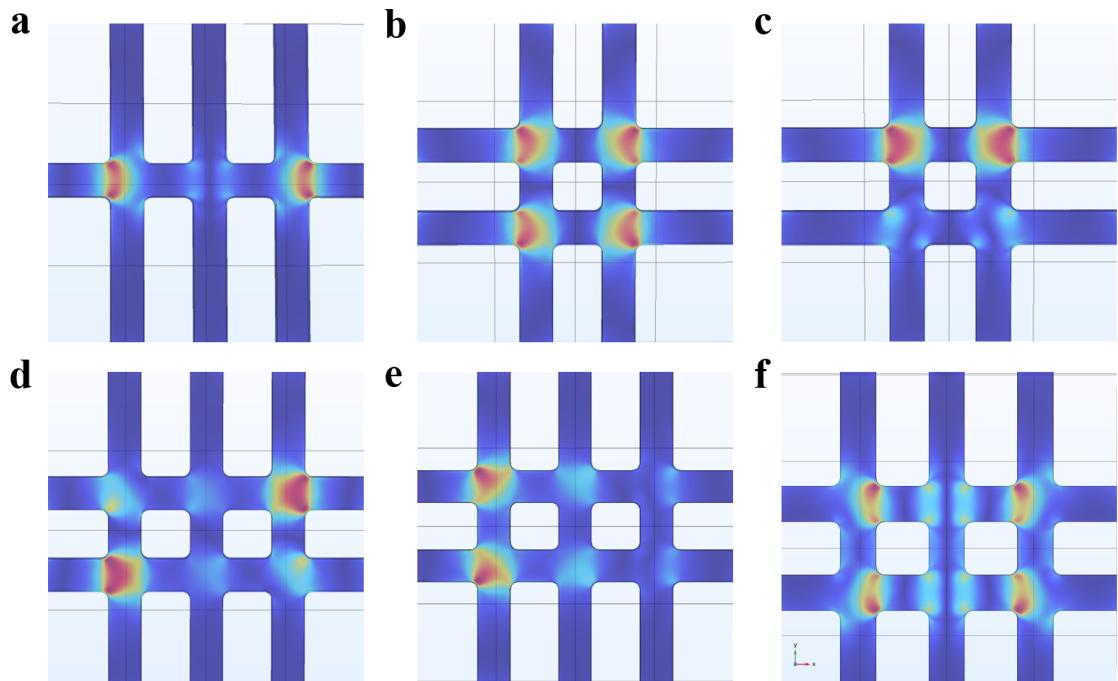


图 3.8 不同支数交叉结构的应变分布图

**a.** 1x3 结构的特殊电压应变分布。**b-c.** 2x2 结构的特殊电压应变分布。**d-f.** 3x3 结构的特殊电压应变分布。

布。图 3.8.d-f 为 2x3 的单元扫描结果。与 1x3 和 2x2 的扫描结论类似，在逐步扩展结构支数的过程中这种设计同时增加了电压施加的自由度，保证了对增长的交叉点处应变极大值区域的面内应变分布调控。

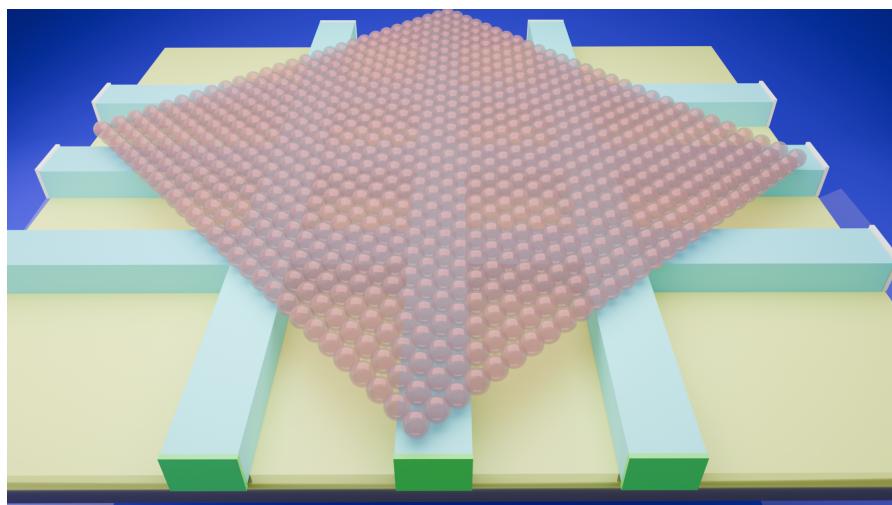


图 3.9 3x3 结构重复单元三维渲染图，上层单原子层覆盖在交叉结构

在上述的逐步扫描与优化后，我们建模了图 3.9 中展示的 3x3 交叉结构应变阵列单元，并在上层加入了单层 TMDs 材料作为面内应变由压电材料顶层传输到目标材料底层后的分布模拟。该结构的平面尺寸如图 A.3.a 所示，整个阵列重复单元的有限元计算模型与三维尺寸如图 A.3.b 所示。

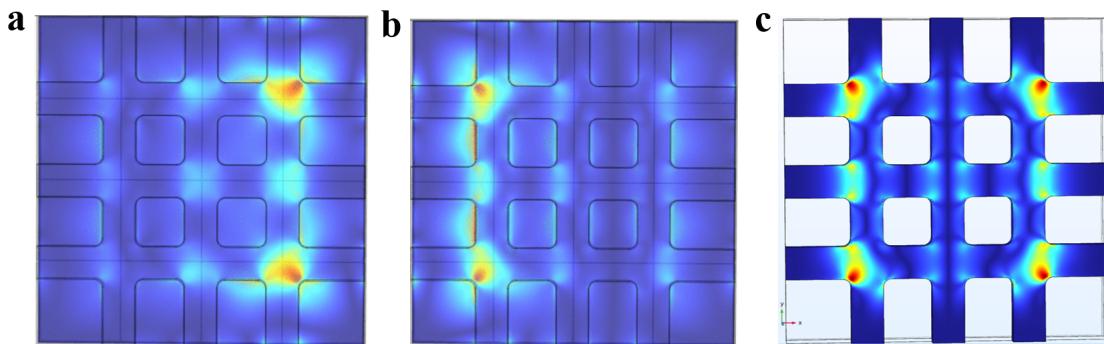


图 3.10 3x3 交叉结构压电阵列单元的应变分布图

**a-b.** 阵列单元的顶层二维材料扫描应变分布。**c.** 阵列单元的压电材料扫描应变分布。**d.** 3x3 阵列单元的压电材料扫描电场分布。

图 3.10 展示了最终阵列单元的模拟结果。通过图 3.10.a 与图 3.10.b 的对比我们不难发现，3x3 的结构下我们仍能通过简单的端口电压调控产生不同交叉位点处的应变极大值，而且这些面内应变可以很好的传递到顶部单层 TMDs 材料的内部，最终产生其缺陷态的能带移动从而实现位点处的 SPE。基于上下左右共 18 个端口的可控性，我们预测并通过有限元计算软件的参数化扫描功能证实了顶层材料应变分布基于电压的完全可控性。

根据以上结果，最终我们完成了 3x3 交叉结构压电阵列单元的模型设计与顶层的应变控制优化。从 1x1 十字结构的四端口电压扫描开始，到 3x3 的十二端口电压扫描，按步长连续变化的各端电压组合影响了面内应变的最终分布。我们也通过对各支相对尺寸的扫描完成了最终的几何参数优化，在获得面内应变最大值的同时保留对应变分布的可控性。

#### 第四节 面内应变分析

上一节中，我们完成了对最终阵列单元的设计与电压扫描，证实了其控制上层面内应变的可行性。本小节中，我们将在这个阵列单元的基础上实现上位替代 1x1-2x3 阵列的功能。同时，我们将对应变极大值区域的具体应变性质进行分析（加上电场分布），在于参考文献中应变控制 SPE 工作对应的同时最终验证设计控制 SPE 的能力<sup>[50-51]</sup>。

在器件的实际使用过程中，由于单层 TMDs 材料的机械剥离制备较为随机且尺寸相对较小（如图 2.1.a 所示），3x3 的 9 个交叉点区域可能无法被完全覆盖。此时我们需要对整个器件进行部分调控，仅控制需要的应变点区域（剩余区域的应变分布不会影响上层材料，则可以忽略）。

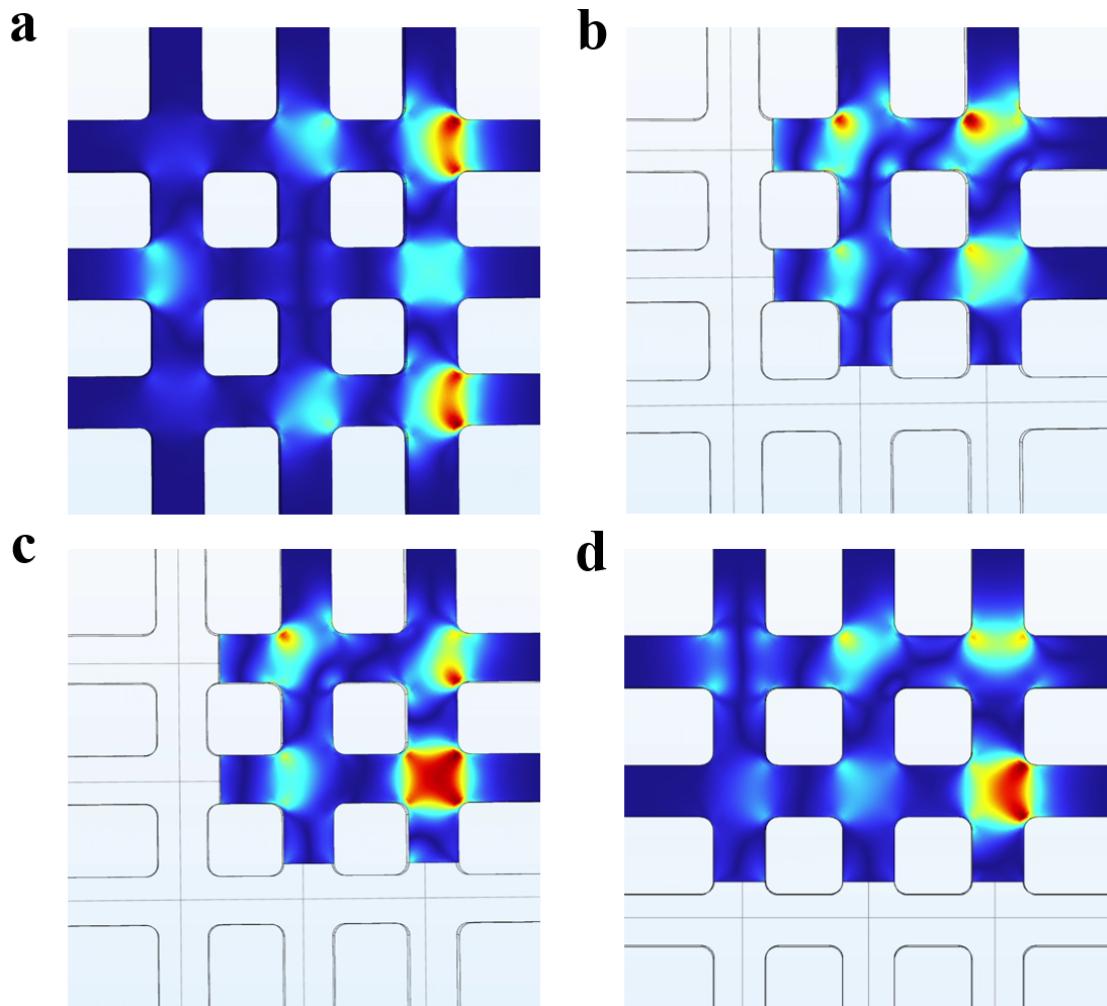


图 3.11 3x3 结构上位替代应变调控图

**a.** 右侧 1x3 区域的应变调控。**b-c.** 右上 2x2 区域的应变调控。**d.** 中上 2x3 区域的应变调控。

图 3.11 中, 我们从 3x3 的右侧 1x3 部分开始控制, 通过保持其他端口不变扫描 1x3 相邻的 5 个端口电压, 我们可以实现如图示的应变分布控制, 此时的应变分布适用于单层 TMDs 中两个全同区域的高梯度应变 SPE 激活与中间区域的大范围低梯度应变 SPE 激活。图 3.11.b-c 展示了我们对右上角 2x2 部分的单独控制, 任意交叉区域无论是需要基于极值点的大梯度的面内应变还是以四个极值点区域融合的低梯度高绝对值面内应变, 我们均可以通过改变 2x2 区域对应的 8 个端口电压来实现。同理, 在 2x3 的区域中我们也可以对各个交叉区域进行单独的应变控制。从左部开始的四点全同, 到中部的单极值点乃至右侧的双极值点, 我们都可以通过 3x3 压电阵列的基础实现准确的位点选择与形状控制。

以上的模拟思路均基于“压电材料的应变与电压强相关”这一由式 (1.9) 得出的结论。为了了解具体施加的端口电压与得到的面内应变分布之间的关系, 我们参考图 3.2 来比较 3x3 的结构下压电材料体内电势梯度即电场与顶层应变的关

系。

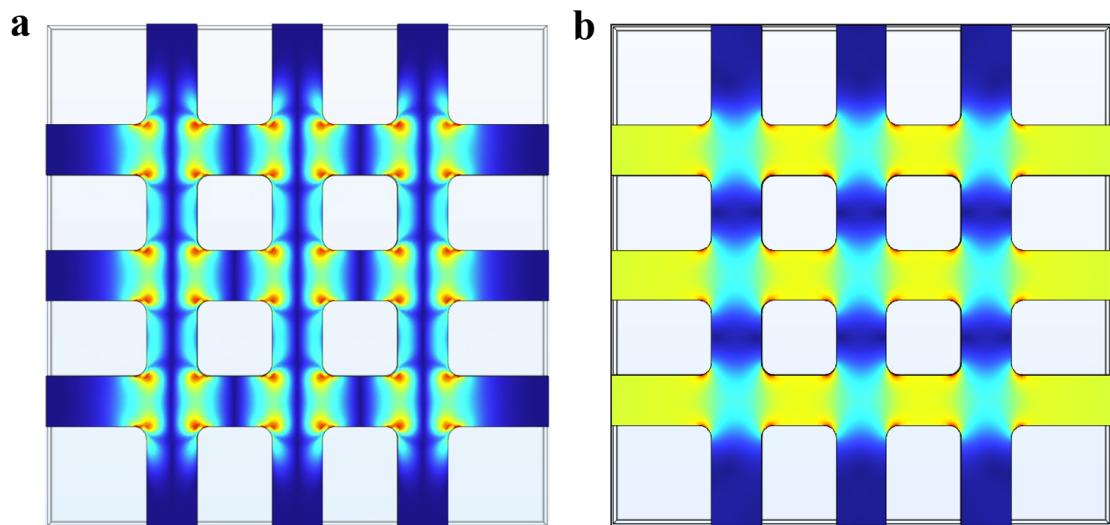


图 3.12 应变极值点全同时的面内应变分布与电场强度分布图  
**a.** 3x3 结构中极值点全同分布。**b.** 应变极值点全同情况下的电场强度分布。

取模拟中最为特殊但实用的情况进行分析，此时各交叉点处的四角应变极值与分布在图 3.12.a 上均为全同。相应的，画出图 3.12.b 的电场强度分布图后我们可以发现，在水平方向电场强度的极大值处，面内应变也会存在极大值。但是，由于电场强度的标量性，在交叉区域中和水平方向的支杆处电场强度的值仍相对较大，但此时面内应变相对极小。这是由于面内应变存在方向性，在二维平面上当两股相反方向的面内应变相遇时，产生的面内合应变为二者的矢量叠加，这时的位移会相应转移到 z 轴方向上。

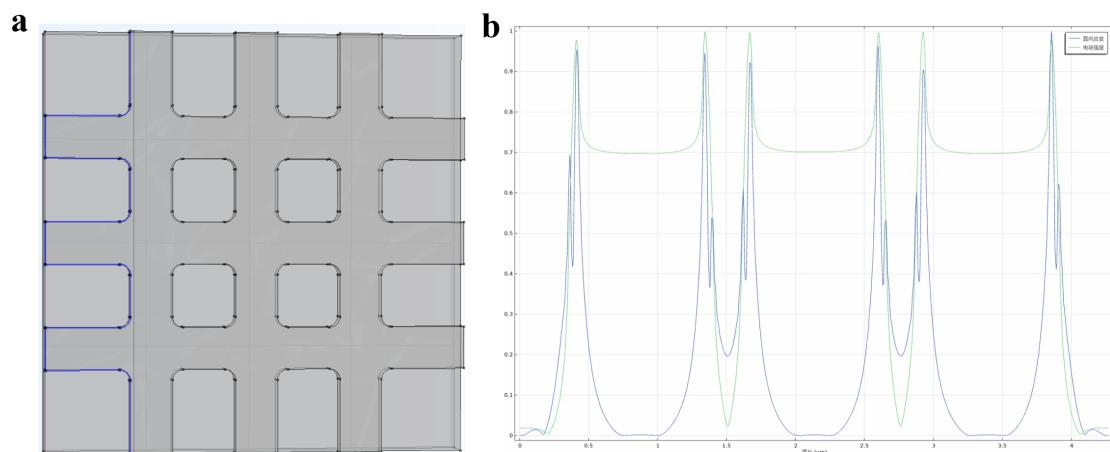


图 3.13 结构单元边缘与其电场强度-面内应变大小关系图

**a.** 3x3 结构压电阵列边缘取值示意图。**b.** 相同位置处边缘上的电场强度与面内应变大小关系。

在面内应变模拟结果的所有分析后，我们可以沿图 3.13.a 中压电材料的边缘进行更加准确的数值比较分析。在图 3.13.a 中深蓝色曲线的相对轴长为 x 轴，将曲线上的相应电场强度与面内应变大小归一化后画在同一坐标系内。图 3.13.b

中绿色曲线代表的电场强度显然具有六个极值点，这与图 3.12.b 中的面内结果对应；蓝色曲线代表的面内应变大小在基本趋势上与电场强度相符，但在具体曲线内由于附近相反方向的应变抵消，最终的边缘应变曲线出现了与电场强度不同的十二个极值点。

在完成了对模拟结果的原理分析后，我们在此可以得出电压能够较为准确的调控  $3 \times 3$  压电阵列单元应变的结论，但同时最终的应变设计中我们也要考虑不同方向应变抵消的效果。通过类比参考文献中类似应变大小分布与梯度分布的情况（类似图 2.1 的结构），同时对上层二维材料的内部应变进行仿真分析，我们也能得出最终的推论：通过控制  $3 \times 3$  压电阵列单元端口电压大小，我们可以实现调控上层二维材料的能带结构，最终实现二维材料中缺陷态位点的 SPE 确定性产生。

## 第五节 基于神经网络的应变-电压控制

经过以上的仿真模拟与原理分析，我们可以通过电压调控应变进而产生 SPE。为了实现工程上的便利与最终器件的实用性，本节计划通过采用神经网络这一有力工具建立电压-应变这一非线性映射模型，最终实现给定特定位点所需应变值的大小，反向推算出各端口所需施加电压的功能。

首先，为了逐步搭建训练数据集，我们采用 python 输出扫描过程中的参数列表即电压组合，之后通过数据分析软件与有限元计算软件的耦合接口正确提取出所需点位的应变大小。

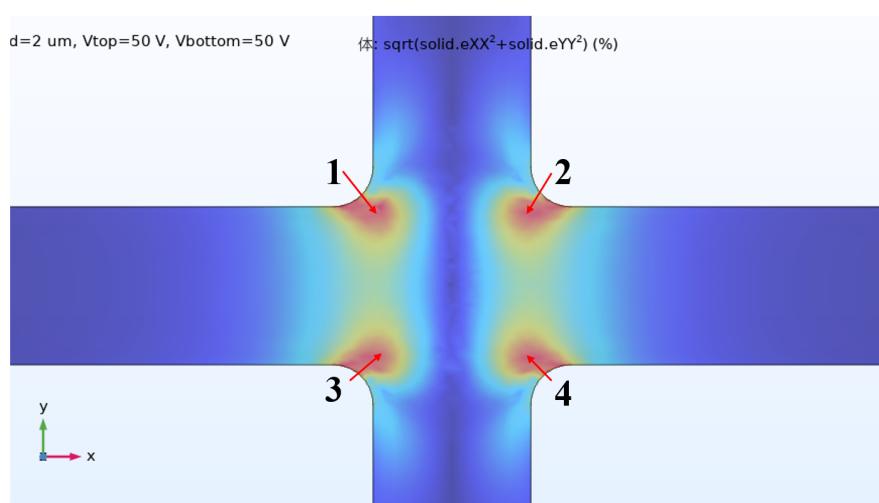


图 3.14 交叉区域基本单元的极值点位置示意图

在一个应变分布基本单元中，我们研究的应变极值点为图 3.14 中所示的点

1-4, 所对应的电压也为从左侧端口开始计数的  $V_1$  到  $V_4$ 。训练模型数据集的参数空间中, 我们的输入可以表示为  $\mathbf{V} = [V_1, V_2, V_3, V_4]$ , 对应的输出为有限元软件计算出的这四个点处的面内应变大小  $\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4]$ 。

参数扫描时我们取  $V_i = \text{range}(0, 10, 100)$ , 即对于每个端口有 11 个不同取值, 此时的总情况数为  $11^4 = 14641$  个。在人工筛选去除仿真结果较差的点位后, 我们最终使用了大小为 14600 组数据的电压-应变数据集, 总数据集按 9:1 划分训练集与测试集, 并采用滑动窗口策略提升时序数据的泛化能力。

在神经网络模型的隐藏层方面, 我们通过网格搜索法对拓扑结构参数进行优化并最终确定了 256-512-256 网格架构。超参数优化采用贝叶斯搜索算法得出, 确定了学习率为  $1 \times 10^{-4}$ , 批量尺寸为 64, 神经元 dropout 概率为 0.1。以上参数优化后, 我们参考文献选择 ReLU 激活函数保证梯度传播稳定性并使用 200 次的早停机制监测验证损失<sup>[52]</sup>。最终我们基于 1x1 的数据集训练出了  $\text{testloss}=3.7 \times 10^{-4}$  的较好模型, 较低的测试集 loss 代表着训练后模型对我们所需应变-电压这一映射的较好模拟。

完成模型的训练后, 为了证实其工程方面的可用性, 我们通过输入一组新应变分布来得到模型预测的电压阵列, 再将这个模型输出的电压阵列放入有限元计算软件中仿真, 最后将仿真结果与我们所需的应变阵列进行比较。模型输出与仿真结果比较如下:

表 3.1 各取值点的目标应变与最终模拟应变比较

| 取值点坐标       | 目标应变 (%) | 预测电压 (V) | 模拟应变结果 (%) | 相对误差 |
|-------------|----------|----------|------------|------|
| (0.6,0.4)   | 0.100    | 42.86    | 0.103      | 3.0% |
| (0.6,-0.4)  | 0.110    | 60.00    | 0.117      | 6.3% |
| (-0.6,0.4)  | 0.090    | 39.71    | 0.095      | 5.6% |
| (-0.6,-0.4) | 0.100    | 64.33    | 0.102      | 2.0% |

训练后的神经网络模型在新数据输入后, 输出的预测绝对误差为 0.31%, 在这个模型误差基础上我们的应变模拟结果平均相对误差为 4.2%, 处于可接受范围内。这个误差中包含了两次仿真时有限元软件划分网格的误差与全局计算的误差, 同时由于应变矩阵与电压矩阵的非线性且非单一映射关系, 在模型训练中也会出现与仿真结果不相符的数值误差。但总体来说, 我们的神经网络模型较好的完成了对应变-电压的可编程化预测调控。

## 第四章 总结与展望

### 第一节 工作总结

量子信息技术的高速发展对单光子源提出了日益严苛的要求，同时传统固态单光子源在可扩展性和可控性方面面临显著挑战，尤其在实现精准的光子能量调控方面缺乏行之有效的工程化手段。基于二维材料的单光子发射为解决这一难题提供了新思路，二维材料如过渡金属二硫化物，由于其出色的可拉伸性和可调控的能带结构显示出独特的优势。理论研究表明，通过施加的面内各向异性应变，可诱导二维材料产生波长精确可控的单光子发射，同时这种片上的单光子源可以很好的被面内量子光子学器件使用。通过密度泛函计算和能带模型的结合，研究者们深入了分析应变调控光子能量的机制与相应理论，同时这也催生出了纳米柱和预褶皱这类对二维材料固定面内应变的添加。

本工作首先完成了实验制备单层 TMDs 材料，之后通过拉曼光谱与光致发光光谱验证纳米柱预应变调节下单层 TMDs 材料内的缺陷态 SPE。在对压电阵列的力学耦合性质进行理论分析后，本工作通过有限元计算软件建模并仿真块状压电阵列应变以证实上述理论，并逐步完成了压电阵列 3x3 交叉重复单元的设计与面内应变优化，最后利用神经网络模型完成了应变-电压这一非线性映射的训练与预测，证实了所设计结构可以通过电压调控上层应变分布进而完成对能带结构与缺陷态位点 SPE 的激活这一结论。预测结果的低误差与高可控性表明了该技术的巨大应用价值，为未来各种二维材料的编程化面内应变调控打下了理论与模拟结果的基础。

### 第二节 下一步展望

基于上述工作，我们还可以继续从以下几个方面继续开展研究：

1. 细化模型网格，优化神经网络算法：在神经网络模型的训练中，初始的总数据集对预测结果的影响较大，而在有限元计算软件中，给定点的数值是由此点所在的网格区域确定的。在本工作中为了加快对电压的扫描速度，我们使用了较大的网格以得到较小的总模型自由度，这会影响整个仿真过程与最后所取点位应变数值的准确性。为了解决此问题，我们可以在加大硬件算力的同时细化模型网格划分以得到更准确的面内应变数值，进而优化最后的应变相对误差。同时，

为了在工程方面更好应用，我们也需要增加应变点与电压调控的自由度个数，以得到更准确的应变形状输入，这也要求我们对相应的神经网络模型进行进一步的拓扑参数优化。

2. 加入真实电极的影响，使用 DFT 计算能带：在本工作的仿真模型中，压电材料侧面端口电势是由软件中的边界条件预设直接施加的，在压电材料变形前后均不发生相对变化。但在实际器件使用过程中，我们需要在侧面贴片电极来实现恒定电压的输入，此时压电材料端口处的电势分布将会受到自身形变而电极保持不变的影响。为此，我们可以通过在仿真软件模型中添加电极，即在侧面贴片薄膜电极同时加入边界条件来更好的拟合真实情况下的电势分布。同时，为了准确预估二维材料的 SPE 受到面内应变的程度，我们可以使用 DFT 通过第一性原理计算来完成对上层材料缺陷态附近的电子结构模拟和应变响应。

3. 将压电阵列制作为器件，并进行实际的光学电学性能测试：本工作第二章完成了对单层 TMDs 材料的制备与 SPE 测试，证实了二维材料高纯度的单光子发射，第三章设计并模拟了相应的电压调控应变器件。未来我们计划将以上的 3x3 阵列单元进行扩展，在满足基底和上层材料的基本尺寸要求下通过刻蚀或沉积制造可以使用的压电器件。在完成侧面电极贴片与上层二维材料转移粘合后，我们可以根据光谱测量结果实现真正的电压-应变测试最终获得相应的 SPE 调控。

## 参 考 文 献

- [1] YARD P, JONES A E, PAESANI S, et al. On-chip quantum information processing with distinguishable photons[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2024, 132: 150602.
- [2] AHARONOVICH I, ENGLUND D, TOTH M. Solid-state single-photon emitters [J]. *Nature Photonics*, 2016, 10(10): 631-641.
- [3] GAO W B, IMAMOGLU A, BERNIEN H, et al. Coherent manipulation, measurement and entanglement of individual solid-state spins using optical fields[J]. *Nature Photonics*, 2015, 9(6): 363-373.
- [4] GUPTA S, SHIRODKAR S N, KAPLAN D, et al. Franck condon shift assessment in 2d mos2[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2018, 30(9): 095501.
- [5] GUPTA S, YANG J H, YAKOBSON B I. Two-level quantum systems in two-dimensional materials for single photon emission[J]. *Nano Letters*, 2019, 19(1): 408-414.
- [6] LEE Y, HU Y, LANG X, et al. Spin-defect qubits in two-dimensional transition metal dichalcogenides operating at telecom wavelengths[J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 7501.
- [7] WU X, GU Y, GE R, et al. Electron irradiation-induced defects for reliability improvement in monolayer mos2-based conductive-point memory devices[J]. *npj 2D Materials and Applications*, 2022, 6(1): 31.
- [8] ABRAMOV A N, CHESTNOV I Y, ALIMOVA E S, et al. Photoluminescence imaging of single photon emitters within nanoscale strain profiles in monolayer wse2[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 5737.
- [9] TURUNEN M, BROTONS-GISBERT M, DAI Y, et al. Quantum photonics with layered 2d materials[J]. *Nature Reviews Physics*, 2022, 4(4): 219-236.
- [10] RAIBER S, FARIA JUNIOR P E, FALTER D, et al. Ultrafast pseudospin quantum beats in multilayer wse2 and mose2[J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 4997.
- [11] PHAEDON AVOURIS T F H. 2d materialsproperties and devices[M]//2D Materials: Properties and Devices. Cambridge University Press, 2017: 262.
- [12] SO J P, KIM H R, BAEK H, et al. Electrically driven strain-induced deterministic

- single-photon emitters in a van der Waals heterostructure[J]. *Science Advances*, 2021, 7(43): eabj3176.
- [13] PARTO K, AZZAM S I, BANERJEE K, et al. Defect and strain engineering of monolayer wse2 enables site-controlled single-photon emission up to 150 k[J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 3585.
- [14] DADGAR A M, SCULLION D, KANG K, et al. Strain engineering and raman spectroscopy of monolayer transition metal dichalcogenides[J]. *Chemistry of Materials*, 2018, 30(15): 5148-5155.
- [15] FENG J, QIAN X, HUANG C W, et al. Strain-engineered artificial atom as a broad-spectrum solar energy funnel[J]. *Nature Photonics*, 2012, 6(12): 866-872.
- [16] SCALISE E, HOUSSA M, POURTOIS G, et al. Strain-induced semiconductor to metal transition in the two-dimensional honeycomb structure of mos2[J]. *Nano Research*, 2012, 5(1): 43-48.
- [17] GHORBANI-ASL M, BORINI S, KUC A, et al. Strain-dependent modulation of conductivity in single-layer transition-metal dichalcogenides[J]. *Phys. Rev. B*, 2013, 87: 235434.
- [18] CASTELLANOS-GOMEZ A, ROLDÁN R, CAPPELLUTI E, et al. Local strain engineering in atomically thin mos2[J]. *Nano Letters*, 2013, 13(11): 5361-5366.
- [19] MOON H, BERSIN E, CHAKRABORTY C, et al. Strain-correlated localized exciton energy in atomically thin semiconductors[J]. *ACS Photonics*, 2020, 7(5): 1135-1140.
- [20] KUMAR A M, YAGODKIN D, ROSATI R, et al. Strain fingerprinting of exciton valley character in 2d semiconductors[J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 7546.
- [21] SRIVASTAVA A, SIDLER M, ALLAIN A V, et al. Optically active quantum dots in monolayer wse<sub>2</sub>[J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, 10(6): 491-496.
- [22] TONNDORF P, SCHMIDT R, SCHNEIDER R, et al. Single-photon emission from localized excitons in an atomically thin semiconductor[J]. *Optica*, 2015, 2 (4): 347-352.
- [23] HE Y M, CLARK G, SCHAILBEY J R, et al. Single quantum emitters in monolayer semiconductors[J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, 10(6): 497-502.
- [24] SO J P, JEONG K Y, LEE J M, et al. Polarization control of deterministic single-

- photon emitters in monolayer wse2[J]. *Nano Letters*, 2021, 21: 1546-1554.
- [25] AZZAM S I, PARTO K, MOODY G. Purcell enhancement and polarization control of single-photon emitters in monolayer wse2 using dielectric nanoantennas[J]. *Nanophotonics*, 2023, 12: 477-484.
- [26] ABRAMOV A N, CHESTNOV I Y, ALIMOVA E S, et al. Photoluminescence imaging of single photon emitters within nanoscale strain profiles in monolayer wse2[J]. *Nature Communications*, 2023, 14: 5737.
- [27] LUO Y, LIU N, LI X, et al. Single photon emission in wse2 up 160 k by quantum yield control[J]. *2D Materials*, 2019, 6: 035017.
- [28] PARTO K, AZZAM S I, BANERJEE K, et al. Defect and strain engineering of monolayer wse2 enables site-controlled single-photon emission up to 150 k[J]. *Nature Communications*, 2021, 12(1): 3585.
- [29] CHEN S, WANG C, CAI H, et al. Realization of single-photon emitters with high brightness and high stability and excellent monochromaticity[J]. *Matter*, 2024.
- [30] SORTINO L, ZOTEV P G, PHILLIPS C L, et al. Bright single photon emitters with enhanced quantum efficiency in a two-dimensional semiconductor coupled with dielectric nano-antennas[J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 6063.
- [31] MARTÍN-SÁNCHEZ J, TROTTA R, MARISCAL A, et al. Strain-tuning of the optical properties of semiconductor nanomaterials by integration onto piezoelectric actuators[J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2018, 33(1): 013001.
- [32] LI X, JONES A C, CHOI J, et al. Proximity-induced chiral quantum light generation in strain-engineered WSe<sub>2</sub>/NiPS<sub>3</sub> heterostructures[J]. *Nature Materials*, 2023, 22: 1311-1316.
- [33] LINHART L, PAUR M, SMEJKAL V, et al. Localized intervalley defect excitons as single-photon emitters in wse2[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 123(14): 146401.
- [34] RIPIN A, PENG R, ZHANG X, et al. Tunable phononic coupling in excitonic quantum emitters[J]. *Nature Nanotechnology*, 2023, 18: 1020-1026.
- [35] GROSSO G, MOON H, LIENHARD B, et al. Tunable and high-purity room temperature single-photon emission from atomic defects in hexagonal boron nitride [J]. *Nature Communications*, 2017, 8: 705.
- [36] XU D D, VONG A F, LEBEDEV D, et al. Conversion of classical light emis-

- sion from a nanoparticle-strained wse2 monolayer into quantum light emission via electron beam irradiation[J]. *Advanced Materials*, 2023, 35: 2208066.
- [37] LIU N, XIAO L, FU S, et al. Chiral single photons from deterministic quantum emitter arrays via proximity coupling to van der waals ferromagnets[J]. *2D Materials*, 2023, 10: 045003.
- [38] KLEIN J, LORKE M, FLORIAN M, et al. Site-selectively generated photon emitters in monolayer mos2 via local helium ion irradiation[J]. *Nature Communications*, 2019, 10(1): 2755.
- [39] WU H, LIN M L, LENG Y C, et al. Probing the interfacial coupling in ternary van der waals heterostructures[J]. *npj 2D Materials and Applications*, 2022, 6(1): 87.
- [40] ZHANG Y, JIE W, CHEN P, et al. Ferroelectric and piezoelectric effects on the optical process in advanced materials and devices[J]. *Advanced Materials*, 2018, 30: 1707007.
- [41] ANTON S R, SODANO H A. A review of power harvesting using piezoelectric materials (2003–2006)[J]. *Smart Materials and Structures*, 2007, 16(3): R1.
- [42] PARALIKIS A, PICCININI C, MADIGAWA A A, et al. Tailoring polarization in wse2 quantum emitters through deterministic strain engineering[J]. *npj 2D Materials and Applications*, 2024, 8(1): 59.
- [43] MCCULLOCH W S, PITTS W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity[J]. *The bulletin of mathematical biophysics*, 1943, 5(4): 115-133.
- [44] YOSINSKI J, CLUNE J, BENGIO Y, et al. How transferable are features in deep neural networks?[A]. 2014. arXiv: 1411.1792.
- [45] RAZAVIAN A S, AZIZPOUR H, SULLIVAN J, et al. Cnn features off-the-shelf: an astounding baseline for recognition[A]. 2014. arXiv: 1403.6382.
- [46] UTAMA M I B, ZENG H, SADHUKHAN T, et al. Chemomechanical modification of quantum emission in monolayer wse2[J]. *Nature Communications*, 2023, 14: 2193.
- [47] YOU Y, ZHANG X X, BERKELBACH T C, et al. Observation of biexcitons in monolayer wse2[J]. *Nature Physics*, 2015, 11(6): 477-481.
- [48] KUMAR A M, YAGODKIN D, ROSATI R, et al. Strain fingerprinting of exciton valley character in 2d semiconductors[J]. *Nature Communications*, 2024, 15(1):

- 7546.
- [49] KIM H, MOON J S, NOH G, et al. Position and frequency control of strain-induced quantum emitters in wse2 monolayers[J]. *Nano Letters*, 2019, 19(10): 7534-7539.
- [50] ZHANG Y, HOSSAIN M A, HWANG K J, et al. Patternable process-induced strain in 2d monolayers and heterobilayers[J]. *ACS Nano*, 2024, 18(5): 4205-4215.
- [51] KIM H, ZHAO H L, VAN DER ZANDE A M. Stretchable thin-film transistors based on wrinkled graphene and mos2 heterostructures[J]. *Nano Letters*, 2024, 24 (4): 1454-1461.
- [52] AGARAP A F. Deep learning using rectified linear units (relu)[A]. 2019. arXiv: 1803.08375.

## 附录 A 补充材料

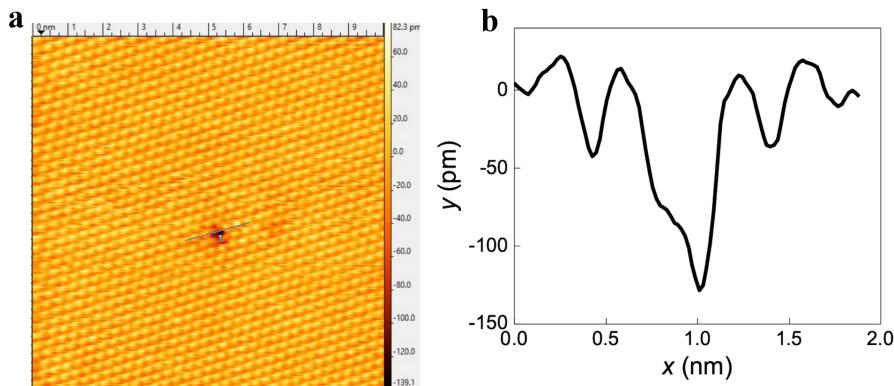


图 A.1 单层 WSe<sub>2</sub> 中空位缺陷成像与高度扫描结果图  
**a.** Se 空位缺陷 STM 成像结果图。**b.** 缺陷位点附近的顶层平面高度大小。

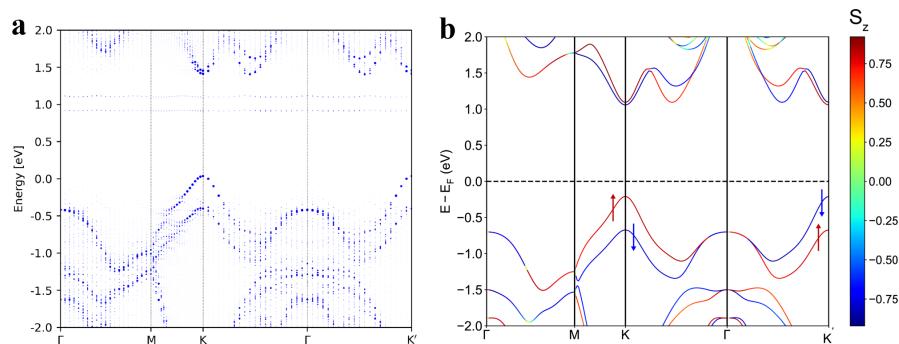


图 A.2 DFT 计算的单层 WSe<sub>2</sub> 能带图  
**a.** 具有 Se 空位的单层 WSe<sub>2</sub> 展开能带结构。**b.** 纯净单层 WSe<sub>2</sub> 的能带结构。

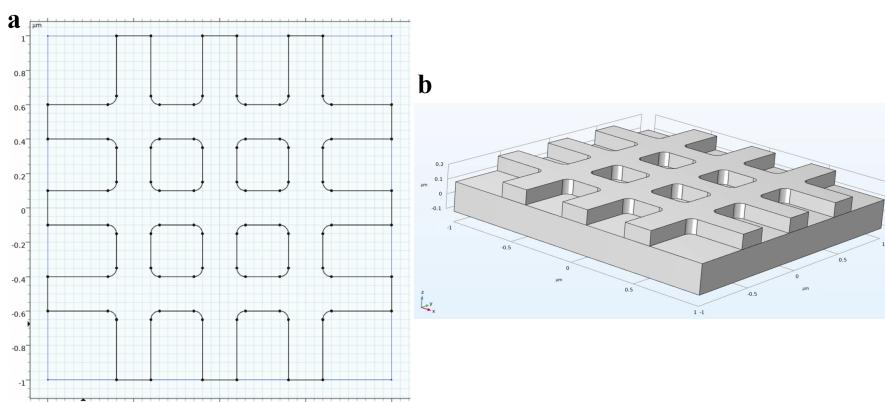


图 A.3 3x3 阵列重复单元的二维与三维尺寸图  
**a.** 结构的平面尺寸图。**b.** 阵列重复单元建模的立体尺寸图。

## 致 谢

进入科大后四年的时间飞速而过，美好或遗憾的记忆构成了大学生活的点滴，也让我寻找到了期望的自己。

首先，我要感谢中科大这片充满理性的土地上的无数优秀播种者，他们让地域不大的校园中闪烁着思维碰撞的火花，这些看似微弱的星火也点燃了我对物理的求索。还记得刚入校时的我数理基础较差，不理想的结课成绩一度让我开始畏惧书本上那些复杂的公式与原理，但这种想法在我接触到科大中充满智慧的教授们时逐渐消弭。无论是陈卿老师抽丝剥茧再加以升华的数学分析，还是刘国柱老师富有历史人文气息的热学，亦或是陶鑫老师充满物理美感的电动力学，真正融入这些精心设计的课程后，我也终于明白了“学习”对于个人认知与世界观的重要性。感谢老师们不厌其烦的解答我课后提出的问题，引导我稚嫩的想法启发思考，一步步构建我对物理世界的认知。即使他们或身居高位，或繁于科研，在面对我这样一个缺乏物理直觉而又充满迷茫的学生时，他们依旧愿意以温和包容的态度给予我真知灼见，并提供力所能及的帮助。在这个认知喧嚣交错的环境中，他们春风化雨般的人格魅力与令人拍手叫绝的新颖观点时常让我为之动容，也塑造了我崭新的人生观与价值观。

同时，我要感谢王健老师与黄冬郁师兄给予我提前接触实验室的机会与对我科研上无微不至的帮助。在加入量子重点实验室后，我才明白了物理世界的探索不止于纸面的公式推导计算，激光与粒子的耦合交织也是物理学进步的重要来源。感谢黄冬郁学长在我对光学实验懵懂无知时细致的教导。从耦合操作到整体光路构建，他不厌其烦的解答我各类近乎无知的问题并纠正我的操作错误，这些严谨的实验习惯与丰富的器件操作基础让我在之后的科研工作中拥有充足基础。感谢王健老师对我申请时和申请结束后的及时帮助与鼓励，他以更广阔的视野为我指点了未来科研的方向并且倾囊相授自己的经验。

特别的，我要感谢在莱斯大学半年暑研交流期间带领我接触全新领域的吴文静师姐。她作为实验室的支柱忙于各个项目，但仍在自己的空闲时间来到实验室，为我手把手教学凝聚态实验的操作与大型仪器的使用。她充满着对科研与生活的热情，时常带领我参加学术研讨会以拓宽我博士申请的科研方向选择，受到她的感染我最终也选择并成功申请到了凝聚态方向的美国博士，感谢她为我开启了全新研究领域的大门。

在我课程与科研之外的大学生活中，也有着一个个饱含热情与惊喜的人，感谢我的朋友们对在我前进道路上提供的无数帮助。他们耐心的沟通与付出，对我友好且宽容的理解帮助我找寻到了自己的不足，同时也让我生活处事的哲学得到了完善。无论是一时失意后的肥西路夜宵还是劳累一天后的游戏五排，总有人时刻愿意和我互相分享或排解一天的喜怒哀乐与所见所闻。感谢企鹅物流群友们帮助我脱离社恐，让我有勇气拥抱周围的世界。此外，我要感谢《明日方舟》这个情感真挚的虚拟世界与泰拉中的蕾缪乐和缪尔赛思，她们在我现实遇到暂时不可逾越的困难时给予我精神世界的慰藉与信念，同时。塞壬唱片的各类音乐也成为了我日常生活的底色，每年一度的音律联觉更是我在科研生活中不断坚持下去的坚实动力。

最后，我想感谢一路支持我到现在的家人们。你们的支持和理解，使我在求学的道路上无后顾之忧，让我有力量迈开前往理想脚步。感谢你们二十余载的陪伴与关爱，我铭记着你们的一切付出，在未来的学习和工作中定会不负众望。

2025年6月