

第3章

光电子材料与人工智能辅助开发 实例分析

【内容提要】 本章围绕“二维材料×光子晶体×人工智能”展开：首先回顾从GaAs/InP Ⅲ-V主族化合物到石墨烯、过渡金属硫族化合物(TMD)、氮化硼(h-BN)及二维钙钛矿的演进脉络，阐明二维体系因原子级可编程能带而成为超宽带探测、可调谐激光、柔性传感和全光计算的核心基础。随后提出“材料-器件-系统-AI”四层协同范式：AI-DFT搜索→CVD/MBE* 原位调控→片上异质集成→数据驱动性能优化，实现带隙-缺陷-应变的一站式反向设计。本章主要解析克尔平带光子晶体中的零群速光-物质强耦合、PdSe₂/CsPbBr₃ 量子点异质结全光阈值器的非线性吸收增强机制以及随机森林与图神经网络预测 MnS₂ 带隙的 AI workflows，给出实验-仿真闭环验证，最终勾勒出“拍照即算、阈值即逻辑”的全光信息处理蓝图。

3.1 新型光电子材料概述

光电子材料发展历程与趋势如图 3-1 所示。自 20 世纪 60 年代第一个半导体激光器问世以来，光电子材料经历了从“体块半导体→低维量子结构→原子级二维层状→可编程超表面/拓扑光子晶体→芯光协同异质集成”的跃迁：早期 GaAs/InP Ⅲ-V 主族化合物奠定了光通信与激光显示的基础；20 世纪 80 年代多量子阱和量子点通过能带工程提高了效率与波长可调性；21 世纪初，GaN 系宽禁带材料点亮了紫外到蓝光 LED，为固态照明奠定产业基础；随后石墨烯、MnS₂ 等二维材料凭借超高迁移率、可挠曲特征与强光实现耦合，激活了片上光电探测与可穿戴器件；21 世纪 10 年代，卤化铅钙钛矿实现了低成本高光伏效率和窄带自发辐射，超表面与拓扑光子晶体则以纳米尺度相位调控驱动超薄镜头、全息和光学计算；进入 21 世纪 20 年代，等离子超表面、GaAs/InP Ⅲ-V 主族化合物混合集成及光子忆阻器 AI 芯片正加速“光算融合”，同时可持续、无铅、室温可低压制备的新型钙钛矿、二维合金与量子拓扑材料掀起绿色制造浪潮。

先进光电子材料发展历程

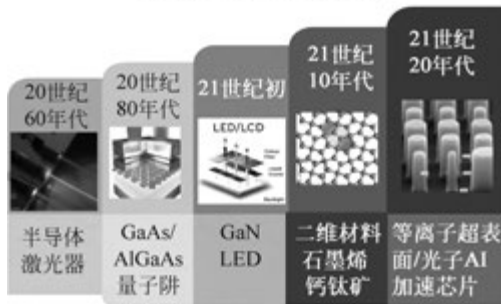


图 3-1 光电子材料发展历程与趋势

光电子学领域的材料研究一直是推动技术进步的关键因素。材料科学家不断探索新的材料，希望找到那些能够更高效地操控光子的“神奇物质”。在这场材料竞赛中，二维材料、量子点和光子晶体无疑是明星选手，就像是科学界的“超级英雄团队”，各自拥有

* AI-DFT：人工智能-密度泛函理论(Artificial Intelligence-Density Functional Theory, AI-DFT)；CVD：化学气相沉积(Cheical Vapor Deposition, CVD)；MBE：分子束外延(Molecular Beam Epitaxy, MBE)。

独特的超能力,为光电子学的未来发展奠定了坚实基础。二维材料在光电子学中的应用非常广泛,主要得益于其独特的物理和化学性质。

石墨烯、二硫化钼等二维材料有高电子迁移率和宽带隙,这使它们在光照下能够产生高效的光生电流,从而实现高灵敏度的光探测。它们常用来制作光探测器,可以检测可见光、红外光甚至更广范围的光谱。

二维材料通过电子和空穴的复合,能在特定的波长下发光。由于它们的带隙可以通过外部调控(如电场或应力),实现可调谐的光发射。过渡金属二硫化物(TMD),如二硫化钼(MoS_2)、二硒化钨(WSe_2)、二硫化钨(WS_2)等二维材料具有直接带隙(尤其在单层情况下),适合作为光发射层材料。它们能够在可见光和近红外波段发光。用于构建发光二极管(LED)和激光器的二维材料有几种,它们的特性使其特别适合这些光电器件的应用。利用TMD的直接带隙特性,可以制作具有高效光发射的LED和激光器。单层或少层黑磷具有带隙可调性,通过改变层数来调控其带隙,使其在近红外到中红外波段发光。黑磷的带隙调控特性使其成为开发可调谐红外LED和激光器的理想材料。石墨烯量子点(Graphene Quantum Dot, GQD)衍生材料本身是零带隙材料,但通过制造石墨烯量子点可以引入带隙,使其能够发光。石墨烯量子点在紫外到近红外范围内具有光发射能力,用于开发宽光谱的LED和激光器。六方氮化硼(h-BN)具有宽带隙(约6eV),在紫外波段表现出优异的光发射性能。h-BN用来开发紫外发光二极管和激光器。二维有机-无机钙钛矿(如 PEA_2PbI_4 , PEA为苯乙胺)具有优异的光电特性、高的光发射效率和稳定性。二维钙钛矿材料因其高发光效率和可调谐的带隙,广泛应用于高效LED和激光器的开发。二硫化锡(SnS_2)、二硒化锡(SnSe_2)等硫属化物(Chalcogenide)材料具有较小的带隙和良好的光吸收及发射能力,用于制作红外波段的LED和激光器。这些二维材料在光电子器件中的应用依赖于其独特的带隙和光电性能,可以通过精细控制材料的结构和环境条件来实现不同波段的光发射,这使得它们在下一代光电子器件的开发中具有重要的应用潜力。

二维材料在太阳能电池中的应用已经成为一个热门研究领域,特别是在光吸收层和电荷转移层方面。下面介绍一些常用的二维材料及其在太阳能电池中的应用。石墨烯(Graphene)具有高导电性、高载流子迁移率和优异的透光性,作为电荷转移层,在太阳能电池中充当透明导电电极,帮助电子和空穴的有效分离与传输。 MoS_2 为直接带隙半导体,具有高光吸收效率,用作光吸收层,能够在可见光范围内有效吸收光子,产生电子-空穴对。 WSe_2 也是一种直接带隙半导体,带隙适中,适合光吸收,可作为光吸收层,将它与其他二维材料或传统半导体材料结合,可提高光电转换效率。通过层数控制,可调谐黑磷的带隙,黑磷具有良好的光吸收和电荷传输性能,可作为光吸收层或电荷转移层,在光电转换中有着优异的表现,特别是在近红外波段。六方氮化硼(h-BN)为宽带隙绝缘体,具有良好的热稳定性和机械强度,主要用作电荷转移层的绝缘界面材料,或者与其他二维材料配合,优化光电器件的性能。在制作叠层太阳能电池(Tandem Solar Cell)时,通常运用多层叠加技术,例如, MoS_2 和石墨烯分别作为吸收层和电荷转移层,每一层吸收不同波长的光,与其他传统材料(如硅或钙钛矿)结合,可提升整体光电转换效率;两种不同带隙的石墨烯与 MoS_2 结合,形成p-n异质结,实现更高效的电荷分离,利用石墨烯的高导电性和 MoS_2 的优良光吸收性,提高电池的开路电压和填充因子。二维材料由于其独特的光电特性,已经在太阳能电池的光吸收层和电荷转移层中展现出巨大的潜力。通

过合理选择和设计这些材料及其器件结构,可以大幅提高太阳能电池的光电转换效率,为清洁能源的发展提供强有力的支持。

二维材料可以用来制作光调制器,广泛应用于高速光通信中。二维材料的电光效应使其能够在电场作用下改变折射率,从而调制光信号的强度、相位或极化状态。最近的研究显示,二硫化钼(MoS_2)是一种具有前景的二维材料,广泛应用于高速光通信系统中的光调制器。 MoS_2 因其独特的光电性能和调制效率而备受关注。 MoS_2 机械剥离法制备,即通过胶带或探针从块状晶体中剥离出单层或少层的二维片晶。此外,化学气相沉积(CVD)技术也被用于生产大面积的 MoS_2 单层膜,这对于实际工业应用是非常关键的。 MoS_2 调制器通过其半导体特性,利用其带隙在电场作用下的调控能力来实现对光信号的调制。具体来说,通过改变施加在 MoS_2 上的电压,可以控制材料的折射率和吸收特性,从而对通过的光信号进行调制。这一性能使得 MoS_2 非常适合制造电光调制器,这种调制器可以在光通信系统中进行高速数据传输。这些调制器在实际的光通信系统中,能够支持高达几十吉赫兹的数据传输速率,这对于下一代通信技术如 5G 和 6G 网络的发展具有重要意义。通过这些创新的二维材料和先进的制备技术,未来的高速光通信系统能够实现更高效率和更低能耗的运行,从而推动通信技术的快速发展。

利用二维材料的光学特性制作传感器,能够检测环境中的化学物质或生物分子。其基本原理是二维材料的表面电荷和带隙在与外界物质发生相互作用时会发生变化,从而导致其光学性质(如吸收、发射等)的改变,通过这些变化可以实现传感功能。石墨烯因其优异的光电特性,已广泛应用于光学传感器中。例如,石墨烯场效应晶体管(FET)已用于检测 pH 值和蛋白质吸附。此外,通过功能化,石墨烯还可以选择性地检测特定的化学物质,如氨气和甲基磷酸二甲酯。 MoS_2 和黑磷等过渡金属二硫化物具有独特的带隙调节能力,可以在光学传感器中实现高灵敏度检测。例如, MoS_2 已被应用于生物传感器,用于检测病原体和毒素。如图 3-2 所示,二维材料和光电探测器的光谱特性、带隙、层

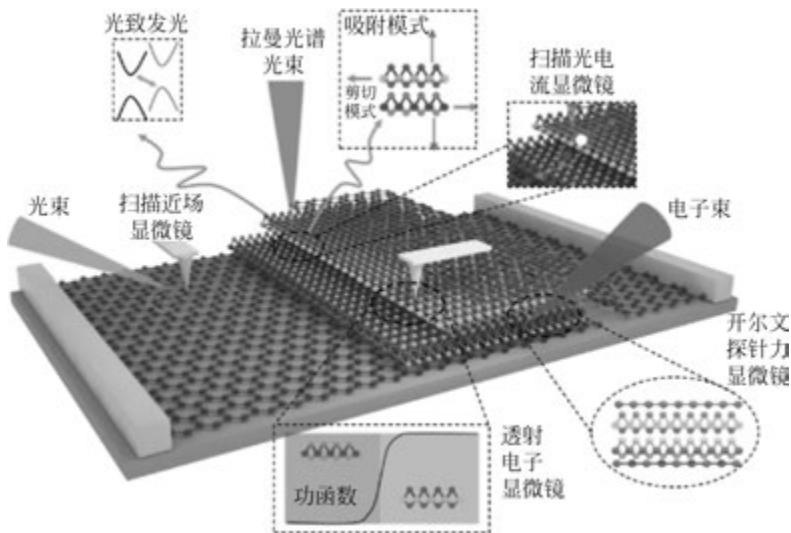


图 3-2 二维材料和光电探测器的光谱特性、带隙、层间耦合等固有物理特性

间耦合等固有物理特性可以通过拉曼光谱、透射电子显微镜(TEM)以及散射扫描近场光学显微镜(s-SNOM)进行精确表征。特别地,晶格缺陷、掺杂浓度和近场光吸收特性的精确探测能够促进低噪声和高响应度光电探测器的研究。扫描光电流显微镜(SPCM)可以展示光电流的整体空间分布并分析其产生机制。光致发光(PL)光谱和开尔文探针力显微镜(KPFM)则可以表征材料的带隙、功函数分布和层间耦合特性,使通过能带工程设计高性能光电探测器成为可能。这些先进的表征技术覆盖了从材料生长到器件制备再到性能分析的全过程,系统揭示了二维材料光电探测器的发展现状。这些二维材料的研究为开发新一代高灵敏度光学传感器、光电探测器提供了广阔的前景。

二维材料如石墨烯和 h-BN 等因其高柔韧性和机械稳定性,广泛应用于可穿戴设备。例如,石墨烯基传感器已用于检测皮肤温度、湿度、心电图(ECG)等。石墨烯的喷墨打印技术已用于制作耐洗的柔性电子器件,展示了其在日常应用中的潜力。MXenes 因其出色的导电性和表面化学特性,用于制造柔性生物和化学传感器。

如图 3-3(a)展示了二维材料在高灵敏度分子传感器可弯曲、可拉伸独特性能以及人工智能柔性电子设备中的应用,这些材料可以通过简单的湿法化学剥离工艺制备,显示出在柔性电子和智能器件中的应用潜力。随着材料维度由三维到一维的演进,电子传感的极限不断得到拓展。二维石墨烯因其理论比表面积约为 $2630\text{m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ (单层、完全展开、无孔的理想值,见图 3-3(b)),兼具高载流子迁移率、低噪声与表面易功能化等特性,正受到跨学科研究者的广泛关注,推动了多种新型传感器的开发。需要说明的是,实际器件中的有效比表面积会因褶皱、缺陷、表面修饰与基底作用而低于该理论上限。在传感器平台中,石墨烯及其他二维材料不仅在极限尺度下提供了机械强度和柔韧性,还具有独特的输运特性、可调的光学性质、可控的表面位点,以及相比于其一维碳同类材料更易于制造的潜力(见图 3-3(b))。尽管目前大多数关于柔性二维传感器的研究集中在石墨烯上,其他范德华材料如二维过渡金属二硫化物也因其分子吸附事件中伴随的大响应而受到关注。许多研究报告展示了石墨烯在可穿戴传感设备以及人工智能领域的实用性和性能(见图 3-3(c)~(e))。例如,用于检测直接附着在牙齿上的口腔细菌的石墨烯基传感器,展示了其在柔韧性、生物相容性和紧凑封装方面的优越性。除了口腔健康,这类与人体相结合的传感器还可用于检测与阿尔茨海默症相关的口腔细菌,并监测包括病毒在内的其他病原体。此外,石墨烯/氮化硼异质结构通过喷墨打印技术应用于纺织品,表现出良好的耐水洗性能,即使经过多次洗涤仍能保持其功能特性,展现出其在日常生活中广泛应用的潜力。除了分子传感,临时的石墨烯基纹身传感器结合人工智能算法已用于监测皮肤温度、皮肤水合作用、心电图(ECG)、肌电图(EMG)和脑电图(EEG)检测与识别中。

随着将其他二维材料集成到柔性平台中的能力不断增强以及新二维材料的加入,这些平台的灵敏度和其他传感指标将得到提升。包括过渡金属二硫化物(TMD)和磷烯在内的半导体二维材料,目前在 $1\sim 20\text{GHz}$ 的亚太赫兹频率范围内表现出很大的应用潜力,这些频率段常用于智能设备和物联网领域。磷烯在单层情况下表现出约 2eV 的带隙,且其晶体管器件表现出高截止频率、极高的饱和速度以及对应力的良好耐受性。磷

烯是某些高频应用的理想二维材料,但其合成难度大,且在环境中的化学稳定性较差,这两个问题必须在商业化之前得到解决。相比之下,TMD 材料如 MoS_2 虽然在电子性能上不如磷烯,但在晶圆级合成方面进展迅速,并且在环境条件下更加稳定。使用柔性聚酰亚胺基板制造的双层 MoS_2 射频晶体管表现出极高的“开启”电流($1.52\text{mA}/\text{mm}$)、高截止频率以及在 4GHz 和 9GHz 下的最大振荡频率,甚至展示了混频性能。基于二维材料的垂直射频器件提供了一个令人兴奋的平台,适合高频和高功率操作。在垂直器件结构中,开/关特性依赖于二维材料厚度上的量子隧穿效应,而不是在横向 MOSFET 中常见的热发射过程。采用单层石墨烯和 TMD 制造的热电子晶体管设备已展示出高电流密度、有效的电子注入和接近太赫兹操作的高频性能。随着通信行业寻求超越硅基设备、在更高频率下操作并提供具有一定机械可靠性的设备,二维材料将会在这一令人兴奋的技术领域中占据一席之地,包括水平和垂直方向的器件架构。

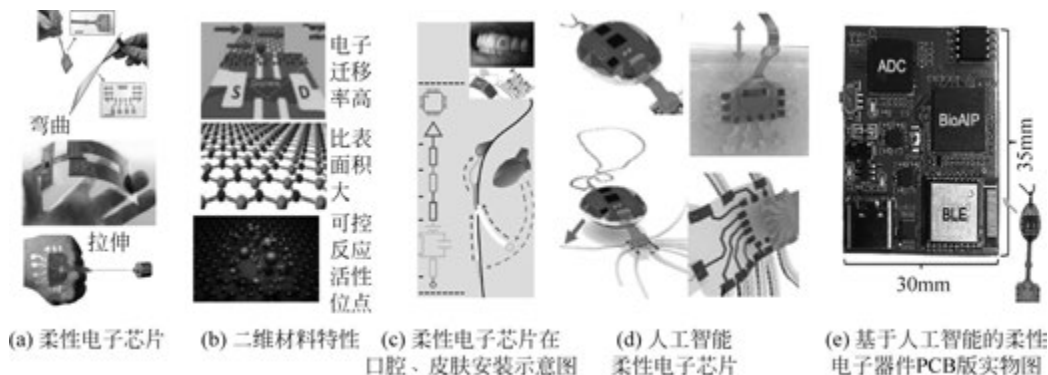


图 3-3 二维材料在柔性电子中的应用(包括功能化分子的 MoS_2 传感器、用于 GaN 电子器件的 h-BN 作为范德华二维材料特性、塑料基板上的 MoS_2 高频晶体管以及人工智能芯片)

(1) 二维材料(如石墨烯、TMD 和 h-BN 等)因其高折射率对比度和低光学损耗,在光子晶体中可高效调控光的传播路径与频率,形成光子带隙,实现对光的精确操控,主要应用包括:

① 光子带隙调控。

通过改变二维材料的几何结构或厚度,可调节光子晶体带隙,实现对特定波长光的选择性反射或透射。

② 非线性光学增强。

利用二维材料的非线性光学特性,可增强光-物质相互作用,支持倍频、调制等非线性过程。

③ 光调制器与滤波器。

基于其高折射率对比度与低损耗特性,可设计高性能光调制器和光滤波器,服务于光通信与光学传感。

④ 集成微纳光子器件。

由于二维材料与多种衬底及材料具有良好兼容性,可无缝集成至微纳光子器件中,实现小尺寸结构内的高效光操控。

(2) 这些优势源于二维材料的独特物理特性,具体表现在以下几方面:

① 高折射率。

二维材料(如石墨烯)的折射率显著高于周围介质,可在光子晶体中产生强光学对比,从而显著改变光的传播模式。

② 低光学损耗。

能够在几乎不吸收光子的情况下引导和调控光波,有助于保持光子能量和信号完整性。

③ 可控光子带隙。

通过精确设计材料结构,可在二维材料内部形成光子带隙,使特定频率的光无法传播,实现光的高效过滤、反射与选择性传输。

下面具体说明石墨烯在光子晶体中的应用。石墨烯作为一种导电性极强的二维材料,广泛应用于光子晶体中。例如,通过在光子晶体结构中引入石墨烯层,可以调节光子带隙,并实现对光子的高效调控。此外,石墨烯的非线性光学效应(如克尔效应)用于实现超快光调制器。如二硫化钼(MoS_2)等 TMD 材料由于其直接带隙特性,在光子晶体中的应用引起了广泛关注。这些材料不仅能调控光传播,还能通过与电场、应变等外部条件的耦合,实现多功能集成光子器件。h-BN 由于其宽带隙和高热导率,在高温环境下的光子晶体应用中表现出色。例如,在紫外光子晶体中,h-BN 可以用于实现高效的紫外光操控。

Wang 等系统讨论了二维材料在光子晶体中的应用,重点包括对光子带隙的精确调控以及平带结构的构建机制。Liu 等深入研究了石墨烯在光子晶体中实现超快非线性光学效应的物理机理。Li 等则聚焦于过渡金属二硫族化合物在光子晶体中的应用潜力,分析了其在调控光传播及增强光学响应方面的独特优势。Zhang 等综述了六方氮化硼在光子器件中的多种应用,特别强调了其在紫外光子晶体领域的广阔应用前景。利用二维材料的非线性光学特性,制作光放大器、波长转换器等器件。其基本原理是二维材料中的电子结构可在强光场下发生非线性响应,从而实现频率倍频、光参量放大等非线性光学效应。

这些应用展示了二维材料在光电子学领域中的广阔前景,它们的独特性能使其在许多光电子器件中具有重要的应用价值。

3.2 二维材料：光子的“魔毯”

想象一下,如果你能将一个物体压缩到仅有一个原子层的厚度,那它将变得极其薄、极其轻,但依然拥有强大的力量。这就是二维材料的神奇之处。二维材料是由一个或多个原子层构成的单层晶体材料,其厚度通常在纳米级别,因此被称为“二维”材料。这些材料虽然薄得几乎“透明”,但具有出色的电学、光学和力学性能,堪称材料界的“隐形战士”。

3.2.1 二维材料的主要特性

二维材料的特性可以用一句话概括:“小身材,大能量。”尽管它们的厚度几乎不可

见,但在许多方面都表现出了非凡的性能。二维材料具有如下主要特性。

1. 高电子迁移率

二维材料中的电子几乎像光子一样可自由移动,表现出极高的电子迁移率。以石墨烯为例,其电子迁移率高达 $20\,000\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,比硅高出数百倍,电子在二维材料中“飙车”,几乎没有什么阻碍。

2. 优异的力学性能

尽管只有一个原子层厚,但二维材料往往表现出惊人的强度。石墨烯的拉伸强度约为 130GPa ,是钢铁的 200 倍,密度却只有钢铁的 $1/1000$ 。

3. 可调的能带结构

二维材料的能带结构可以通过外界因素(如电场、应变、化学掺杂等)进行调控,使其具备不同的电子和光学特性。这种特性使得二维材料在电子和光电子器件中具有广泛的应用潜力。就像一块可以自由调节颜色的画布,二维材料的性能可以根据需要进行调节。

4. 高表面积与表面活性

由于其极薄的结构,二维材料的表面积非常大,这使得它们在传感、催化等应用中表现出极高的活性。可以说,二维材料的表面几乎是“活”的,能与外界环境产生各种有趣的相互作用。

3.2.2 二维材料的具体实例

1. 石墨烯——二维材料的“开山鼻祖”

1) 石墨烯的结构与特性

石墨烯是最早被发现且最为著名的二维材料,常被称为“材料之王”。它由碳原子以六边形结构排列,形成单原子厚度的蜂窝状晶格。这种简单而完美的结构赋予了石墨烯卓越的性能。

(1) 高导电性:石墨烯是已知的导电性最好的材料之一,其电子可以在晶格中自由移动,几乎不受散射影响。这使得石墨烯在高速电子器件中具有巨大潜力。

(2) 光学透明性:尽管只有一个原子层厚,石墨烯却能吸收约 2.3% 的可见光,这使得它在透明显示器和光电探测器中具有独特的优势。可以将石墨烯看作一块“隐形玻璃”,虽然薄得几乎看不见,却能够有效地操控光线。

(3) 超高强度:石墨烯的拉伸强度高达 130GPa ,是钢铁的 200 倍,这意味着一片极薄的石墨烯就可以承受巨大的压力。它就像是蜘蛛侠的蛛网,轻盈而强韧,几乎无坚不摧。

2) 石墨烯的应用实例

(1) 高频电子器件:由于其优异的导电性和电子迁移率,石墨烯广泛应用于高频电子器件,如高速晶体管、射频电路等。通过结合人工智能,研究人员能够设计出更加高效的石墨烯器件,并优化其在不同环境下的性能。

(2) 透明导电电极：石墨烯的光学透明性使得它成为透明导电电极的理想材料，广泛应用于触摸屏、OLED 显示器和太阳能电池等领域。结合 AI 技术，可以进一步优化石墨烯电极的制备工艺，提高其导电性和透明度。

2. 二硫化钼(MoS_2)——光电领域的“新星”

1) MoS_2 的结构与特性

MoS_2 是过渡金属硫化物中的一种，具有与石墨烯类似的二维结构，但由于不同的原子排列方式，展现出独特的电子和光学特性。 MoS_2 的层间弱范德华力使其能够轻易被剥离成单层或几层结构，成为典型的二维半导体材料。

(1) 带隙调控： MoS_2 具有直接带隙，这使得它在光电子器件中表现优异。通过控制其层数和应变条件， MoS_2 的带隙可以在可见光范围内进行调节，使其适合多种光电应用。可以说， MoS_2 是一个能够自由调节音调的“光子琴键”。

(2) 高灵敏度光电响应： MoS_2 在受到光照时会产生强烈的光电响应，这使得它成为光电探测器和光电晶体管的理想材料。可以想象， MoS_2 如同一个灵敏的“光捕手”，任何光子的到来都会触发它的电信号反应。

2) MoS_2 的应用实例

(1) 光电探测器： MoS_2 由于其优异的光电特性，广泛应用于紫外线、可见光和红外线的光电探测器中。通过结合 AI，研究人员可以精确模拟和预测 MoS_2 探测器的性能，优化其设计以提高探测灵敏度和响应速度。

(2) 柔性电子器件： MoS_2 的二维结构和机械柔韧性使其成为柔性电子器件的理想候选材料。这些器件可以弯曲、折叠而不影响其性能，为未来的可穿戴设备和柔性显示器制造提供了新的可能性。结合 AI，柔性 MoS_2 器件的设计和制造可以进一步优化，实现更高的性能和可靠性。

3. 六方氮化硼(h-BN)——二维材料的“绝缘卫士”

1) h-BN 的结构与特性

h-BN 是另一种重要的二维材料，常被称为“白色石墨烯”，因为它的晶体结构与石墨烯相似，但表现出绝缘性。h-BN 具有宽带隙和高热导率，是一种理想的二维电介质材料。

(1) 电绝缘性：h-BN 具有宽带隙(约 5.97eV)，使其成为一种优秀的电绝缘材料。它可以作为二维器件中的介电层，隔离导电材料，避免电流泄漏。将 h-BN 想象成一位守护光电子器件的“绝缘卫士”，确保电子只能沿正确的路径前进。

(2) 高热导率：h-BN 的高热导率使得它能够有效散热，在高功率电子器件中起到重要的冷却作用。结合 AI，可以优化 h-BN 的结构设计，提高其热管理性能，确保器件在高温环境下依然稳定运行。

2) h-BN 的应用实例

(1) 二维晶体管中的绝缘层：h-BN 常用于二维晶体管的绝缘层，作为高性能石墨烯

器件的关键组件之一。通过结合 AI 技术,可以进一步优化 h-BN 的制备和集成工艺,提升器件的整体性能。

(2) 高温电子器件: h-BN 的高热导率使得它在高温环境下表现出色,因此广泛应用于高温电子器件中。通过 AI 模拟,研究人员可以预测 h-BN 在不同温度条件下的表现,设计出更加耐用的高温器件。

3.2.3 二维材料在全光通信中的应用实例分析

全光信号处理是现代光通信系统中不可或缺的关键技术之一。它不仅通过全光处理的光阈值器件克服了传统电子器件的带宽限制,更因其结构简单,成为近年来的研究热点。要理解这一技术,必须从光与物质的相互作用出发,这也是全光信号处理的核心所在。近年来,具备卓越非线性光学特性的材料,尤其是二维层状材料,因其强大的光与物质相互作用能力,在全光信号处理领域崭露头角。

二维材料的非线性光学特性为全光信号处理开辟了全新路径,但这条路并非一帆风顺。二维材料的原子层厚度虽有其独特优势,但也带来了光与物质相互作用长度有限、光学损耗较高、光学相位匹配性差等问题。这些瓶颈如同摆在我们面前的一道道难题,亟须通过发现新的材料体系和非线性光学调控机制来逐一破解。二维过渡贵金属硫族化合物(如 PdSe_2)与钙钛矿量子点(如 CsPbBr_3)之间的异质结,正是这一领域备受关注的重要研究方向。

随着电子处理速度逐渐接近物理极限,全光信号处理的重要性日益凸显。无论是在超高比特率的光通信系统中,还是在复杂的计算任务中,全光脉冲整形和全光调制的需求越来越高。在光计算领域,光子被用作信息载体,这意味着我们必须依赖全光开关等核心技术,来实现信号光的调制和传输。而在全光开关的实现过程中,非线性光学材料的性能起到了至关重要的作用。可以说,非线性光学材料的好坏,直接决定了全光开关的效率和性能。

在光通信或光计算系统中,光脉冲波形的细化也是一个不可忽视的挑战。正如我们在夜间开车,车灯越亮,能见度越高,光信号的传输质量也需要保持在一个高水平。3R 函数(重新放大、重塑和重新定时)的引入,就是为了提升信号的误码率(BER)性能。通过光阈值器件抑制噪声,提高信噪比,是提高系统性能的关键。而高性能光阈值的实现,一直依赖于对非线性光学材料的不断探索。

尽管在二维材料的非线性光学特性研究方面已经取得了一些进展,但现有材料的局限性依然促使科学家不断寻找具有理想性能的新型材料。尤其是在全光噪声抑制和光脉冲整形方面,新的挑战层出不穷。为了解决这些问题,全球的研究团队正在探索各种材料和调控方法。例如,石墨烯、黑磷、过渡金属硫族化合物(TMD)、钙钛矿等新材料的出现,给这个领域注入了新的活力。此外,二维材料非线性光学特性的调控方法也在不断创新,如电场调制、波导集成、等离子体增强、光学谐振腔、异质结构构建等。

在实际应用中,这些方法和相应的研究成果为我们提供了宝贵的经验。例如,利用电场调制实现二维材料载流子掺杂,从而有效控制非线性光学信号,是一种极具前景的

技术。复旦大学吴施伟团队通过栅极调谐石墨烯的掺杂水平,发现重掺杂石墨烯中三次谐波和四波混频的响应显著增强,这为未来的全光信号处理带来了新的希望。而利用局域表面等离子体场增强二维材料的非线性光学响应,已在多个实验中得到验证。台湾新竹清华大学 Shangjr Gwo 团队利用等离激元超表面与单层 WS_2 共振耦合,将二次谐波(SHG)增强至约 400 倍;阿尔托大学孙志培团队则通过等离激元耦合在单层 MoS_2 上实现 FWM 最高达 10^3 量级的增强,另以飞秒激光缺陷工程将 THG 与 SHG 分别提升约 50 倍与约 3.3 倍。上述结果表明,经结构共振或缺陷工程后,可大幅放大 TMD 的二阶/三阶非线性效应。

硫族化合物(如 PdSe_2)与钙钛矿量子点(如 CsPbBr_3)构筑的异质结,正是研究非线性光学特性的一个有前景的方向。通过这种方式,不仅能够克服目前二维材料的局限,还能为全光信号处理带来新的突破。

在当今的光通信和光计算领域,电子处理速度的极限逐渐逼近,使得对全光信号处理的需求日益迫切。在全光信号处理的众多技术中,全光脉冲整形和全光调制尤为重要。例如在光计算中,光子被操纵为信息载体,而光子器件的关键之一就是通过另一束光来实现信号光的调制,这为光通信网络系统提供了基础。

不过,要实现真正高效的全光开关,必须依赖非线性光学材料的非线性吸收或克尔非线性效应,其中光子之间的相互作用(如不同波长、偏振等)至关重要。因此,光学材料的非线性光学特性在很大程度上决定了全光开关的性能。就像在寻找“完美的伴侣”一样,我们需要找到具备理想非线性光学性质的材料来满足全光开关的需求。

然而,光通信或计算中的光信号传输系统始终面临着劣化的影响,因此对光脉冲波形的细化至关重要,这个过程通常称为 3R 功能(再放大、再整形、再定时)。就像手机信号在长途传输中需要不断“修复”一样,光信号也需要通过阈值处理来抑制噪声,从而提高信噪比。

虽然在二维材料的非线性光学特性研究上取得了一些进展,但现有材料的局限性依然激励着科学家们寻找性能更优的新型光学材料,尤其是在全光噪声抑制和光脉冲整形方面。这一领域的研究如同“在沙漠中寻找绿洲”,困难重重,却充满希望。为了克服这些挑战,发掘具有强非线性光学响应的新材料体系,以及探索新的非线性光学调控机制,显得尤为重要。

目前,国内外许多研究团队已经在二维非线性光学材料领域进行了大量研究,材料包括石墨烯、黑磷、过渡金属硫族化合物(TMD)、过渡金属碳氮化合物、钙钛矿等。这些研究如同一张复杂的拼图,揭示了二维材料非线性光学特性的多样性和潜力。

例如,电场调制和局域表面等离子体增强已证明是有效调控二维材料非线性光学响应的重要手段。通过调节电场,改变二维材料中的载流子浓度,可实现对其非线性光学信号的控制。此外,局域表面等离子体场的增强效应使得在某些材料中,非线性光学信号的增强倍数可达数百甚至数千,这为实现高效全光开关提供了新的可能性。

当然,所有这些研究和技术手段都有其局限性,例如,电场调制的速度限制仍然是一个挑战,局域等离子体场共振的长弛豫时间也可能延长材料的光学响应时间。因此,如

何平衡各种技术手段的优缺点,以实现最快速、最灵敏的光子器件,是一个值得深入探索的课题。

在这方面,基于异质结的界面调控工程显示出了独特的优势。通过在二维材料之间构建异质结结构,可在不损失二维材料原有超快光学响应的基础上,进一步增强其非线性光学特性。以 PdSe_2 与 CsPbBr_3 量子点构建的范德华异质结为例,通过理论计算与实验相结合,制备出具有大面积、高质量的异质结材料,并系统研究其非线性光学性质。这些研究不仅有助于揭示异质结界面工程调控二维材料非线性光学响应的物理机制,还为全光阈值器的开发和光通信领域的应用提供了新的思路。

总之,研究二维材料及其异质结构的非线性光学响应,对于推动全光信号处理技术的发展具有重要意义。尽管前路艰辛,但科学的探险永无止境。通过不断探索新的材料体系和调控机制,我们有理由相信,全光信号处理的未来将更加光明。

图 3-4 展示了近年来过渡贵金属硫族化合物(Noble-transition-Metal Dichalcogenide, NMD)在光电应用中的研究进展及其多样化的应用前景。该图生动地概括了 NMD 材料从 2015 年至 2025 年在光催化、气体传感、光电探测、超快光子学、压力传感和磁性光电器件等领域的发展过程。NMD 材料凭借其独特的结构和优异的性能,已在多个光电领域中展现出巨大的潜力。但异质结界面工程在调控二维材料非线性光学响应上仍面临一些挑战和问题。首先,目前一些研究仍然采用二维材料复合物或混合物悬浮液来进行非线性光学表征。虽然这种方法在一定程度上能够反映材料的集体非线性光学效应,但它难以直观地呈现异质结材料的本征非线性光学响应特性。想象一下,你试图在一锅杂烩汤中品尝一种特定食材的味道,结果却发现汤中混合的各种成分使得你根本无法品味到目标食材的独特风味,这就像在悬浮液中研究异质结的挑战一样。此外,悬浮液中的非线性散射和气泡也可能干扰非线性光学信号的获取,这使得研究结果的准确性受到影响。其次,如何大规模制备高质量且具有强非线性光学响应的二维材料,仍然是一个未解决的难题。这就好比在寻找一块理想的钻石,虽然理论上知道它的存在,但在现实中找到并加工它却困难重重。然而,一旦解决了这个问题,将大大推动非线性光学光子器件的开发和大规模集成应用。为应对上述挑战,科学家提出了基于 PdSe_2 和钙钛矿量子点(CsPbBr_3)的异质结材料研究。 PdSe_2 因其优异的非线性光学性能和稳定性,成为一种理想的基础材料。而 CsPbBr_3 量子点以其高效的发光性能和可调节的带隙,为异质结结构提供了进一步提升非线性光学响应的可能性。通过对这一异质结结构的研究,不仅可以深入探讨其非线性吸收特性,还能够揭示界面工程对非线性光学响应的物理调控机制,从而为开发全光阈值器件并推动其在光通信领域的应用铺平道路。图 3-4 展示了 NMD 材料在多领域的成功应用,这为我们进一步探索异质结材料的非线性光学特性提供了信心。特别是在光催化、气体传感和光电探测等领域,NMD 材料的优越性能让人期待它们在全光信号处理中的潜在应用。在接下来的研究中,通过结合先进的制备工艺和表征手段,我们有望攻克当前面临的挑战,进一步推进二维材料及其异质结在非线性光学领域的应用,最终实现从实验室到实际应用的跨越。这一过程就像是打磨一颗珍贵的钻石,虽然充满挑战,但每一刻的努力都将让它更加璀璨。

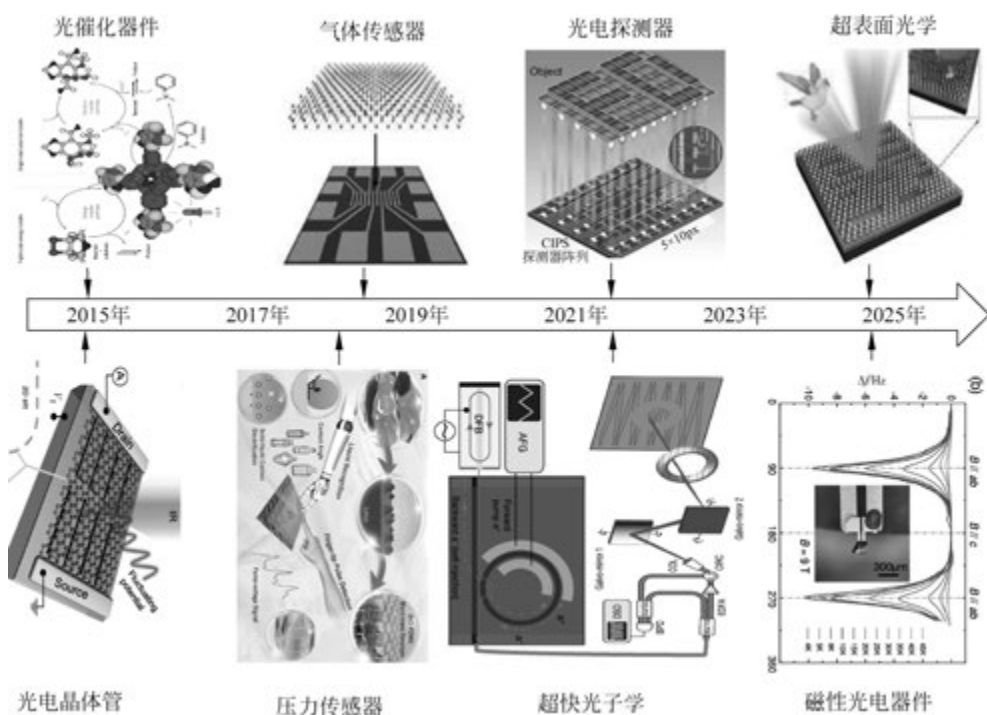


图 3-4 NMD 材料应用发展态势分析

选择空气稳定、带隙可调的二维 PdSe_2 作为异质结的二维基底,并以全无机 CsPbBr_3 量子点作为零维光捕获单元,构建 2D-0D 范德华异质结全光阈值器件。首先采用经优化的化学气相沉积工艺在 SiO_2/Si 基底上生长高质量、厚度可控的 PdSe_2 薄膜,以获得低缺陷密度与良好均匀性。随后在 PdSe_2 上旋涂沉积分散良好的 CsPbBr_3 量子点薄层,并通过温和退火与短链配体置换来增强范德华耦合与电荷传输,同时抑制表面陷阱与离子迁移。

通过原子力显微镜(AFM)、拉曼光谱、X 射线光电子能谱(XPS)与(或)高分辨透射电镜(TEM)对异质结构的形貌、晶体结构与表面化学进行系统表征,确保界面清洁与成分可控;利用稳态吸收与光致发光光谱评估能量转移与缺陷态;采用时间分辨光致发光或飞秒瞬态吸收测量载流子产生、转移动力学与复合通道,进一步识别量子点到 PdSe_2 的电荷或能量转移过程。类似地,0D- CsPbBr_3 /2D-TMD 体系的超快谱学研究为该界面转移机制提供了直接证据。

为了面向全光阈值功能,在自由空间或波导构型下测量功率依赖透过率与反射率,提取饱和强度、调制深度与非线性吸收系数等关键参数,并与未加载量子点的 PdSe_2 薄膜进行对比,以量化量子点耦合带来的非线性增强。已有研究表明, PdSe_2 具备显著的可调带隙与较高损伤阈值,适合作为可饱和吸收与超快光子学器件的活性材料,全光调制与阈值开关可由这种可饱和吸收或光致双稳态实现。

在理论层面,可利用密度泛函理论构建异质界面的能带与态密度,评估可能的能带排列类型(如 II 型对齐)以及界面态、配体与应变对能带边与跃迁矩阵元的影响,并将计

算结果与稳态/瞬态谱学数据进行对应,用以解释阈值行为与非线性响应的起源。

因此,“2D-0D 范德华异质结”用于正确描述 PdSe_2 薄膜与 CsPbBr_3 量子点构成的界面;制备路线采用 CVD 生长 PdSe_2 + 旋涂量子点 + 退火/配体工程;表征手段一般为形貌/结构/化学 + 稳态与瞬态光谱;针对量子点的光电器件工作机理,可运用载流子与能量转移驱动的非线性增强法进行分析。本节针对“全光阈值器件”提出了可行的研究框架,并为后续器件阈值、响应时间与稳定性优化提供了清晰路径。

图 3-5 展示了通过自下而上的方法构建高质量、大面积 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 量子点异质结的研究流程和整体框架。该图直观地展示了 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 异质结的非线性光学性质,最终用于开发全光阈值器件。从图 3-5 可以看出,整个研究过程分为多个关键环节。首先,通过两步化学气相沉积法(CVD)制备出高质量的 PdSe_2 薄膜,这一步骤的成功取决于对生长参数的精确调控,如温度、前驱体比例和气流等。接下来,采用热注入法制备 CsPbBr_3 量子点,并通过高速旋涂结合热退火技术将这些量子点与 PdSe_2 薄膜构筑成异质结构。图 3-5 还显示了研究团队对该异质结构进行了全面的物性表征,包括高分辨透射电镜(TEM)、元素分析(EDS)和光电子能谱(XPS),这些表征技术用于优化异质结构的制备工艺,确保获得高质量、可控的界面结构。使用 Z-Scan 系统对 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 量子点异质结的非线性吸收特性进行了系统表征和分析。通过对比不同激发波长和功率下的非线性吸收响应,得到了最佳的非线性响应波段,并进一步计算了饱和吸收参数。表 3-1 给出了制备基于 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 量子点异质结构的全光阈值器件关键参数。这些研究结果将直接应用于全光阈值器件的开发中。通过对实验数据的对比分析,深入理解异质结构在非线性光学响应中的调控机制,特别是如何利用 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 量子点异质结构来实现全光阈值器件的可调谐性。

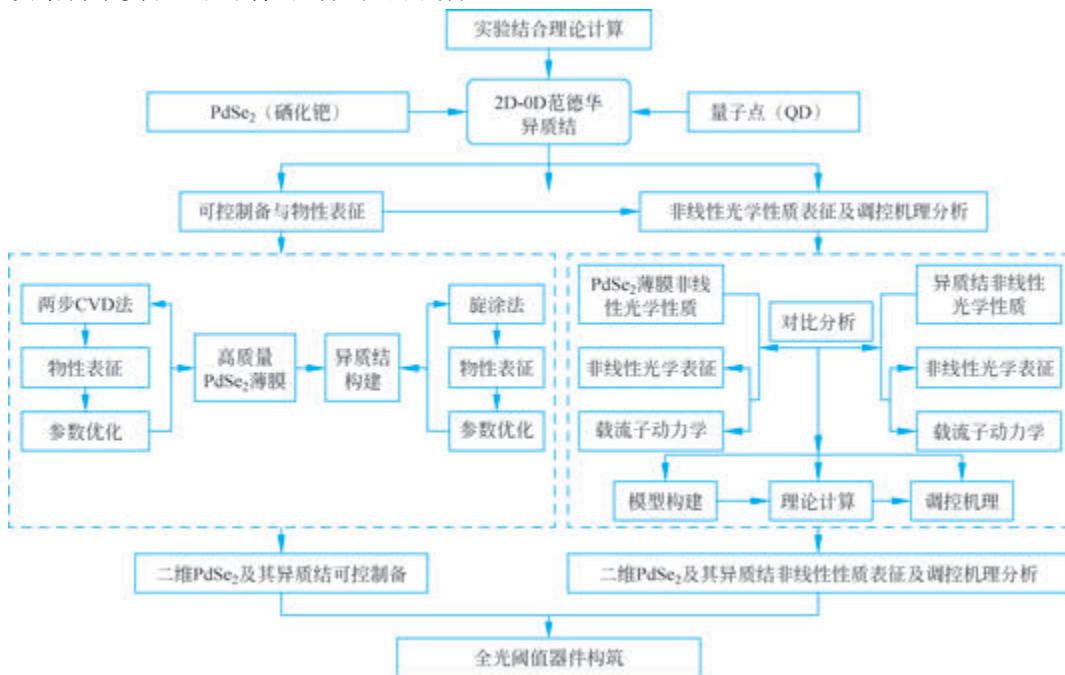


图 3-5 构建基于 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 量子点异质结构的全光阈值器件方案架构图

表 3-1 制备基于 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 量子点异质结构的全光阈值器件关键参数

模块	关键参数	典型值或范围	目的与说明
基底处理	O_2 等离子	10~50W, 5~10min	提升表面洁净度与亲水性
CVD 成核	温度/时间	350~420℃, 10~20min	形成 PdSe_x 成核层, 保证均匀覆盖
CVD 生长	温度/时间	500~600℃, 15~40min	促进晶化与层数均匀化
CVD 退火	温度/时间	400~450℃, 10~20min	降低缺陷与应力
载气与流量	Ar 或 Ar/ H_2	50~200sccm(Ar), 0~10sccm(H_2)	控制反应与传质环境
反应压强	管式炉内压	100~1000Pa 或常压	与传质和成核速率相关
Se 源温区	Se 蒸发温度	200~260℃	提供足够 Se 通量, 抑制空位
量子点分散	溶剂/浓度	己烷或辛烷, 5~15mg/mL	获得均匀薄层
旋涂程序	第一步	1000~1500rpm, 10~15s	铺展与润湿
旋涂程序	第二步	2500~3500rpm, 2~4s	致密成膜与厚度控制
预退火	温度/时间	80~120℃, 5~10min	去溶剂与稳定配位
配体置换	溶液	BABr 或 OABr 于异丙醇, 5~20mg/mL	缩短配体, 提升电输运
配体置换	工艺	滴涂或浸渍 5~20s, IPA 与己烷各一次冲洗	去除长链配体与多余盐
协同补卤	盐类	2~10mM ZnBr_2 或 PbBr_2 (可选)	修复卤素空位, 提高稳定性
二次烘干	温度/时间	80~100℃, 3~5min	固化置换层并稳定界面
电极金属	结构	Ti/Au 5/50nm 或 Cr/Au 3/50nm	低接触电阻与稳定性
非线性测试	激光脉宽/重复率	100fs~10ps, 8MHz 或 1kHz	适配超快动力学测试
Z-scan	光斑半径/能量密度	10~100 μm , 小于损伤阈值	提取 β 、 I_{sat} 与调制深度
环境稳定	封装	环氧与玻璃盖板或原位 N_2	抑制水氧对量子点的影响

为了实现 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 量子点异质结构在全光阈值器件中的可调谐性, 需要深入了解该结构的独特非线性光学特性, 以及它们如何通过界面工程进行调控。这种调控能力不仅为光通信领域带来了新的可能性, 也揭示了在复杂材料系统中探索新型光子器件的潜力。首先, PdSe_2 作为过渡金属二硫族化合物, 具有优异的非线性光学特性, 尤其是在紫外到近红外波段的饱和吸收性能。结合量子点 (CsPbBr_3) 的高光学性能, 如高光致发光量子产率, 两者构建的异质结构有效提升了非线性光学响应。如图 3-6 所示, 这种异质结不仅能够通过界面工程调整能级排列和载流子动态, 还能够优化光学吸收的波段范围和强度。

对于全光阈值器件, 材料的非线性光学特性至关重要。通过调节 PdSe_2 薄膜的厚度和 CsPbBr_3 量子点的尺寸, 可以实现对光学阈值的精确控制。这种可调性来源于界面处的载流子重组和能带调制, 这些因素共同决定了材料在不同光强度下的响应速度和阈值特性。换句话说, 我们可以通过调整材料结构, 使其在不同波长和功率条件下实现最佳的光学阈值, 从而在实际应用中灵活应对多种光通信需求。此外, 研究还表明, 通过优化制备工艺, 如利用磁控溅射结合化学气相沉积法制备 PdSe_2 薄膜, 并结合 PdSe_2 量子点溶液在硅基底上滴铸后的扫描电子显微镜 (SEM) 图像和 Pd、Se 元素的能量色散 X 射线

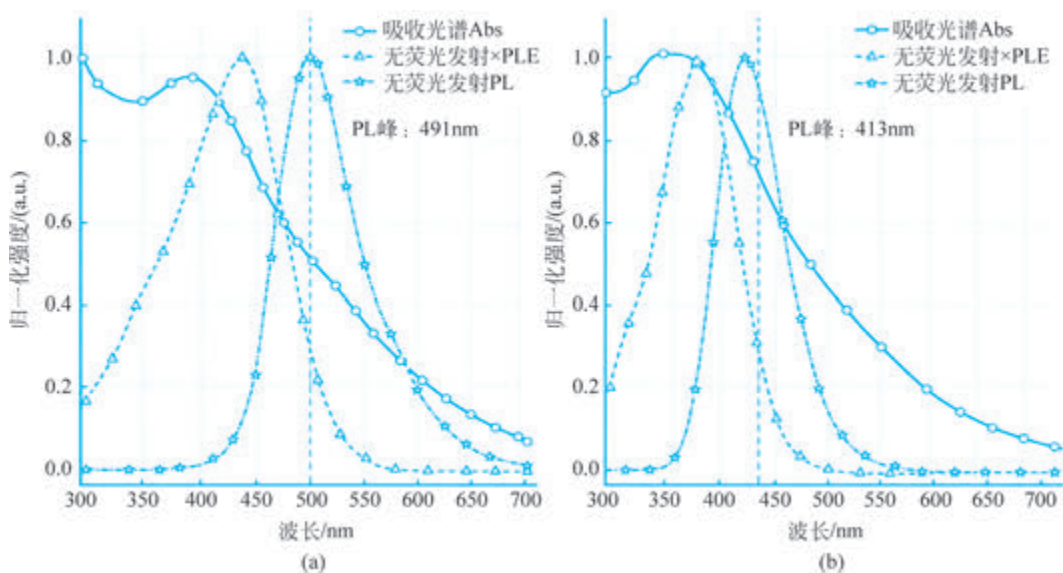


图 3-6 (a) PdS_2 量子点溶液的归一化吸收光谱(Abs)(左边曲线)和(b) PdSe_2 量子点溶液的归一化吸收光谱(左边曲线)。(a)491nm 和(b)413nm 发射波长的光致发光激发(PLE)光谱(中间曲线),这些波长分别在对应的发射光谱(PL)峰值(右边曲线)处被观测到

光谱(EDX)元素分布图等手段对异质结构进行表征,可以获得高质量的界面,研究器件的光学性能调控,如在不同光强、波长下的响应,评估其作为全光阈值器件的性能,从而进一步提升器件的性能,如图 3-7 所示。探讨 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 器件在光学计算、光信号处理等领域的潜在应用。基于这些优化的材料体系和高质量的 $\text{PdSe}_2/\text{CsPbBr}_3$ 异质结构,设计并构筑全光阈值器件。这种全光阈值器件不仅可以在实际通信系统中实现高信噪比的传输,还具备良好的稳定性和可调性。

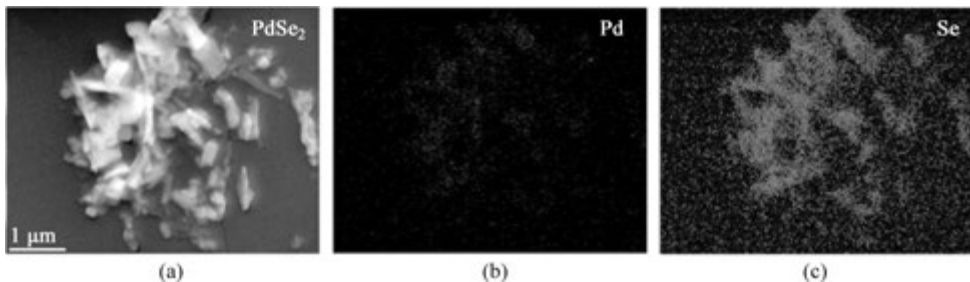


图 3-7 (a) PdSe_2 量子点溶液在硅基底上滴铸后的扫描电子显微镜(SEM)图像;(b)和(c)分别为(a)中 Pd 和 Se 元素的能量色散 X 射线光谱(EDX)元素分布图

这就像在精心烹饪一道复杂的菜肴,每种材料的选择和处理都至关重要,最终使得这道菜不仅美味可口,而且可以根据食客的喜好进行调节,满足不同需求。未来的研究将继续深入探讨如何通过界面工程进一步优化这些异质结构的光学性能,为全光信号处理技术开辟更多的应用场景。

3.2.4 二维材料的无限可能

二维材料正以其独特的物理特性和广泛的应用潜力,成为引领光电子学新潮流的重要力量。石墨烯、二硫化钼和氮化硼等材料各具特色,具有优异的光电性能,尤其在光调制和光通信领域展现出巨大的潜力,共同为未来的电子和光电子技术奠定了基础。通过与人工智能的结合,能够更加精确、高效地设计和优化这些材料,推动它们在实际应用中的发展。图 3-8 展示了二维材料在光调制器中的作用机制。

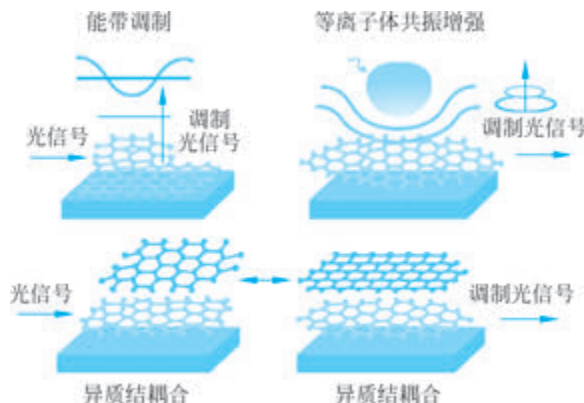


图 3-8 二维材料在光调制器中的作用机制

1. 能带调制

通过外加电场或化学掺杂,可调控二维材料的费米能级位置,从而改变其能带结构。这种能带调制会直接影响载流子的分布和光吸收系数,使入射光信号的强度或相位发生变化,实现对光信号的主动调制。这一机制在石墨烯、过渡金属硫族化合物(TMD)等材料中尤为显著,适合宽带、超高速光调制器的设计。

2. 等离子体共振增强

当二维材料与金属纳米结构(如纳米颗粒、纳米天线)结合时,可以产生局域表面等离子体共振(LSPR)效应。该共振可显著增强局部电磁场强度,提高二维材料对入射光的吸收效率和非线性响应能力,从而在低功率条件下实现高效光调制。这一机制适合小型化、高灵敏度光子器件。

3. 异质结耦合

将不同类型的二维材料(如石墨烯与 MoS_2 、黑磷等)叠层形成范德华异质结,可利用界面处的能带差实现载流子快速分离与复合。异质结结构能够通过层间电荷转移效应调制光吸收和光致发光特性,从而优化光调制器的调制深度和响应速度。同时,异质结还可与硅光子平台集成,提升器件的功能集成度。

石墨烯是最早被发现并深入研究的二维材料。它具有极高的电子迁移率,以及从可见光到近红外波段的宽带光吸收特性,使其成为高效光调制的理想材料。石墨烯在纳秒量级即可实现光信号的快速调制与转换,这一超高速响应能力使其在高速光通信领域展

现出重要且不可替代的应用潜力。

多才多艺的新秀——过渡金属二硫族化合物(TMD),如 MoS_2 和 WS_2 , 凭借其可调节的带隙和优异的光电性能,拥有调制光信号的本领,还能在不同的带隙调整中展示其多样性,已被广泛应用于光电探测器和晶体管等设备中。无论是单层还是多层结构,TMD 都能轻松驾驭,展示出丰富的光学响应,拓宽了光调制的应用范围。

长波光通信的佼佼者——黑磷,因其独特的带隙可调性和在红外区域的优越表现,为长波光通信带来了新的可能。黑磷的调制能力强大到可以让远距离通信也变得高效而稳定,是远距离通信领域的佼佼者。

在这个信息爆炸的时代,我们更青睐速度更快的通信技术,而光调制器就是这场竞赛中的一匹黑马。二维材料因其层状的诱人结构和出众的光电性能,正在重新定义光调制的边界。尽管目前的进展令人兴奋,但光调制的未来还有无限可能。还有许多尚未充分探索的技术如磁光和声光调制等,预示着我们只是触碰到了这片知识海洋的表层。正如光的速度一样,未来的发展也许会以我们难以预测的速度迅猛前进。在这个由光驱动的快速发展的领域中,二维材料无疑是其中的佼佼者,以其卓越的性能和灵活的应用,引领着光电技术的未来。

此外,这些二维材料可以与其他材料组合,形成异质结构、等离子体结构,或与硅基、光纤系统集成复合材料。这类复合结构不仅能够显著提高光调制效率,还能拓展光调制器的功能与应用范围。随着新型二维材料的不断发现与合成,光电子学的应用潜力将进一步释放。在磁光调制、声光调制等尚未被充分探索的领域,未来研究有望取得重要突破。二维材料不仅有助于推动高速光通信技术的发展,还可能在构建新一代高性能、低功耗光子学器件方面发挥关键作用。例如,通过与硅基光子集成平台结合,这些材料能够显著提升光电器件的整体性能,并加速下一代光子学技术的进步。

3.3 二维材料制备方法 & AI 驱动下的制备技术优化

二维材料的制备方法多种多样,主要包括机械剥离、化学气相沉积(CVD)、液相剥离、分子束外延(MBE)、溶剂法等。这些方法各有优缺点,适合不同类型的二维材料。结合人工智能技术,可以优化材料的分子结构和制备方案,从而开发出先进的材料制备技术。

3.3.1 二维材料的主要制备方法

1. 机械剥离法

机械剥离法是最早用来制备石墨烯的方法,由 Geim 和 Novoselov 在 2004 年首次使用。这个方法的基本思路是将块状材料(如石墨)通过胶带剥离成单层或少层结构。尽管这种方法制备的二维材料质量高,晶体完整,但其产量低且难以控制层数。

优势: 高质量,晶体结构完整。

缺点: 产量低,难以规模化生产。

2. 化学气相沉积(CVD)

CVD 是目前制备大面积、高质量二维材料(如石墨烯、二硫化钼)的常用方法。在

CVD 过程中,气态前驱物在高温下分解并沉积在基底上,形成单层或少层二维材料。CVD 方法具有较好的可控性,适合工业化生产。

优势:可以制备大面积、高质量的二维材料,适合规模化生产。

缺点:需要高温和特殊的反应条件,成本较高。

3. 液相剥离法

液相剥离法通过将块状材料浸入溶液中,利用超声波或化学方法将其剥离成单层或少层二维材料。该方法适合大规模制备,但制备的二维材料层数难以控制,质量不如 CVD 法高。

优势:制备过程相对简单,适合大规模生产。

缺点:材料质量不如机械剥离法和 CVD 法,层数控制较困难。

4. 分子束外延(MBE)

MBE 是一种精确的薄膜生长技术,通常用于制备高纯度、单晶二维材料。在高真空条件下,材料源被加热蒸发,气态原子束在基底上逐层沉积形成二维材料。MBE 法制备的材料纯度高,厚度控制精确,但成本昂贵,设备复杂。

优势:高纯度,厚度控制精确。

缺点:成本高,设备复杂,适合实验室研究。

5. 溶剂法

溶剂法通过化学溶液反应在溶液中生长二维材料,通常用于制备诸如金属氧化物、硫化物等。溶剂法的优点是可以低成本、大规模制备二维材料,但产物的纯度和晶体质量往往不高。

优势:低成本,适合大规模制备。

缺点:材料纯度和晶体质量较低。

3.3.2 结合 AI 技术优化材料制备

AI 技术,尤其是机器学习与深度学习,为二维材料的设计、合成与表征提供了数据驱动的新范式。其核心思想是用可泛化的统计模型近似“材料成分—结构—工艺—性能”映射关系,并在闭环中不断迭代以逼近目标最优解。面向二维材料的制备与器件集成,AI 技术主要在以下 3 个层面发挥作用。

1. 材料与结构的前向预测与反向设计

前向预测以模型替代昂贵的高通量一性原理计算或长周期实验,快速估算关键物性(如带隙、载流子迁移率、介电常数、非线性系数、热导率等)。在此基础上,反向设计通过约束优化、贝叶斯优化或生成式模型在巨大候选空间中寻优,给出满足性能指标的成分、层数、应变、缺陷与界面构型组合。与二维材料相关的物理先验(层间范德华耦合、量子限域、介电屏蔽、应变-带隙耦合等)可作为软约束融入模型,提高可解释性与可行性。

2. 工艺参数的建模、优化与在线控制

针对化学气相沉积(CVD)、分子束外延(MBE)、溶液旋涂/退火与配体置换等流程,

AI 将“工艺条件→中间表征→终态质量”建模为多变量、非线性、噪声显著的映射。实践中常采用以下方法。

1) 代理模型+贝叶斯优化

针对温度、前驱体分压/流量、载气比例、腔室压力、基底类型与处理、旋涂转速/时间、退火曲线与配体化学等变量进行多目标权衡(如单层覆盖率、晶畴尺寸、台阶密度、缺陷密度、器件开关比与一致性)。

2) 主动学习+自适应实验设计

以不确定度为导向优先选择“信息增益最大”的实验点,显著减少“试验—表征—调整”的回合数。

3) 过程监测与闭环控制

利用光学显微/拉曼/原位反射谱或质量谱的深度模型提取中间态特征,实时修正温度与流量,抑制多层岛成核、提高单层均匀性。

3. 高通量表征数据的解析与质量评估

AI 对显微图像、拉曼(Raman)光谱/光致发光(PL)/X 射线衍射(XRD)/AFM 等多模态表征进行自动分割、峰拟合与谱-结构归因,输出层数分布、应变/掺杂/缺陷映射与结晶质量评分。该环节既用于训练代理模型,也用于制程放大时的过程放行与良率统计。

为保证结果可复现与可移植,建议采用标准化数据治理流程:统一单位与元数据模式;区分单层、少层与体相标签;记录设备批次与耗材来源;进行成分/原型聚类后的分层抽样;在留出法之外使用“按化学族或晶体原型分组”的交叉验证以避免数据泄露;提供不确定度估计与置信区间;发布代码、数据与随机种子。

3.4 利用人工智能对二维材料特性进行实例分析

AI 对二维材料性质的分析遵循“数据—表征—建模—验证—部署”的通用路径。与三维材料相比,二维体系更敏感于层数、应变、基底与环境,数据集需显式标注这些变量并纳入特征空间。针对光电子应用,常见目标包括带隙类型与大小、有效质量、介电函数与非线性系数、声子学与热输运参数等。模型层面除传统的随机森林、支持向量回归与梯度提升外,图神经网络(如 CGCNN、MEGNet、ALIGNN、M3GNet 等)在处理结构信息与长程相互作用方面具有优势。对源于交换关联泛函计算(Perdew-Burke-Ernzerhof, PBE)的带隙标签需注意系统性低估,可通过 Δ -学习(混合密度泛函(HSE)/多体微扰理论方法,与 HSE 结合高精度计算带隙小样本校正 PBE)、多保真学习或“直接/间接带隙分类+回归”的两阶段策略降低偏差。

3.4.1 预测二维材料的带隙:方法论深化

1. 数据与特征

数据来源于高通量计算与实验文献时,应明确带隙定义(Kohn-Sham、HSE、GW、光学带隙)、维度设定(单层/双层/体相)与测量环境(温度、基底、应力)。特征工程包括分与价轨道统计(如价电子数、保罗电负性差、Mendeleev 序)、结构尺度特征(晶格常数、

对称性、配位环境、层间距)、局域描述子(SOAP、Voronoi 面心平均)以及二维特有变量(层数、真空层厚度、应变张量、基底介电常数)。若采用图网络,节点(原子)与边(近邻)特征可显式包含价层 d 电子数、磁性标记与键级近似。

2. 训练与验证

除常规训练/测试划分外,建议采用“按化学体系或晶体原型分组”的交叉验证,以评估跨家族泛化能力;报告 MAE、RMSE、 R^2 及不确定度校准指标(如 ECE、CRPS)。为避免物理越界,可引入约束损失(如带隙非负、应变-带隙单调区间)或对预测光学常数执行克拉默-克罗宁一致性检验。

3. 应用与筛选

在满足精度门槛后,模型用于大规模候选材料筛选,并以不确定度驱动的主动学习选择少量“价值最大”的 DFT 或实验验证点,缩短发现周期并降低试错成本。

3.4.2 利用 AI 预测二维二硫化锰(MnS_2)的带隙:问题设定与注意事项

MnS_2 兼具过渡金属 d 电子与可能的磁性,带隙对自旋极化、晶型与层数高度敏感。进行 AI 预测时应注意以下要点。

1. 数据与标签规范化

首先区分不同多晶型与维度:体相常见结构与二维假想/稳定结构(如 1T/2H 拟态、Janus 变体或经表面钝化后的单层)。收集标签时需指明采用的计算方法(PBE、HSE、GW)或实验测量方式(吸收边、光致发光、扫描隧穿谱),并保持同源一致,避免将不同保真度的数据混合为单一目标。若混合不可避免,则采用多保真学习或 Δ -学习进行系统偏差校正。

2. 特征与物理先验

除通用成分与结构特征外,Mn 的价态、晶场分裂、自旋态与磁序(铁磁/反铁磁/无磁)会显著影响带隙。建议在图网络节点中加入自旋通道标记与局域磁矩初猜,或在传统模型中引入代表性描述子(如 d 电子占据、配位数、Mn-S 键长与键角分布)。二维体系还需记录应变与介电环境(基底/封装),以近似屏蔽效应。

3. 模型与不确定度

在数据量有限时,随机森林或核回归仍是稳定基线;若可获取原子坐标,图神经网络通常更优。通过模型集成、蒙特卡洛下采样或深度核高斯过程输出预测区间,并将不确定度用于主动学习与风险评估。

4. 验证与回溯

对 AI 给出的 MnS_2 预测值,应优先与同结构、同功能的 TMD 家族进行同温同压的对比,并用 HSE/GW 小样本与实验光谱[拉曼/光致发光谱(PL)/超紫外光电子能谱(UPS)/STS]交叉验证。若偏差集中出现在特定自旋态或应变区间,优先扩充该子域数据或调整特征以反映相应物理特性。

本节强调建模流程与校验规范,不在未给定统一数据与计算设定的情况下报告具体

数值预测,避免因保真度差异造成的系统性误导。

3.4.3 人工智能算法预测并计算 MnS_2 带隙: 流程与实现建议

1. 数据准备与特征化

构建包含二维材料(含 MnS_2 在内)的带隙数据集,确保统一的计算/实验协议与元数据(结构、层数、应变、基底、温度)。对每个样本,提取成分向量(原子序数、价电子数、电负性统计等)、结构几何量(晶格常数、对称性、配位壳层统计、Mn-S 键长/角分布)、二维特征(层数、真空层厚度、等效应变)与磁性/自旋相关描述子。所有特征进行标准化,并保留流水线记录以保证可复现。

2. 建模与调参与校准

以随机森林回归作为可解释基线,调参维度包括树数、最大深度、最小样本分裂等;并以梯度提升与支持向量回归为对照,若结构坐标充分则引入图神经网络模型。采用分组交叉验证(按化学族或晶体原型分组),同时报告训练—验证—测试三分集的 MAE/RMSE/ R^2 与 95% 置信区间。对回归残差实施误差分解(成分域、结构域、工艺域),并通过温度缩放或等价方法进行不确定度校准,保证预测区间覆盖率接近名义水平。

3. 物理一致性与错误防护

在训练目标中加入“非负带隙”与“应变-带隙合理区间”的软约束;对可能金属性样本先做二分类筛查(半导体/金属),避免将金属性样本强行回归为小正值。对 HSE/GW 小样本进行 Δ -学习修正,输出“校正后带隙”供筛选使用。

4. 主动学习与验证闭环

以预测不确定度与预期改进(expected improvement)为准则,选择下一批 MnS_2 相关结构(不同层数、应变和基底)进入 HSE 计算或实验测量;将新结果回灌训练集,迭代更新模型。实验端建议至少采用吸收光谱与扫描隧穿谱(或 UPS/PL)双通道确认,并记录误差来源(样品不均匀、应力、缺陷态)。

5. 可视化与报告规范

提供“预测值-真值散点图”“残差直方图”“特征重要性/SHAP 贡献”“不确定度-误差可靠性曲线”,并在正文中给出 MnS_2 各构型在不同工况下的预测区间与验证结果。所有图表标注带隙类型与计算/实验方法,确保读者能够溯源比较。

将 AI 嵌入二维材料开发的核心,是以高质量、带物理语义的特征与严格的验证范式支撑可泛化模型;以主动学习与多保真校正提升数据效率与绝对精度;以在线表征与闭环控制实现工艺层面的可复制最优。针对 MnS_2 等含磁性过渡金属的二维体系,务必显式处理自旋与晶场等关键变量,并在报告中区分带隙定义与保真度来源。

6. 具体代码实现(Python 示例)

假设已经有一个数据集 X (特征)和 y (带隙值),可以使用 scikit-learn 库来实现,Python 代码如下:

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score
# 假设 X 为二维材料特征集, y 为对应的带隙值
# X = np.array([...])
# y = np.array([...])
# 分割数据集为训练集和测试集
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)
# 初始化随机森林回归模型
model = RandomForestRegressor(n_estimators=100, max_depth=10, random_state=42)
# 训练模型
model.fit(X_train, y_train)
# 预测测试集的带隙
y_pred = model.predict(X_test)
# 评估模型
mse = mean_squared_error(y_test, y_pred)
r2 = r2_score(y_test, y_pred)
print(f'Mean Squared Error: {mse}')
print(f'R2 Score: {r2}')
# 绘制实际带隙与预测带隙对比图
plt.scatter(y_test, y_pred, color='blue')
plt.plot([min(y_test), max(y_test)], [min(y_test), max(y_test)], color='red', lw=2)
plt.xlabel('Actual Band Gap (eV)')
plt.ylabel('Predicted Band Gap (eV)')
plt.title('Actual vs Predicted Band Gap')
plt.show()

```

7. 对 MnS_2 带隙的具体预测

在完成模型训练后,将二硫化锰的特征输入模型进行预测。例如,假设 MnS_2 的特征向量为 $X_{\text{MnS}_2} = [x_1, x_2, \dots]$,模型可以通过以下 Python 代码预测其带隙:

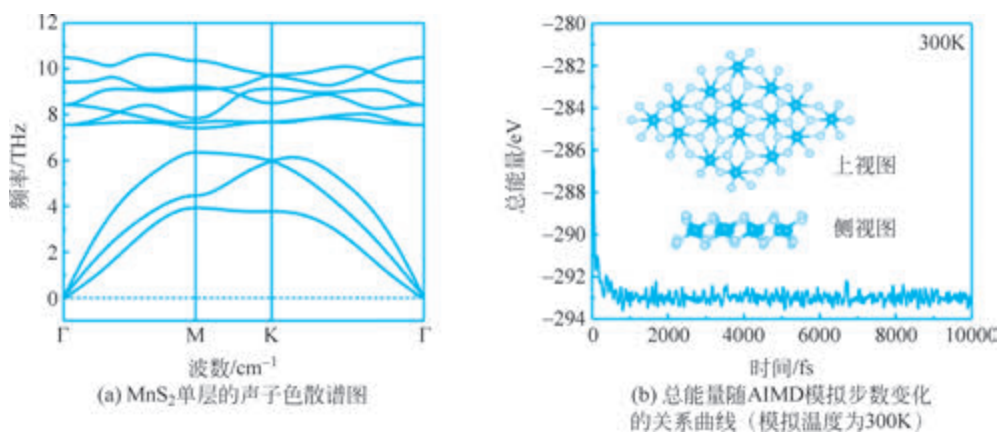
```

# 预测二硫化锰的带隙
X_MnS2 = np.array(...).reshape(1, -1) # 替换为二硫化锰的实际特征向量
predicted_band_gap = model.predict(X_MnS2)
print(f'Predicted Band Gap for  $\text{MnS}_2$ : {predicted_band_gap[0]} eV')

```

图 3-9(a)显示了 MnS_2 单层材料的声子色散关系。可以看到在整个布里渊区中不存在虚频(即无负频),表明该材料在动力学上是稳定的。图 3-9(b)展示了在 300K 下 MnS_2 单层在 AIMD(Ab Initio Molecular Dynamics)模拟中的总能量波动情况,总能量在 -292eV 附近小幅波动,未发生结构崩溃,进一步验证了其热稳定性。上视图与侧视图清晰展示了 MnS_2 单层的晶格排布特征。根据现有的研究, MnS_2 单层材料的带隙已经通过理论计算进行了详细的分析。 MnS_2 显示出铁磁(FM)半金属特性,其在自旋向下通道中为半导体行为,带隙为 1.34eV 。这种半金属性表现出完美的自旋极化,非常适合自旋电子学器件。

为了绘制 MnS_2 的带隙图,使用密度泛函理论(DFT)计算得到电子能带结构数据。

图 3-9 MnS_2 单层的动力学与热稳定性分析

上视图与侧视图展示了经 AIMD 模拟后的原子结构配置

结合已经计算出的带隙值,可以生成一个简单的带隙图,带隙图绘制步骤如下:首先选择能带计算工具,使用常见的 DFT 软件包(如 VASP、Quantum ESPRESSO 等)来计算 MnS_2 的能带结构。接着获取能带数据,通过 DFT 计算得到的能带结构数据通常包括能量相对于动量的分布。对于 MnS_2 ,将主要关注自旋向下通道的带隙。绘制带隙图时,横轴表示布里渊区的动量(k 点路径),纵轴表示电子的能量(eV)。导带最小值和价带最大值的差值,即为带隙。

以下是 Python 代码示例,采用 Matplotlib 绘制能带图。

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
# 示例数据
k_points = np.linspace(0, 1, 100)
conduction_band = k_points**2 + 1.34
valence_band = -k_points**2
plt.plot(k_points, conduction_band, label = 'Conduction Band')
plt.plot(k_points, valence_band, label = 'Valence Band')
plt.axhline(1.34, color = 'red', linestyle = '--', label = 'Band Gap = 1.34 eV')
plt.xlabel('Wave Vector k')
plt.ylabel('Energy (eV)')
plt.title('Band Structure of MnS₂')
plt.legend()
plt.show()
```

该代码生成的图将显示带隙为 1.34eV 的 MnS_2 单层材料的带隙结构。图 3-10(a)展示了 MnS_2 单层的自旋极化能带结构,其中左图代表自旋向上电子,右图代表自旋向下电子。从图 3-10 中可以看到, MnS_2 单层表现出自旋极化行为,并具有不对称的能带结构。自旋向下通道中具有 1.34eV 的带隙,表明该材料可能具有自旋过滤性质。图 3-10(b)展示了总态密度以及各元素不同轨道(Mn-d、S-p)对态密度的贡献。总态密度在费米能级附近具有明显的自旋极化特征,Mn 的 d 轨道为主要贡献源,S 的 p 轨道次之,这表明

其磁性来源主要来自 Mn 原子的 d 轨道电子。通过使用这种方法,可准确地绘制出 MnS_2 的带隙图,并将其用于进一步的材料分析和应用设计。

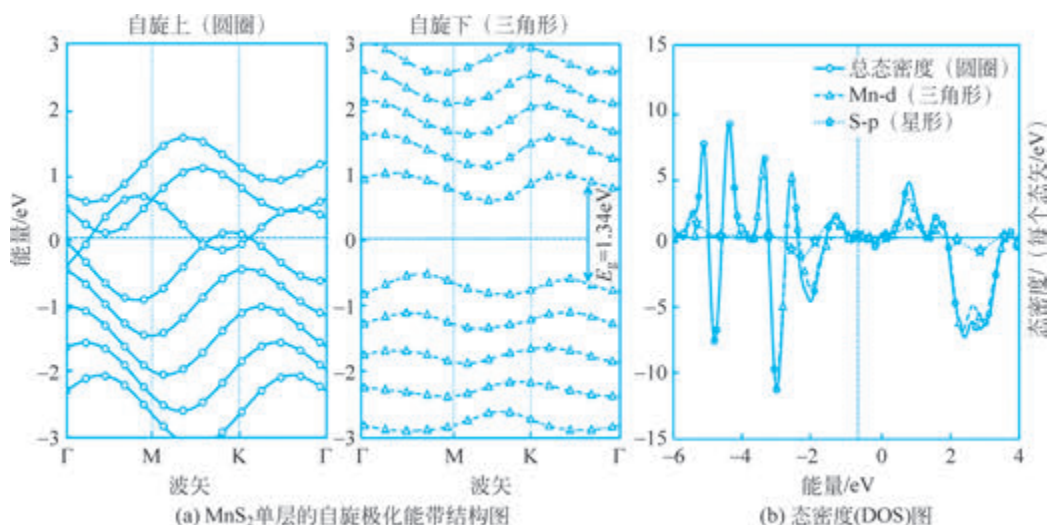


图 3-10 MnS_2 单层的自旋极化电子结构特性

分别展示了总态密度、Mn 的 d 轨道态密度与 S 的 p 轨道态密度。虚线表示费米能级。

通过上述步骤,可以利用 AI 模型成功预测 MnS_2 的带隙,并绘制实际与预测带隙的对比图。此方法展示了机器学习在材料科学中的强大应用潜力,为新材料的快速筛选和优化提供了有效工具。随着数据的不断丰富和模型的不断改进,AI 在材料性能预测中的应用将更加广泛和精准。

此外,人工智能算法在二维光电子材料的研究中展现出巨大潜力,不仅能够高效、准确地预测其热导率、电导率、能带结构等关键物理参数,还能通过深度学习、遗传算法等方法辅助分子结构与晶体构型的设计与优化,从而显著加速材料筛选与性能调控的过程。这一数据驱动策略有效弥补了传统计算方法在高维参数空间中面临的效率瓶颈,推动了新型高性能二维光电材料的智能化设计与应用拓展。

3.5 本章小结

本章系统回顾光电子材料的发展演进路径,重点围绕二维材料在光电子器件中的典型应用展开,涵盖从材料性能调控、器件功能实现到人工智能辅助设计的全过程。随着光电子材料从传统块状半导体向原子级二维材料、可编程超表面及异质集成系统的持续演化,其光电性能、集成能力和应用边界得以显著拓展。

本章首先梳理半导体激光器、光电探测器、LED、太阳能电池、光调制器及柔性光电子器件中典型二维材料的应用案例,如石墨烯、 MoS_2 、黑磷、h-BN 及二维钙钛矿等,揭示其独特的带隙调控、高灵敏度光电响应与优异的机械柔性为现代光电子系统带来的关键性突破。

接着聚焦于人工智能在二维光电子材料设计与优化中的核心作用。通过引入机器学习、深度学习和遗传算法,研究者能够预测带隙、热导率等关键物理属性,实现高通量

材料筛选,辅助分子结构设计,加快材料研发与器件性能优化流程。以 MnS_2 为例,本章展示了从材料热稳定性验证、电子结构计算到基于 AI 的带隙预测与可视化的完整研究路径,突显了 AI 技术在二维光电电子材料研究中的实用性与前沿性。

本章还介绍了二维光电电子材料在非线性光学、全光通信、异质结构构建及柔性可穿戴设备中的多功能集成应用,并提出异质结界面工程与光算融合等方向作为未来发展的重要趋势。通过光电性能与智能算法的深度融合,二维材料正引领新一代低功耗、高集成、高带宽的智能光电电子技术快速前行。

因此,本章呈现了光电电子材料的发展脉络和技术前景,并通过人工智能的引入勾勒出二维材料研究的未来图景,为构建面向通信、感知、计算一体化的新型光电电子系统提供了重要理论支撑和技术路径。

第3章科普 原子级平带工程:二维拓扑光子晶体与强关联光子学

平带意味着色散被极度压平,光子群速度近乎停滞,有效质量接近零,局域态密度与场强同步抬升。微弱泵浦即可触发显著的非线性与强耦合过程,在极化子体系中表现为寿命与相干性的成倍提升。平带与拓扑几何叠加时,受保护的边缘态沿界面与缺陷稳定传播,绕开后向散射与辐射损耗,从而在片上实现近似无耗散的光路由。二维范德华异质结构为此提供原子级的色散调控画布,过渡金属二硫族化物与氮化硼之间的层间错配形成莫尔超晶格,通过精确设定扭角与微应变,可在 $1\sim 4\mu\text{m}$ 波段获得可调平带,面向慢光、低阈值激光、量子光源与拓扑互连奠定材料与器件基础。

从材料工艺、算法设计到制造验证,这一方向遵循看得见、算得快、做得到的闭环路径。“看得见”依托高分辨表征,透射电子显微镜直观揭示莫尔周期、扭角与缺陷织构,角分辨光致发光与近场光谱捕捉平带生成、边缘导模与暗态亮化,并在温度与应变扫描中跟踪色散与极化的演化。“算得快”由人工智能加速的首原理替代提供算力底座,如科普图 3-1 所示,系统自参数生成进入图表示构建,再到图神经网络预测,结合主动学习与首原理纠偏,形成能够自我改进的高通量流程。“做不到”依托原位 CVD 与分子束外延的连线平台,自动完成沉积、退火与扭角校正,配合在线计量与反馈控制,在日级周期内制备平方厘米级样品,并完成批次一致性与良率评估。



科普图 3-1 基于人工智能算法的原子级平带工程架构图

如科普表 3-1 所示,图表示构建阶段将晶体或分子几何转换为图神经网络可用的表示,节点对应原子,边对应最小镜像原则下的邻接关系,采用半径图与周期边界处理,并用距离、方向与高斯基展开注入几何先验。其作用在于在周期体系内稳定构建邻域与尺

度,保持平移与旋转对称性,为后续的物理消息传递提供正确的输入口径。涉及的物理量包括晶格参数与晶胞向量以埃($\text{\AA}$)为单位,原子坐标以埃表示,配位数无量纲,截断半径以埃标定,确保训练与推理的可复现性。

GNN 主干可选用等变的 EGNN 或连续滤波的 SchNet,六层深度、百余维隐藏通道与数十阶径向基足以覆盖 $5\sim 6\text{\AA}$ 的相互作用尺度,在不破坏对称性的前提下学习从几何到性质的映射。针对不同输出形态设置差异化读出与解码。电导率属于图级标量性质,适合以注意力池化或 Set2Set 聚合后在对数域回归,常用单位为 S/m ,实践中能达到 0.98 以上的决定系数与优于 0.08 的对数平均绝对误差。能带曲线属于序列性质,需要图到序列的解码头处理,辅以路径位置编码与可变长掩码,可以将关键峰位误差压至几十毫电子伏的量级并稳定定位带隙。态密度属于分布型输出,通过归一与非负先验约束并以地球搬运距离或相对熵作为训练与评估指标,可在小样本条件下保持物理一致性。多任务头在共享表征的同时分支输出能带、态密度与电导率,相较单任务基线可获得两位数的平均提升,特别有利于数据稀缺的强关联场景。

科普表 3-1 原子级平带工程模块组成及关键技术、作用和性能指标

模 块	关键技术(实现要点)	作 用	物理量与单位	性能指标/验证
图表示构建(PBC)	晶格矩阵 L + 分数坐标 + 最小镜像; 半径图 radius_graph (r_c , pbc=True)	把晶体/分子几何转换成 GNN 可用的图	晶胞基矢或晶格参数等($\text{\AA}$ 或 rad)	在周期边界下构建稳健邻接,提供几何与距离基
GNN 主干	EGNN/SchNet(CFConv, 二选一); 6 层、隐藏维 128、RBF 阶 64、cutoff $r_c = (5\sim 6)\text{\AA}$	保留旋转/平移对称,学习势能/性质映射	形成能(每原子毫电子伏, meV/atom); 晶格常数($\text{\AA}$)	形成能平均绝对误差(MAE) 小于 12meV/atom ; 晶格参数 MAE 小于 $0.01\text{\AA}$; 8/1/1 划分, 5 次重复
读出(图级)	Set2Set/注意力池化(Attn Pool)	生成图级嵌入,标量/向量性质	电导率(σ) (S/m ; 训练/评估在对数域)	(σ)的 R^2 大于 0.98(log-scale); log-MAE 小于 0.08
能带序列头	Graph $\rightarrow$ Sequence 解码器(Transformer/RNN); k -路径位置编码; 可变长掩码	预测沿高对称路径的能带序列	能带($E(k)$) (能带能量/电子伏, eV)	($E(k)$) 均方根误差(RMSE) 小于 50meV (路径均值); 峰位偏差小于 0.02
DOS 头	连续/直方 DOS 回归+归一化约束; EMD/KL 训练/评估	回归态密度分布并保持物理一致性	态密度 DOS (每电子伏态数, states/eV; 按单胞或每原子归一化)	经验模态分解(EMD) 小于 0.05 (归一化区间); 积分守恒误差低于 1%
多任务 MLP	共享干+分支头($(E(k))/\text{DOS}/(\sigma)$); 不确定度加权多任务损失	一种模态多产出,缓解数据稀缺	同上三者: ($E(k)$)/DOS/ (σ)	相对单任务平均提升 12%~18% (RMSE/MAE/ R^2 ; 注明基线)

续表

模 块	关键技术(实现要点)	作 用	物理量与单位	性能指标/验证
主动学习	MC-Dropout/Deep Ensemble 估计预测方差; 不确定度阈值+多样性选择(k -center)	选择高不确定样本重算 DFT, 加速收敛	不确定度(预测方差/置信区间宽度)	迭代至验证误差停降 1%/轮或 95% CI 稳定; 样本效率提升 2 倍
云端自动化	Snakemake+Jinja2+ ASE+custodian; Slurm/PBS 调度; conda/env. yaml/容器; 异常重试与回滚	批量生成 VASP/Quantum ESPRESSO 输入与作业提交, 可复现	—	自动化覆盖率超过 95%; 失败作业自动重试 2 次以上; 日志审计完备

主动学习贯穿全流程,核心不再是以目标值确定样本阈值,而是以模型不确定度进行选择。通过蒙特卡洛 Dropout 或深度集成获得预测方差,将高置信度样本直接送入批量制图,低置信度样本回流首原理数据库补算,模型再训练逐轮降低总体误差,并以样本多样性约束避免分布坍塌。云端自动化保证这一闭环可规模化运行,工作流管理、模板化输入生成与异常重试相结合,容器或可复现实验环境消除运行差异,集群调度与作业审计让高通量任务透明可控。

算力层面采用三层协同加速。算子级引入混合精度、TorchScript 与 CUDA 图,将单个结构的前向时间压到微秒量级。节点级在八卡加速器上以自适应大批量并行,单机吞吐大幅提升。簇级以分布式超参数优化与异构队列调度在一天内完成十万级扭角搜索,实现真正意义上的参数空间覆盖。这一组合使高置信度样本可以一键生成万级扭角与能带图谱,低置信度样本则被自动送回基于自旋轨道耦合的基准计算,形成从数据到模型再到数据的自进化循环。

具体实施沿着清晰的步骤推进。首先进行参数采样,采用拉丁超立方在扭角、层间移位与微应变的高维空间内生成候选。随后构建初始真值集,在近千个结构上进行含自旋轨道耦合的基准计算,得到可靠标签。接着以图神经网络进行预训练,早停策略在不到 50epoch(轮次)内收敛,随后对新的 2000 个结构样本进行不确定度推断,通过数十次随机失活采样估计方差,从而筛选高置信与低置信两类样本。高置信样本进入批量制图与指标评估,低置信样本回流首原理队列触发下一轮主动学习。系统以可视化与接口组件向外提供服务,研究者可在网页端检索目标扭角并下载数据与图像。以双层二硫化钼为例,能带预测的平均误差接近 10.7 meV,与完整首原理流程相比实现约两千倍的加速,24 小时内即可覆盖二维参数空间。

工程化落地同样强调边做边校。生长阶段以可调莫尔周期的化学气相沉积为基础,结合亚纳米级层间配准与在线拉曼和低能电子显微反馈,稳定锁定目标周期与畸变分布。设计阶段以可微仿真与伴随优化牵引深度逆设计,在几何、应变与介电参数空间内快速收敛且符合制造栅格与良率预算。调谐阶段以离子束直写在选定扭角处嵌入位错与空位阵列,在不破坏全局拓扑相的前提下对局域带隙与耦合常数进行细粒度控制。贯穿全流程的统计口径统一至测试集的均值与标准差,数据来源以权威材料数据库为主,

严格去重并防止数据泄露,保证评测的可信度与可比性。

当这些环节形成稳定闭环,平带与拓扑就不再是孤立的物理概念,而是可复用的工程平台。它面向强关联光子学释放新可能,在低功率下实现稳健的非线性调制与频率转换,在拓扑边态与高阶拓扑角点构建强局域的无辐射态,进一步降低阈值与噪声。与成熟的硅光与氮化硅平台深度杂化后,可望在大规模、可编程与低能耗三个维度同时前进,为片上光计算、光互连与量子光学提供坚实的底座。

三层协同加速算子级采用混合精度 TorchScript + CUDA Graph 和 GNN 前向 $3\mu\text{s}$ /结构;节点级采用 $A100 \times 8\text{GPU}$ 并行处理,自适应批大小为 4000 以上;簇级运用 Ray Tune 分布式超参优化 + Slurm 异构调度,实现 24h 内搜索 10^5 组扭角。

具体实现流程为:先是参数采样,得到拉丁超立方(LHS),选取扭角($0.5^\circ \sim 5^\circ$)、层间移位、微应变等高维参数;构建初始 DFT 集,对约 1000 个结构样本跑 PBE+SOC 基准,生成真值。接着是 GNN 预训练,在 PyTorch Geometric 上训练,早停小于 50epoch;再是不确定度推断,对新采样 2000 个结构样本做 MC-Dropout=30 次,筛选 σ ;然后是批量制图,置信度大于 0.9 的 10^4 个结构晶胞直接输出带结构、平带指标;低置信度送回 DFT,触发主动学习循环;再是可视化 & API: Bokeh+Panel 部署 Web API,一键搜索扭角→下载 CSV/PNG;最后输出结果,在双层 MoS_2 体系,平均 $\text{MAE}=10.7\text{meV}$,计算加速比约为 2000:1(与完整 DFT 对比),24 小时可覆盖完整二维参数空间。

参考文献



参考文献