

2020 年度湖南省自然科学奖提名公示

一、项目名称

窄带隙半导体材料的功能调控与计算模拟

二、提名单位意见

窄带隙半导体材料具有优异的宽谱光吸收性能，在光电探测和传感器件领域具有广泛应用。该团队针对窄带隙半导体材料进行了长期探索，开展了系统的研究工作，取得了富有开拓性的成果。

(1) 在二维硒化锗材料中实现了应变调控的直接窄带隙性能，为室温超快宽谱光探测器制备奠定了基础。揭示了二维硒化锗对有毒气体分子的吸附性能，提出了实现气体传感应用的敏感机制。

(2) 首次计算设计了锗烯/碱金属形成的二维半导体异质结、最细碳纳米管/小直径六角氮化硼管构成的纳米管异质结，阐明了其结构稳定性、电荷转移规律和电子输运性质，为实现微型半导体异质结电子器件铺设了理论基石。

(3) 在仅有两个原子层构成的石墨烯/六角氮化硼异质双层结构中证实了金属原子分区掺杂效应，实现了对该类异质半导体双层薄膜电子结构的调制。在不破坏石墨烯结构和电子迁移率的前提下增加了其载流子浓度，为处于厚度极限的纳米电子器件制备奠定了基础。

该项目成果突出，发表了一批高水平论文，科学上取得了重要进展，被国内外同行所公认和广泛引用，产生了显著的学术影响。项目成果具有重要的理论和应用价值，推动了计算科学和半导体技术的发展。

我单位认真审阅了该项目提名书及附件材料，确认全部材料真实有效，并按照要求，我单位已对该项目的基本情况进行了公示，目前无异议。

提名该项目为湖南省自然科学奖二等奖。

三、项目简介

随着近年来半导体行业对芯片专用化和传感器融合等新技术的生产需求，半导体器件技术中的材料微尺寸与功能调控研究成为重要热点。本项目针对窄带隙半导体材料的微结构及其直接带隙光子跃迁，结合红外探测和气体传感技术

应用研究，瞄准器件小型化、低功耗、CMOS 兼容集成的发展趋势，通过宽光谱、室温工作、对材料功能的调控，解决器件在结构小型化、光响应、与硅工艺的兼容性等局限。

本项目以硅烯、锗烯、锂化锗烯、二维硒化锗、六角氮化硼、碳纳米管等典型低维纳米结构的物理性能及器件设计为研究对象，旨在从结构稳定性、能带结构及其受应变调控机制、构成异质结器件的电荷转移、电子输运特性等方面研究出发，建立“窄带隙半导体材料结构设计-能带调控-器件应用”相关理论框架，寻求反映窄带隙半导体体系电子结构调控的机理，从而预测和解释窄带隙半导体材料的新奇物理性能，并指导新型低维光电功能材料的器件构筑和功能实现。

项目首先在二维硒化锗材料中实现了应变调控的直接窄带隙性能，为室温超快宽谱光探测器制备奠定了基础。预测了二维硒化锗对有毒气体分子的吸附性能，揭示了该窄带隙半导体实现气体传感应用的敏感机制。其次计算设计了锗烯/碱金属、最小碳纳米管/小直径六角氮化硼管构成的异质结半导体结构，揭示了上述新型低维半导体异质结构的稳定性、电荷转移规律和电子输运性质，为实现超薄半导体异质结器件铺设了理论基石。此外，首次实现了在仅有两个原子层构成的石墨烯/六角氮化硼异质半导体双层结构分区掺杂效应，实现了点缺陷对该类异质半导体双层薄膜电子结构的调制，为处于厚度极限的纳米电子器件应用奠定了基础。

项目组得到 6 项国家自然科学基金项目、2 项湖南省自然科学基金及 2 项湖南省教育厅重点项目的资助。项目完成后在 *Phys. Chem. Chem. Phys.*、*Appl. Surf. Sci.*、*Mater. & Design*、*Adv. Func. Mater.* 等国际期刊上共发表 SCI 论文 60 余篇，被国内外 SCI 期刊引用 800 余次。其中关于几个原子层 GeSe 方面的系列研究工作奠基了基于二维 GeSe 的超快红外探测器的实验成功制备。8 篇代表性论文被 *Nano Lett.*、*Nanoscale Horizons*、*ACS Applied Electronic Materials*、*Sensors*、*Sensors and Actuators B: Chemical* 等国际 SCI 学术刊物引用 85 次，还被享誉世界的顶尖研究型大学莱斯大学（Rice University）博士学位论文引用，用于基于新兴二维材料的光电子器件制备。

四、客观评价

本项目的研究成果引起了国内外学者的密切关注和积极评价，被国内外同行在 *Nano Lett.*、*Phys. Rev. B*、*Nanoscale Horizons*、*ACS Applied Electronic Materials*、*Sensors*、*Sensors & Actuators: B. Chemical* 等国际 Top 学术刊物引用。锂化锗烯工作在美国物理学会三月会议报告后受到国际同行关注。点缺陷对石墨烯/六角氮化硼异质双层半导体材料调控工作被享誉世界的顶尖研究型大学莱斯大学博士学位论文引用。Au 原子在石墨烯/六角氮化硼异质双层中 h-BN 层掺杂的研究成果被集成电路器件国际会议引述报道。

1. 对科学发现一的评价

德国海德堡大学著名科学家 Peter Hess 在 *Nanoscale Horizons* 期刊(IF=9.095) 的综述文章(*Nanoscale Horiz.* 5, 385, 2020) (代表性引文 1) 中大段引用了我们在代表性工作一中的研究成果，指出我们给出的层间结合能对具有翘曲结构的相互作用起了决定性作用 (*The interlayer binding energies presented above for GeSe suggest that vdW forces are responsible for the interaction between puckered layers*)。中国科学院化学研究所薛丁江研究员在美国应用物理杂志 (*J. Appl. Phys.* 125, 082524, 2019) (代表性引文 2) 上 3 次引用了我们有关 GeSe 的工作，评论我们通过第一性原理计算预测出二维硒化锗中产生直接带隙的方法具有重要意义 (*It is worth looking for methods to generate direct bandgaps in GeSe. Fortunately, the first-principles calculation has indicated that the monolayer and bilayer GeSe have a direct bandgap*)，并在撰写的 *RSC Adv.* 8, 33445, 2018 文章中指出我们工作中有关应变调制 GeSe 能带结构的成果强有力证实了应变作为有力工具对调制材料物理性质起到了重要作用 (*Those studies forcefully demonstrated the important function of strain as a powerful tool to modulate the physical properties of materials*)。中国科学院金属研究所王振华研究员在发表的 *ACS Appl. Electron. Mater.* 1, 2236, 2019 文章中正面引用了我们代表作一在内的有关 GeSe 的 3 篇系列研究工作。指出我们有关几个原子层中 GeSe 能带结构随层数降低出现从间接带隙到直接带隙的转变，使得在可见光范围内光吸收显著增强，为光伏应用创造了契机。

2. 对科学发现二的评价

英国曼彻斯特大学 Aleksander A. Tedstone 和 David J. Lewis、芬兰赫尔辛基大学 Jack R. Brent 在综述文章 “A review of two-dimensional nanomaterials beyond graphene” (*Nanoscience* 4, 108-141, 2017) (代表性引文 5) 中，评论我们代表性工作之三(*Applied Surface Science* 360, 707, 2016)有关碱金属原子吸附在锗烯上

诱导产生 n 型半导体行为的科学论断与学术界达成了共识(*There is a consensus that alkali metals in particular can be strongly adsorbed to the germanene surface and transfer charge across the 2D material to induce n-type semiconducting behaviour*)。波兰居里夫人大学 Mariusz Krawiec 在综述文章“*Functionalization of group-14 two-dimensional materials*” (*J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 233003, 2018) (代表性引文 6) 中评论我们发现的电荷转移是导致锗烯金属化和伴随带隙打开的原因(*Another consequence of the charge transfer from alkalis to a Xene layer is the metalization of Xenes, usually accompanied by the gap opening*)。新加坡学者 Gang Zhang 在纳米科技顶级期刊 *Nano Letters* **16**, 4954, 2016 (代表性引文 7) 中特别指出, 本项目代表性工作之四 *Materials & Design* **95**, 641, 2016 是一类重要的异质结界面问题研究工作 (*It is worth mentioning that in addition to the in-plane heterostructure such as the graphene/h-BN junctions studied here, there exist other possible heterostructures, such as the graphene/h-BN cross-plane configurations and one-dimensional (1D) nanotube junctions.*)。

3. 对科学发现三的评价

我们在石墨烯/六角氮化硼异质双层半导体材料中揭示点缺陷调控其电子性质的规律的研究成果 (*Applied Surface Science* **320**, 502, 2014, 代表性工作五), 被享誉世界的顶尖研究型大学莱斯大学 (Rice University) 博士学位论文引用 (*Gang Shi, Synthesis, characterization and application of novel two-dimensional materials in electronics and photonics, 2015, Doctor of philosophy, Rice University, USA*)。在该博士论文工作中根据我们的模型合成了石墨烯/六角氮化硼异质半导体材料。河南师范大学物理与电子科学学院课题组在传感器顶级期刊 *Sensors and Actuators B: Chemical* **238**, 182, 2017 (影响因子 6.393, 代表性引文 8) 上引用了我们从石墨烯体系到类石墨体系开展金属原子吸附和掺杂研究的 4 篇系列工作, 评价我们的工作成果能被用于具有实际应用的高反应性薄膜 (*Moreover, the previous results found the much strong interaction between carbon vacancies and metal dopants, and the stable metal dopants in graphene is considered to be practically used as highly reactive film*)。评价我们在石墨烯/六角氮化硼异质双层薄膜中 Au 原子分区掺杂的工作 (*Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **49**, 111, 2013, 代表性工作六) 是对石墨烯电子和磁性质的有效“操纵” (*The previous studies have shown that the electronic structures and magnetic*

properties of bilayer graphene could be manipulated by applying an external electronic field, metal modified and supported substrates)。

五、代表作及论文目录

1. Yuliang Mao, Congshen Xu, Jianmei Yuan and Hongquan Zhao, Effect of stacking order and in-plane strain on the electronic properties of bilayer GeSe, Phys. Chem. Chem. Phys., 20, 6929-6935 (2018).
2. Yuliang Mao, Linbo Long, Jianmei Yuan, Jianxin Zhong, Hongquan Zhao, Toxic gases molecules (NH₃, SO₂ and NO₂) adsorption on GeSe monolayer with point defects engineering, Chemical Physics Letters 706, 501-508 (2018).
3. Jianmei Yuan, Chan Tang, Jianxin Zhong, Yuliang Mao, First-principles simulations on the new hybrid phases of germanene with alkali metal atoms coverage, Applied Surface Science 360, 707 (2016).
4. Jianmei Yuan, Yiwei Hu, Jian Liao, Jianxin Zhong, Yuliang Mao, Computational design of smallest nanotube junctions in 0.3 nm diameter, Materials and Design 95, 641 (2016).
5. Jianmei Yuan, Zhe Wei, Yanping Huang, Jianxin Zhong, Yuliang Mao, Point defects engineering in graphene/h-BN bilayer: A first principle study, Applied Surface Science 320, 502 (2014).
6. Yuliang Mao, Zhaoqi Xie, Jianmei Yuan, Shunhui Li, Zhe Wei, Jianxin Zhong, Structure and electronic properties of Au intercalated hexagonal-boron-nitride/Graphene bilayer, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 49, 111 (2013).
7. Gang Guo, Yuliang Mao, Jianxin Zhong, Jianmei Yuan, Hongquan Zhao, Design lithium storage materials by lithium adatoms adsorption at the edges of zigzag silicene nanoribbon: A first principle study, Applied Surface Science 406, 161 (2017).
8. Yuliang Mao, Wenping Hao, Xiaolin Wei, Jianmei Yuan, Jianxin Zhong, Edge-adsorption of potassium adatoms on graphene nanoribbon: A first principle study, Applied Surface Science 280, 698 (2013).

六、主要完成人情况

毛宇亮：第一完成人，副院长，教授。工作单位：湘潭大学，完成单位：湘潭大学。对本项目主要学术贡献：作为本申请项目的负责人，统筹了整个研究计划、方案和实施情况，提出了双原子层硒化锗的堆垛特性和直接带隙产生机制，获得了二维硒化锗优异的可实现应变调控的直接带隙性能。揭示了二维硒化锗可用于对有毒气体分子进行探测。研制了具有快速光响应和近红外探测性能的二维硒化锗场效应晶体管。设计了基于锗烯的二维异质结构半导体、基于最细碳纳米管/六角氮化硼管的一维异质结半导体，为处于厚度极限的纳米电子器件制备奠定了基础。是第 1、2、6、8 代表作的第一作者，是 1、3、4、5、6、8 代表作和论文的通信作者，是 2、7 代表作和论文的共同通讯作者。本人在该项目中的工作量占本人工作量的 80%。

袁健美：第二完成人，教授。工作单位：湘潭大学，完成单位：湘潭大学。对本项目主要学术贡献：作为本申请项目的合作者，参与了整个研究计划、方案和实施情况，发展多贝西小波等计算方法，设计了由锗烯和碱金属原子全饱和和覆盖形成的二维半导体异质结构、由最细碳纳米管和小直径六角氮化硼管构成的一维异质结半导体结构，证实了上述新型低维半导体异质结构的稳定性、电荷转移规律和电子输运性质，为实现纳米传感和超微半导体异质结器件铺设了理论基石。是第 3、4、5 代表作的第一作者，是 2 代表作的共同通讯作者，是 1、6、7、8 代表作的合作者。本人在该项目中的工作量占本人工作量的 80%。

七、主要完成单位情况

本项目的主要完成单位为湘潭大学。对本项目的主要学术贡献表现在以下几个方面：

(1) 负责本项目的立项及研究方案的制定与组织实施，并按相关规定进行了科研过程管理。

(2) 对本项目实施给予了人力、物力、财力、实验条件和工作时间等支持，提供了开展本项目的各项实施条件。

(3) 积极推动本项目开展的国内外学术交流，配合进行组织和协调工作，并支持项目人员参加国内外会议和学术活动。

(4) 组织和推动本项目的计算和应用研究，取得了一系列研究成果，在国

内外产生了重要的影响。8 篇代表性论文均以湘潭大学为第一完成单位。

(5) 积极推动本项目的人才培养，在研究生招生名额、培养环节等方面均给予大力支持，依托项目培养了一批优秀的研究生。

八、完成人合作关系说明

在本项目实施过程中，第一完成人毛宇亮主持完成了国家自然科学基金面上项目“硅烯纳米体系局域电子态的小波基密度泛函研究”(批准号 11374251)、国家自然科学基金青年项目“双层石墨烯量子结构的分区磁性掺杂与电子自旋调控”(批准号 11004166)和国自科国际合作与交流项目“小波基密度泛函方法在纳米体系电子结构计算中的应用”(批准号 11210101011)。第二完成人袁健美参加了第一完成人毛宇亮主持完成的上述国家自然科学基金项目，与第一完成人一起开展了本项目的研究工作，是第 3、4、5 代表作的第一作者，是 2 代表作的共同通讯作者，是其它代表作的合作者。

项目代表性论文 7 的第一作者郭刚，是第一完成人指导的博士生（2013 年 9 月至 2018 年 6 月期间在读）。该文是他博士学位论文的主要内容之一。第一完成人提供了包括选题、方法、实施等方面全过程的指导。在本项目申报中，经郭刚本人同意，不将他列入主要完成人，并出具了知情同意证明。

项目代表性论文 7 的第五作者赵洪泉，同时也是该代表性论文的共同通讯作者，是该文的合作单位中国科学院重庆绿色智能技术研究院研究员。赵洪泉与第一完成人毛宇亮近年来开展了科研合作，也是本项目中代表性论文 1、2 的合作者。经赵洪泉本人同意，不将他列入主要完成人，且本人和所在单位都出具了知情同意证明。