**参与申报“2019年陕西省科学技术奖”项目公示**

**项目名称：**

**二维材料器件输运性质与半导体材料离子注入特性研究**

**完成单位：陕西理工大学、北京大学**

**完成人：潘峰、郭颖、孟豪、徐峰、吕劲、姚淑德**

**一、项目简介：**

此次申报的成果是在陕西省教育厅专项科研计划项目《稀土离子注入ZnO磁光性质变化机理研究》（13JK0635）、陕西省教育厅专项科研计划项目《超导-铁磁多层结构的量子输运性研究》（15JK1132）和国家自然科学基金项目《铁磁、半金属-超导多层结构中长程电荷流和自旋流输运性质研究》（11447112）的资助下完成的，属于物理学基础理论的研究范围。研究论文SCI一区1篇，二区1篇，三区4篇，四区2篇，总SCI他引46次。

采用第一性原理计算了半氢化硅烯、硅烯纳米网、锡烯与金属之间的电子结构，构建硅烯、锡烯场效应管（FETs）器件，研究器件量子输运性质。半氢化硅烯的基态表现为铁磁性半导体，半氢化硅烯场效应管器件电流自旋极化过滤效率通过门压控制可达到100%；硅烯纳米网能隙大小由孔大小和孔间硅链数决定，最高可达到0.68 eV，构建了单门硅烯纳米网场效应管，计算了器件的电流转移曲线，结果明显优于其它高级Si场效应管和碳纳米管器件FETs参数值。锡烯与金属Ir、Pd、Pt 和Ni 接触以后，锡烯变成类似石墨烯的平面结构、半导体能带特征消失，在与金属接触的界面处没有隧穿势垒，形成了良好的欧姆接触。代表论文[1] Scientific Report，2015（**他引19次**）、[2] Physica E，2014（**他引4次**）、[3] 2D Materials，2016（**他引8次**）为本研究内容的主要成果。

研究Fe离子注入ZnO单晶的结构和磁性变化，采用卢瑟福背散射/沟道技术、同步辐射X射线衍射和超导量子干涉仪对Fe离子注入ZnO单晶后，样品的损伤、相结构变化及磁性进行详细的表征，明确了离子注入后样品结构特性，确定了结构与磁性的对应关系及磁性来源。80 KeV Fe离子注入，真空低温退火后，生成金属Fe纳米颗粒，呈现超顺磁性；180 KeV Fe离子注入，真空高温退火后，生成ZnFe2O4纳米颗粒，具有超顺磁性。代表论文[4]Chinese Physics B, 2011（**他引9次**）、[5]物理学报, 2011（**他引5次**）为本研究内容的主要成果。

研究研究超导-铁磁异质结中电荷流和自旋流随非共线铁磁体的磁矩强度、铁磁层厚度、磁矩偏转角、结构对称性变化的物理过程和规律。建立描述超导-铁磁界面两侧自旋相关电子-空穴对关联函数及其量子态演化模型，从而探究超导/铁磁/超导结中若干实验和理论反常现象的根本原因和内在机制。代表论文[6] J. Appl. Phys, 2015（**他引1次**）为本研究内容的主要成果。

基于纠缠轨线研究了连续体系的量子纠缠动力学过程，探讨了不同动力学模式（可积和混沌）下量子纠缠的产生过程和其中的经典和量子对应性关系；解释了为什么经典混沌会使量子纠缠迅速增大；初步探讨了单条量子轨线所携带的物理信息和它们对量子纠缠不同的贡献。研究了受驱双势阱体系的量子隧穿问题，当参数选择合适时此体系的经典动力学过程表现出混沌行为。代表论文[7，8] International Journal of Quantum Chemistry, 2016两篇为本研究内容的主要成果。

**二、提名者及提名意见**

提名者：汉中市科技局

提名意见：随着现代电子产业的迅猛发展以及制备技术的提高，使得单个处理器的尺寸迅速减小。目前硅基半导体晶体管尺寸已经缩短到亚10 nm，由于显著的短沟道效应，其性能提升正趋于其物理极限。二维半导体材料拥有独特的物理性质，有望突破诸多限制。随着石墨烯的研究热潮，硅烯、锡烯成为凝聚态物理研究热点。项目研究硅烯能隙打开、锡烯与金属接触问题，构造场效应管原理器件，计算器件输运性质，研究结果为实际二维材料的器件应用铺平理论道路。离子注入是半导体材料改性的重要手段，项目研究了 Fe离子注入ZnO单晶的结构和磁性变化，建立了磁性和离子注入后结构的对应关系，澄清铁磁性的来源。

该成果在理论上有创新，有重要的学术价值和科学意义。推荐材料齐全、规范，经公示后无异议，无知识产权纠纷，人员排序无争议，符合陕西省科学技术奖提名条件，同意提名。

**三、客观评价**

二维半导体材料硅烯和锡烯拥有独特的物理性质，已成为当今纳米交叉学科的研究热点。离子注入是实现半导体材料改性的重要途径之一。拓展研究这些半导体材料，设计新的结构和器件成为凝聚态物理和纳米材料科学研究的一个重要部分。研究成果得到了多位国内外权威专家、知名学者的积极评价与认可：

**同行引用评价：**

**科学发现点1：二维硅烯、锡烯材料器件量子输运性质。**

1）印度加尔各达大学物理系Suman Chowdhury等在国际著名物理综述期刊《Reports on Progress in Physics》上发表题为《A theoretical review on electronic, magnetic and optical properties of silicene》的论文，引用成果（代表论文1），评价为：“潘峰等研究的单门硅烯纳米网场效应管在门压控制下可实现电流开关比达到5.1×104，考虑到声子效应，室温下电流开关比降至100”（代表引文1）。

2）同济大学Xiao-Fang Ouyang等在《Physical Review B》上发表题为《Fully spin-polarized current in gated bilayer silicene》的论文，**两处引用成果**（代表论文2），评价为：“潘峰等的研究介绍了硅烯产生半金属性的方法”、“相比其他复杂的技术要求，通过门压就能产生100%自旋极化电流”（代表引文2）。Francesca Iacopi在其《2D Materials》专著中的第四章《Elemental Group IV Two-Dimensional Materials Beyond Graphene》中引用成果（代表论文2）。

3）德国的M. Maniraj等在《自然》杂志旗下的《Communications Physics》上发表了题为《A case study for the formation of stanene on a metal surface》论文，引用成果（代表论文3），在实验上能够成功的制备出铝衬底上的二维锡烯材料，证实了郭颖等的理论预测结果。评价为“实验观察到的锡烯能带在交叉点上有不同的色散关系似乎令人惊讶，但是代表论文3中已经报道了锡烯二维材料（拓扑绝缘体）具有类似偏差。” （代表引文3）。

**科学发现点2：Fe离子注入ZnO单晶的结构和磁性变化。**

齐鲁大学Zhenzhen Li等在《Catalysts》上发表题为《Full-Spectrum Photocatalytic Activity of ZnO/CuO/ZnFe2O4 Nanocomposite as a PhotoFenton-Like Catalyst》的论文，引用成果（代表论文4）中的分析方法：“XPS结果中位于711.6 eV的Fe 2p2/3较好的对应ZnFe2O4的Fe 2p2/3。”（代表引文4）。

泉州师范大学Feng Wang等在《Journal of Magnetism and Magnetic Materials》上发表题为《The magnetic properties of FexZn1−xO synthesized via the solid-state reaction route: Experiment and theory》的论文，引用成果（代表论文5），评价为：“可以使用多种方法促进室温下Fe掺杂ZnO铁磁性的生成，列举了代表论文5中的Fe离子注入法。”（代表引文5）。

**科学发现点4：基于纠缠轨线研究连续体系的量子纠缠动力学过程。**

波兰Arkadiusz Kuros等在《Few-Body Systems》上发表题为《Doubly Excited Resonance States of Helium Atom: Complex Entropies》的论文，两处引用成果（代表论文7），评价为：“徐峰等对各种量子复合系统产生浓厚兴趣”、“为了确定共振态2s2 1Se和2p2 1Se的能量及其对应关系以及相应的波函数，我们使用代表论文7中的表达式。”（代表引文7）。

**四、代表性论文**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 论文专著名称 | 刊名 | 作者 | 我校是否第一单位 | 影响因子 | 年卷页码（xx年xx卷xx页） | 发表时间 | 通讯作者 | 第一作者 | 国内作者 | SCI他引次数 | 他引总次数 | 知识产权是否归国内所有 |
| 1 | Silicene Nanomesh | Scientific Reports | Feng Pan, Yangyang Wang, Kaili Jiang, Zeyuan Ni, Jianhua Ma, Jiaxing Zheng, Ruge Quhe, Junjie Shi, Jinbo Yang, Changle Chen, Jing Lu | 否 | 4.0 | 2015年5卷9049 | 2015年3月 | 吕劲 | 潘峰 | 潘峰 | 19 | 19 | 是 |
| 2 | Gate-induced half-metallicity in semihydrogenated silicene | Physica E | Feng Pan, Ruge Quhe, Qi Ge, Jiaxin Zheng, Zeyuan Ni, Yangyang Wang, Zhengxiang Gao, Lu Wang, Jing Lu | 否 | 2.39 | 2014年56卷43 | 2014年1月 | 吕劲 | 潘峰 | 潘峰 | 4 | 4 | 是 |
| 3 | Interfacial properties of stanene-metal contacts | 2D Materials | Ying Guo, Feng Pan, Meng Ye, Yangyang Wang, Yuanyuan Pan, Xiuying Zhang, Jingzhen Li, Han Zhang and Jing Lu | 是 | 9.6 | 2016年3卷35020 | 2016年9月 | 吕劲 | 郭颖 | 郭颖 | 8 | 8 | 是 |
| 4 | Synthesis of ZnFe2O4 nanomagnets by Fe-ion implantation into ZnO and post-annealing | Chinese Physics B | Pan Feng, Guo Ying, Cheng Feng-Feng, Fa Tao, Yao Shu-De | 否 | 1.39 | 2011年35卷127501 | 2011年12月 | 姚淑德 | 潘峰 | 潘峰 | 9 | 9 | 是 |
|  | Fe离子注入ZnO生成超顺磁纳米颗粒 | 物理学报 | 潘峰，丁斌峰，法涛，成枫锋，周生强，姚淑德 | 否 | 0.84 | 2011年60卷108501 | 2011年10月 | 姚淑德 | 潘峰 | 潘峰 | 5 | 5 | 是 |
| 6 | Peculiar long-range supercurrent in superconductor-ferromagnet superconductor junction containing a noncollinear magnetic domain in the ferromagnetic region | JOURNAL OF APPLIED PHYSICS | Hao Meng, Xiuqiang Wu, Yajie Ren | 是 | 2.17 | 2015年117卷023903 | 2015年9月 | 孟豪 | 孟豪 | 孟豪 | 0 | 0 | 是 |
| 7 | Quantum Effect in Entanglement Dynamics | International Journal of Quantum Chemistry | Feng Xu, Lei Zhang, Liyun Jiang, Lifu Bao, Hao Meng. | 是 | 2.23 | 2016年116卷7-12 | 2016年5月 | 徐峰 | 徐峰 | 徐峰 | 1 | 1 | 是 |
| 8 | Quantum tunneling in a periodically driven double well system: Entangled trajectory molecular dynamics method | International Journal of Quantum Chemistry | Feng Xu | 是 | 2.23 | 2016年116卷1057-1063 | 2011年3月 | 徐峰 | 徐峰 | 徐峰 | 0 | 0 | 是 |

**五、主要完成人情况**

1.潘峰：副教授，工作单位，陕西理工大学。项目的总体设计和组织实施。采用第一性原理计算了半氢化硅烯、硅烯纳米网的电子结构，构建了半氢化硅烯自旋过滤器件和硅烯纳米网场效应管，计算了器件的输运性质。代表论文 [2]、[3]为本研究内容的主要成果。

研究Fe离子注入ZnO单晶的结构和磁性变化，建立磁性和结构的对应关系，澄清铁磁性的来源，确定了结构与磁性的对应关系及磁性来源。代表论文[4]、[5]为本研究内容的主要成果。

2.郭颖：副教授，工作单位，陕西理工大学。利用第一性原理计算了考虑自旋轨道耦合效应以后锡烯与体金属（Ag, Au, Cu, Pd, Pt, Ir, Al 和 Ni）接触的界面特性。代表论文[1]为本研究内容的主要成果。

3.孟豪：副教授，工作单位，陕西理工大学。研究超导-铁磁异质结中电荷流和自旋流随非共线铁磁体的磁矩强度、铁磁层厚度、磁矩偏转角、结构对称性变化的物理过程和规律。代表论文[6]为本研究内容的主要成果。

4.徐峰：副教授，工作单位，陕西理工大学。基于纠缠轨线研究了连续体系的量子纠缠动力学过程。详细探讨了不同动力学模式（可积和混沌）下量子纠缠的产生过程和其中的经典和量子对应性关系；解释了为什么经典混沌会使量子纠缠迅速增大。代表论文[7，8]为本研究内容的主要成果。

5.吕劲：副教授，工作单位，北京大学。作为通讯作者与潘峰、郭颖共同完成论文[1]、[2] 、[3]。

6.姚淑德：教授，工作单位，北京大学。作为通讯作者与与潘峰、郭颖共同完成论文[4], 与潘峰共同完成论文[5]。

**六、完成单位：**

陕西理工大学作为项目依托单位在该项目策划与立项中给予了大量的支持与帮助。在项目的实施中能积极解决项目组成员遇到的困难，协调职能部门的关系，提供了开展项目研究的技术、仪器设备和人员条件，保证了项目组成员有较为充足的精力投入和研究学习。学校能积极开展项目进展年度检查，督促项目组按计划开展研究工作，指导项目的扩展与延伸研究，对项目进行了科学、合理的组织与管理，这些都是项目得以顺利结题的重要保证。

北京大学作为项目参与单位在该项目策划与立项中给予了大量的支持与帮助，提供了理论计算资源和实验研究平台。项目参与人吕劲、姚淑德对论文的发表提出了思路和解决方案。

**七、完成人合作关系说明**

1.潘峰：副教授，工作单位，陕西理工大学。项目的总体设计和组织实施。采用第一性原理计算了半氢化硅烯、硅烯纳米网的电子结构，构建了半氢化硅烯自旋过滤器件和硅烯纳米网场效应管，计算了器件的输运性质。代表论文 [1]、[2]为本研究内容的主要成果。

研究Fe离子注入ZnO单晶的结构和磁性变化，建立磁性和结构的对应关系，澄清铁磁性的来源，确定了结构与磁性的对应关系及磁性来源。代表论文[4]、[5]为本研究内容的主要成果。

2.郭颖：副教授，工作单位，陕西理工大学。利用第一性原理计算考虑自旋轨道耦合效应，锡烯与体金属（Ag、Au、Cu、Pd、Pt、Ir、Al和Ni）接触的界面特性。代表论文[3]为本研究内容的主要成果。参与潘峰主持的陕西省教育厅专项科研计划项目《稀土离子注入ZnO磁光性质变化机理研究》（13JK0635），与潘峰共同发表代表论文[3]、[4]。

3.孟豪：副教授，工作单位，陕西理工大学。研究超导-铁磁异质结中电荷流和自旋流随非共线铁磁体的磁矩强度、铁磁层厚度、磁矩偏转角、结构对称性变化的物理过程和规律。代表论文[6]为本研究内容的主要成果。主持完成国家自然科学基金项目《铁磁、半金属-超导多层结构中长程电荷流和自旋流输运性质研究》（11447112）、陕西省教育厅专项科研计划项目《超导-铁磁多层结构的量子输运性研究》（15JK1132）。潘峰参与完成国家自然科学基金项目。

4.徐峰：副教授，工作单位，陕西理工大学。基于纠缠轨线研究了连续体系的量子纠缠动力学过程。详细探讨了不同动力学模式（可积和混沌）下量子纠缠的产生过程和其中的经典和量子对应性关系；解释了为什么经典混沌会使量子纠缠迅速增大。代表论文[7]、[8]为本研究内容的主要成果。孟豪参与发表论文[7]。潘峰、孟豪参与讨论论文的研究内容。

5.吕劲：副教授，工作单位，北京大学。2016-2018年受聘陕西理工大学“汉江学者”特聘教授，作为通讯作者与潘峰、郭颖共同完成论文[1]、[2] 、[3]。

6.姚淑德：教授，工作单位，北京大学。指导陕西省教育厅专项科研计划项目《稀土离子注入ZnO磁光性质变化机理研究》（13JK0635）。作为通讯作者与与潘峰、郭颖共同完成论文[4], 与潘峰共同完成论文[5]。