

项目公示信息（自然科学奖）

一、项目名称：二维功能材料的可控制备、生长机理与物性精准调控研究

二、提名者及提名意见

提名者：陕西省教育厅

本项目围绕二维功能材料的可控制备、生长机理与物性精准调控中的关键科学问题，通过多尺度理论计算与实验验证深度融合，系统揭示了黑磷烯、二硫化钼、六方氮化硼及硅烯等典型二维功能材料的生长动力学机制，并实现了其带隙、电子结构及磁性的精准调控。具体成果包括：沿[100]晶向可控制备高质量黑磷烯纳米带；突破尺寸与缺陷瓶颈，实现低缺陷密度单层 MoS_2 晶圆及 $\text{MMoS}_{2(1-x-y)}\text{Se}_{2x}\text{Te}_{2y}$ 四元合金的可控合成；揭示了阐明六方氮化硼在金基底上的晶畴融合动力学机制；首次利用超卤素/氧原子对硅烯进行电子结构裁剪，实现金属-半导体可逆转变。相关研究成果发表于 Nat. Commun.、Adv. Funct. Mater. 等高水平期刊，授权国家发明专利多项，被领域权威专家高度评价，为二维功能材料在纳米电子和神经形态计算等前沿领域的应用提供了重要理论依据和技术支撑。

提名材料齐全、规范，经完成单位公示，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。特

提名为陕西省自然科学二等奖。

三、项目简介

二维功能材料兼具原子厚度与可裁剪的物理化学性质，被视为驱动下一代纳电子、光电子及量子信息技术变革的核心材料体系。然而，其走向产业化仍受制于两大瓶颈：一是原子级精准、晶圆级规模的可控制备技术缺失；二是本征物性缺陷（如零带隙、环境敏感等）导致的性能退化与器件失效。围绕“二维功能材料的可控制备、生长机制与物性精准调控”这一主线，我们构建了“机理揭示—制备突破—性能定制”的全链条研究范式，取得标志性成果如下：

i) 首次阐明层间边界重构是其限制黑磷烯可控制备的关键制约因素，并创新性采用化学气相输运法成功制备出沿[100]晶向生长的单晶黑磷烯纳米带，为突破黑磷烯单晶薄膜制备瓶颈提供了新路径。

ii) 与北京大学刘开辉教授、王恩哥院士合作，制备出低缺陷密度、优异光电性能的单层 MoS_2 晶圆，首次实现 $\text{MoS}_{2(1-x-y)}\text{Se}_{2x}\text{Te}_{2y}$ 四元合金的可控合成，并阐明其成核机制。成果入选“中国半导体十大研究进展候选”。

iii) 深入阐明二维六方氮化硼（hBN）在金基底上的晶畴融合动力学机制，为 hBN 单晶薄膜的大规模、可控制备奠定了重要理论基础。

iv) 创新性利用超卤素和氧原子对硅烯电子结构进行精准调控，实现其从金属态向直接或间接带隙半导体的可控转变，为拓展硅烯在纳米电子器件领域的应用提供了新方案。

四、客观评价

申请人团队围绕二维材料的可控制备、生长机制及性能调控开展系统性研究，在单晶黑磷烯、二维过渡金属硫化物及硅烯等领域取得创新成果，解决了多个关键科学问题，推动了领域发展。研究成果兼具科学价值与产业化潜力，部分成果已实现转化，取得显著社会效益。

国家杰出青年科学基金获得者北京大学物理学院刘开辉教授评价我们的成：研究立足理论探索，并能够在物理、材料、化学交叉领域中进行融合创新，为不同维度纳米材料的生长机制提供了坚实的理论基础和指导。东南大学物理学院首

席教授、国家杰出青年基金获得者王金兰教授评价说我们的研究成果为二维纳米材料的生长机制及可控制备提供理论依据。复旦大学物理学院张远波教授认为研究成果具有很高的水平，在低维纳米材料的第一性原理研究上做出了突出的贡献。

五、代表性论文专著目录（限 8 条）（不超过 8 篇，其中代表作论文不超过 5 篇）

序号	论文专著名称	刊名	作者	年卷页码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表时间 (某年某月某日)	通讯作者 (含共同)	第一作者 (含共同)	国内作者	他引总次数	检索数据库	知识产权是否归国内所有
1	Robust Synthesis of Two-Dimensional Metal Dichalcogenides and Their Alloys by Active Chalcogen Monomer Supply	Nature Communications	Yonggang Zuo, Can Liu, Liping Ding, Ruixi Qiao, Jinpeng Tian, Chang Liu, Qinghe Wang, Guodong Xue, Yilong You, Quanlin Guo, Jinhuan Wang, Ying Fu, Kehai Liu, Xu Zhou, Hao Hong, Muhong Wu, Xiaobo Lu, Rong Yang, Guangyu Zhang, Dapeng Yu, Enge Wang, Xuedong Bai, Feng Ding, Kaihui Liu	2021 年 13 卷 1007 页	2022 年 02 月 23 日	Can Liu, Xuedong Bai, Feng Ding, Kaihui Liu	Yonggang Zuo, Can Liu, Liping Ding	左永刚、刘 灿、丁利苹、乔瑞喜、田金鹏、刘 畅、王庆贺、薛国栋、游奕龙、郭全林、王金焕、付 莹、刘克海、周旭、洪浩、吴慕鸿、卢晓波、杨荣、张广宇、俞大鹏、王恩哥、白雪冬、丁 峰、刘开辉	71	WOS	是
2	Z-scheme Heterojunction Photocatalyst Based on Lanthanum Single-Atom Anchored on Black Phosphorus for Regulating Surface Active Sites, therefore Enhancing Photocatalytic CO ₂ Reduction with ≈ 100% CO Selectivity	Advanced Functional Materials	Qiuye Wang, Liyan Dong, Minze Li, Honglai Lu, Guodong Wei, Yang Qu, Guofeng Wang	2022 年 32 卷 2207330 页	2022 年 08 月 07 日	Guodong Wei, Guofeng Wang	Qiuye Wang	王秋叶 董李艳 李敏泽 吕洪来 尉国栋 曲 阳 王 国凤	54	WOS	是

3	Robust and Low-Power-Consumption Black Phosphorus-Graphene Artificial Synaptic Devices	ACS Applied Materials & Interfaces	Shui Yuan, Bocang Qiu, Koshayeva Amina, Lan Li, Peichen Zhai, Ying Su, Tao Xue, Tao Jiang, Li-Ping Ding, Guodong Wei	2022 年 14 卷 21242 页	2022 年 04 月 18 日	Li-Ping Ding, Guodong Wei	Shui Yuan	袁帅、邱伯仓、李兰、翟配郴、苏莹、薛涛、姜涛、丁利苹、尉国栋	17	WOS	是
4	Micromechanism Study on Electronic and Magnetic Properties of Silicene Regulated by Oxygen	Journal of Materials Science	Li-Ping Ding, Peng Shao, Lin-Tai Yang, Wei-Guo Sun, Fang-Hui Zhang, Cheng Lu	2019 年 35 卷 1803 页	2023 年 08 月 01 日	Peng Shao, Cheng Lu	Li-Ping Ding	丁利苹、邵鹏、杨林泰、孙卫国、张方辉、卢成	4	WOS	是
5	Crystal Structures, Phase Stabilities, Electronic Properties, and Hardness of Yttrium Borides: New Insight from First-Principles Calculations.	Journal of Physical Chemistry Letter	Li-Ping Ding, Yun Hao Tiandong, Peng Shao, Yan Tang, Zi-Li Zhao, Haiyan Lu	2021 年 12 卷 5423 页	2021 年 06 月 01 日	Peng Shao, Haiyan Lu	Li-Ping Ding	丁利苹、田董昀昊、邵鹏、唐妍、赵梓利、卢海燕	16	WOS	是

六、主要完成人情况

姓名	排名	行政职务	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目贡献
丁利苹	1	光电系副主任	副教授	陕西科技大学	陕西科技大学	重要发现 1-4 中，负责项目总体方案制定及实施；研究二硫化钼及二维黑磷烯的生长机理，并进行新型超卤素与硅烯、二硫化钼复合结构的设计、性质计算与分析。 旁证材料：代表性论文 1、3-5，其他附件 1-5 项目结题证书。
邵鹏	2	物理学科副主任	副教授	陕西科技大学	陕西科技大学	重要发现 1-4 中，研究二硫化钼在金基底上的生长机理，并进行氧元素与硅烯复合结构的设计、性质计算与分析。 旁证材料：附件代表性论文 4、5，其他附件 2、3、5 项目结题证书。
尉国栋	3	无	教授	陕西科技大学	陕西科技大学	重要发现 1 中，基于黑磷烯成功开发出的高稳定性、低功耗人工突触器件，成功模拟突触功能与条件反射行为，为黑磷烯在神经形态计算领域的应用奠定了材料与器件基础。。 旁证材料：代表性论文 2、3。
张方辉	4	光电系主任	教授	陕西科技大学	陕西科技大学	重要发现 4 中，对于制定项目总体方案、规划总体思路做出创新性贡献。 旁证材料：代表性论文 4，其他附件 6 获奖证书。

七、主要完成单位情况

单位名称	陕西科技大学				
排 名		法定代表人	黄剑锋	所 在 地	陕西西安
单位性质	高校	传 真	86168070	邮政编码	710021
通讯地址	西安市未央区学府中路 6 号				
联 系 人	李薇	单位电话	86168071	移动电话	
电子邮箱	liwei@sust.edu.cn				

对本项目主要学术贡献：

陕西科技大学作为本项目的主要完成单位，通过相关学院、科技处等单位为成果完成人员在科研工作安排、研究条件、理论计算、实验设备、技术支持和人员配备等方面提供了大力支持，确保了本成果的顺利完成，并在理论研究和实际应用等方面取得了显著成效。其主要贡献包括：

1. 负责项目的统筹管理与进度监督；
2. 开放学校云计算中心及实验设备共享平台，为项目的模拟计算、实验制备与表征提供资源支持；
3. 在人力、物力和财力等方面给予充分保障；
4. 协助关键技术的研发与瓶颈问题的攻关。

八、完成人合作关系说明

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作起始时间	合作完成时间	合作成果	证明材料
1	共同立项	丁利苹/1, 邵鹏/2	2019.01	2021.12	国家自然科学基金、陕西省自然科学基金	其他附件 2、3、5 项目结题证书
2	共同获奖	丁利苹/1, 邵鹏/2, 张方辉/4	2019.01	2023.12	陕西高等学校科学技术研究优秀成果奖	其他附件 6 获奖证书
3	论文合著	丁利苹/1, 尉国栋/3	2022.01	2024.12	Robust And Low Power Consumption Black Phosphorous-Graphene Artificial Synaptic Devices	代表性论文 3
4	论文合著	丁利苹/1, 邵鹏/2, 张方辉/4	2019.01	2019.12	Micromechanism Study on Electronic and Magnetic Properties of Silicene Regulated by Oxygen	代表性论文 4
5						
不限条目						