

# 2025 年度陕西省科学技术奖提名公示

## （自然科学奖）

### 一、项目名称

柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究

### 二、提名者及提名意见

提名者：陕西省教育厅

提名意见：该成果在国家自然科学基金项目、陕西省教育厅项目、国际合作交流项目、以及校企合作项目的资助下，5 篇代表性论文总引 562 次，他引 523 次，其中 1 篇代表性论文入选 ESI 高被引论文。

该成果突破了无机半导体光电子器件柔性化关键技术问题，通过柔性衬底负载过渡金属氧化物，解决了受限于传统金属-非金属间的肖特基接触、制约高品质光电器件应用的现实瓶颈问题。通过界面及结构的有效调控和优化设计，建立了结构优化设计准则，揭示了工艺-结构-性能的关联性；借助能带结构、态密度泛函及自由能等理论计算，探析了柔性复合结构的本征特性，设计并构筑了异质结及阐明其作用机理；通过原子注入增大异质结电子空穴对与载流子浓度，提高了纳米器件的电化学及光催化性能。该研究成果为新型纳米器件的设计与性能调控，以及纳米器件效率的改善提供了科学依据。完成人在二维纳米材料研究领域科研成果显著，为所在单位及地方政企做出了突出的贡献。

推荐材料齐全、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推荐条件。

提名该项目为陕西省自然科学奖 二 等奖。

### 三、项目简介

#### 1. 研究内容

柔性半导体光电子器件被认为可取代传统无机半导体，并应用于光电子能源领域。本研究成果在国家自然科学基金、省教育厅专项项目的资助下，突破了无机半导体光电子器件柔性化关键技术问题，通过石墨烯柔性衬底负载氧化物，解决了受限于传统金属-非金属间的肖特基接触、制约高品质光电器件应用的现实瓶颈问题。采用磁控溅射技术和水热技术获取ZnO/石

墨烯柔性复合结构，通过界面及结构的有效调控和优化设计，建立了结构优化设计准则，揭示了工艺-结构-性能的关联性；借助能带结构、态密度泛函及自由能等理论计算，探析了ZnO/石墨烯复合结构的本征特性，设计并构筑了ZnO/石墨烯异质结及阐明其作用机理；通过原子注入增大异质结电子空穴对与载流子浓度，提高ZnO/石墨烯纳米器件的电化学及光催化性能。该研究成果为新型纳米器件的设计与性能调控，以及纳米器件效率的改善提供了科学依据。

## 2. 科学发现点与科学价值

**(1) 研发了高性能ZnO/石墨烯纳米器件的关键制备技术，系统研究了器件的微结构和载流子性质、缺陷、表面氧吸附及电化学等特性。**

本成果研制了 ZnO/石墨烯纳米器件，并充分发掘各项技术参数对器件的影响规律。通过调控水热工艺过程实现多级形貌共掺杂型 ZnO，借助“负离子配位多面体生长基元”模型分析了多级形貌 ZnO 的生长习性和演变规律，实现了表界面调控和高稳定性、高质量 ZnO/石墨烯纳米器件的可控制备。借助光致发光、霍尔效应、电化学等手段系统研究了纳米器件的性能。通过构筑异质结及掺杂调制等方式大幅度提高了器件的光电性能，为高性能 ZnO/石墨烯纳米器件的研制及应用奠定实验和理论基础。

**(2) 拓展了ZnO/石墨烯纳米复合材料在催化领域的应用，建立了基于光生电子和空穴对调控进一步提升纳米器件光催化性能的基本原理。**

本成果创新引入金属元素缺陷，对ZnO/石墨烯纳米复合材料进行改性，较大幅度提高了光催化性能，改善了ZnO因光生载流子的快速复合抑制光催化效率的问题。通过注入原子捕获从ZnO/石墨烯价带激发的电子，提高了光生电子和空穴的分离效率，从而提高了光催化效率。深入探究了对有机污染物的光催化降解机理，促进了有机自由基的形成，引发污染物基团受到高氧化性含氧自由基或质子的攻击并转化为相关产物。本研究成果研制的ZnO催化剂可替代贵金属催化剂广泛用于光催化降解有机污染物等领域。

**(3) 基于密度泛函理论证明了ZnO/石墨烯复合结构的形成机制与演变规律，揭示了复合结构的本征特性及界面特征。**

本成果基于第一性原理理论计算，利用VASP、Dmol3 等计算软件，对ZnO/石墨烯的晶体结构及作用机理进行了计算分析。通过计算复合结构改性前后的电子结构信息，揭示了复合结构的形成机制与演变规律，建立了完整的结构-性能-应用体系，为制备高性能ZnO纳米器件提供了理论依据。基于纳米ZnO可控性生长建立了多种反应路径及生长模型，并通过理论分析了形貌可控纳米ZnO的关键调控要素。此理论体系可为研究柔性器件本征结构及优化设计奠定理论基础。

## 3. 同行引用及评价

本成果研发的ZnO/石墨烯纳米器件有望开辟新型纳米光电子器件及产品 and 电子集成技术应用的新浪潮，成果被清华大学李亚栋院士、大连化学物理研究所张涛院士、武汉理工大学麦立强教授、澳大利亚斯威本科技大学Mirabedini教授、帕拉茨基大学的Subodh Kumar教授等国内外知名学者广泛引用并正面评价。第一完成人共计发表SCI学术论文 70 余篇；其中在 5 篇代表性论文被Web of Science总引 562 次，他引 523 次，单篇最高他引达 163 次。其成果被 *Advanced Science*、*Nano Energy*、*Journal of Materials Chemistry A*、*Carbon*、*Journal of Physical Chemistry Letters*、*Nanotechnology*、*Advanced Functional Materials*、*Applied Surface Science*等重要期刊广泛引用评价。第一完成人先后出版学术专著 2 部，授权国家发明专利 2 件。荣获多项省级人才计划等，并获陕西青年科技奖、中国材料研究学会科学技术奖二等奖、陕西高等学校科学技术研究优秀成果二等奖、汉中青年科技奖、汉中市自然科学优秀学术论文奖一等奖、陕西理工大学优秀科技成果奖等奖项。指导的硕士研究生王维、容萍先后获国家奖学金 2 次，并推荐武汉大学、哈尔滨工业大学博士研究生。指导的硕士研究生王维荣获陕西理工大学优秀硕士学位论文、陕西省第三届研究生创新成果展二等奖。第一完成人先后于 2017、2019、2021-2023 年赴清华大学李亚栋院士课题组、新加坡国立大学颜宁教授课题组、清华大学李隼教授课题组做访问学者，在国内外学术会议上作邀请报告 30 余次（包括中国化学会年会、中国材料学会年会等重要会议）。本成果重点解决了ZnO柔性器件的设计与结构、界面效应、性能优化等关乎其应用发展的关键科学问题，为纳米器件的集成化设计和开发应用奠定理论和技术基础。

#### 4. 应用情况

成果完成人聚焦区域优势资源及产业发展需求，基于石墨烯与 ZnO 应用基础研究，积极与地方政府及企业开展政-校-企合作，发挥技术服务和智库作用。与汉中市城固县人民政府、洋县人民政府、城固原五郎园区、洋县国土局、陕西省机械研究院、四川九院、中国安华集团、福建省海洋传感功能材料重点实验室等签订了技术合作协议，完成了石墨矿产资源分析、石墨烯产业发展规划、石墨烯基础应用研究、石墨烯产业园建设等相关工作，针对汉中石墨烯产业研发的功能定位、产业规划、投资与效益、环境保护等制定了指导性方案，推动了区域石墨烯相关产业的技术发展。

### 四、客观评价

#### 1. 重要学术刊物（专著）的引用评价

本成果 5 篇代表性论文被 Web of Science 总引 562 次，他引 523 次，单篇最高他引 163 次。

(1) 代表性论文 5 迄今被 Web of Science 他引 163 次，被 *Advance Science*、*Nano Energy*、

*Journal of Materials Chemistry A*、*Carbon*、*Journal of Physical Chemistry Letters*、*Nanotechnology* 等 top 期刊广泛引用评价。大邱庆北科学技术学院 Kim 等发表于 *Nano Energy* [2020, 70: 104497] 的论文提到可借鉴于琦等人的研究成果用于催化反应机理调控。波尔图大学的 Abdelkader 等发表于 *Carbon* [2019, 144: 269] 的论文指出，于琦等人的研究进一步表明了石墨烯基纳米材料在能源领域的有效应用。全南大学的 Lokhande 等发表于 *Journal of Materials Chemistry A* [2019, 7: 17118] 的论文指出可采用我们研究的石墨烯，氧化石墨烯的功能器件应用在气体传感、电子、生物等多个领域。青岛大学李红等发表于 *Nanotechnology* [2018, 29: 435706] 的论文引用我们的研究成果，表明石墨烯具有良好的电子传输性能及高的化学稳定性，作为器件具有广泛的应用前景。斯特拉斯堡大学的 Ihiwakrim 等发表于 *Journal of Physical Chemistry Letters* [2020, 11: 9117] 的论文指出，于琦等成果表明简单绿色化学方法自下而上生产超薄氧化石墨烯纳米薄膜具有巨大的应用潜力。

(2) **代表性论文 4** 迄今被 Web of Science 他引 136 次，被 *Advanced Functional Materials*、*Journal of Materials Chemistry A*、*Applied Surface Science*、等重要期刊广泛引用评价。大连化学物理研究所张涛院士肯定了我们的研究工作，发表于 *Science China Materials* [2020, 63: 889] 的论文中引用到：于琦等对纳米材料在热催化、电催化和光催化等领域发展方向进行了详细的预测与展望，有利于促进催化剂工业实际应用。厦门大学 Gan 等发表于 *Advanced Functional Materials* [2022, 32: 2206750] 的论文引用了我们提出的压电 ZnO 沿 c 轴的优异取向和可控生长模式。苏拉纳科技大学 Arreerat 等发表于 *Journal of Materials Chemistry A* [2018, 6: 12682] 的论文指出，可采用于琦等研究的 ZnO 纳米材料进行缺陷掺杂，B 掺入 ZnO 晶格后生成了更多的反应活性中心，从而增强了光催化效应。奥斯特拉瓦技术大学 Ladislav 等发表于 *Applied Surface Science* [2020, 529: 147098] 的论文提到可采用我们研究的 B 掺杂 ZnO 纳米结构，促进光生成电子-空穴对的分离，有利于提高光催化活性。

(3) **代表性论文 1** 迄今被 Web of Science 他引 93 次，被 *Angewandte Chemie International Edition*、*Advanced Materials*、*Advanced Functional Materials*、*Energy & Environmental Science* 等重要期刊广泛引用评价。大连化学物理研究所张涛院士发表于 *Chinese Journal of Catalysis* [2023, 52: 1] 的论文中指出，于琦等人开展的研究成功实现了通过甲烷非氧化偶联反应制备氢气与高碳烃类化合物。中国科学院化学研究所李玉良院士等人在 *Angewandte Chemie International Edition* [2024, 63: e202406043] 的论文指出，于琦等人的研究进一步表明金属原子催化剂 (ACs) 鉴于其特定的物理化学性质，在金属原子锚定位置的精准调控方面取得重要突破。东北大学王强教授发表于 *Energy & Environmental Science* [2024, 17: 249] 的论文提到于琦等人研究，指出 SACs 由于其原子利用效率达到了最大化，单原子催化剂已被证实是氧还原反应



(ORR) 中最具应用前景的催化材料。华南理工大学申益教授发表于 *Applied Catalysis B-Environment and Energy*[2024, 343: 123576]的论文中指出于琦等人的研究表明较小的金属颗粒具有更大的比表面积, 为 LA 吸附提供了更多的活性位点, 从而增强了 ECH 过程。

(4) 此外, 代表性文论 2、代表性论文 3 (他引 81) 等研究成果, 已被 *Green Chemistry*、*Journal of Physical Chemistry C*、*Nanoscale*、*Small*、*Journal of Materials Chemistry A*、*Nano Research*、*Applied Surface Science* 等 top 期刊广泛引用评价。清华大学李亚栋院士等多次引用本研究工作, 例如发表于 *Small* [2021, 17: 2004500]的论文中指出我们的研究成果得出石墨烯材料由于其低成本、高电导率、可调孔隙率和易于功能化等特点, 可成为催化剂最有效替代品; 发表于 *Nano Research* [2020, 13: 3165]的论文中引用本研究成果, 并指出“于琦等研究的单原子催化剂可作为催化领域的一个新的研究前沿”。弗鲁米嫩塞联邦大学的 Vasconcelos 等发表于 *Green Chemistry* [2022, 24: 2722]的论文指出, 于琦等研究成果表明石墨烯催化剂能克服传统催化方法问题, 在生物质等应用已得到快速发展。天津大学米文博等发表于 *Journal of Materials Chemistry C* [2021, 125: 10983]的论文提到我们研发的 ZnO/石墨烯是一种新兴的柔性器件, 具有较高的机械柔韧性和弹性。香港教育大学何咏基等发表于 *Nanoscale* [2020, 12: 7206]的论文指出, 于琦等研究的 ZnO/石墨烯增强了光吸收效率, 并降低了电荷传输的界面电阻, 此工作提供了使用非贵金属催化剂来提高光催化效率的方法。

## 2. 参加的重要学术会议、访学活动及反响

第一完成人于琦先后于 2017、2018、2019 年分别赴墨西哥、中国香港、法国应邀作国际学术交流报告 6 次, 并受邀在 2023 中国材料大会年会、2023 中国化学会年会、中国化学会第九届全国结构化学学术会议、中国化学会全国二氧化碳资源化利用学术会议等具影响力学术会议上作邀请报告 (Invited) 30 余次。作为主要负责人成功组织了 2023 年国家自然科学基金委“团簇重大研究计划战略规划研讨会”、2023 年“中国化学会第二届能源化学青年论坛”、“新时代理论与计算化学的挑战和机遇研讨会 (国家自然科学基金委理论化学专业委员会)”、2019 年“第四届中国计算催化学术研讨会”等会议。2017、2019、2021-2023 年分别赴清华大学李亚栋院士课题组、新加坡国立大学颜宁教授课题组、清华大学李隽课题组做访问学者。

## 3. 获得的重要奖励

基于本研究成果, 完成人受到国家教育部、陕西省科学技术厅、陕西省科学技术协会、陕西省委教育工委、汉中市科学技术局的认可, 授予第一完成人多项省级人才计划等, 并获得陕西省青年科技奖、中国材料研究学会科学技术奖二等奖、陕西高等学校科学技术研究优秀成果奖、汉中青年科技奖、汉中市自然科学优秀学术论文奖一等奖等奖励。

## 五、代表性论文专著目录

| 序号 | 论文专著名称   | 刊名                               | 作者   | 年卷页<br>码 (xx<br>年 xx<br>卷 xx<br>页) | 发表时<br>间        | 通讯<br>作者 | 第一作<br>者                | 国内<br>作者                  | SCI<br>他引<br>次数 | 他引<br>总次<br>数  | 知识产<br>权是否<br>归国内<br>所有 |
|----|--|----------------------------------|--|------------------------------------|-----------------|----------|-------------------------|---------------------------|-----------------|----------------|-------------------------|
| 1  | Recent Progress of Metal Single-atom Catalysts for Energy Applications   | Nano Energy                      | Qingqing Yang, Yafei Jiang, Hongying Zhuo, Ellen M. Mitchell, Qi Yu* | 2023 年 111 卷 108404 页              | 2023 年 4 月 5 日  | Qi Yu    | Qingqing Yang           | 杨青青; 蒋亚飞; 卓红英; 于琦         | 93              | Web of Science | 是                       |
| 2  | Photocatalytic degradation of methylene blue (MB) with Cu <sub>1</sub> -ZnO single atom catalysts on graphene-coated flexible substrates | Journal of Materials Chemistry A | Ping Rong, Ya-Fei Jiang, Qi Wang, Meng Gu, Xue-Lian Jiang, Qi Yu*    | 2022 年 10 卷 6231-6241 页            | 2022 年 1 月 7 日  | Qi Yu    | Ping Rong, Ya-Fei Jiang | 容萍; 蒋亚飞; 王琪; 谷猛; 姜雪莲; 于琦  | 50              | Web of Science | 是                       |
| 3  | Graphene-supported metal single-atom catalysts: a concise review   | Science China Materials          | Shuai Ren, Qi Yu*, Xiaohu Yu, Ping Rong, Liyun Jiang, Jianchao Jiang | 2020 年 63 卷 903-920 页              | 2020 年 5 月 24 日 | Qi Yu    | Shuai Ren               | 任帅; 于琦; 于小虎; 容萍; 姜立运; 蒋剑超 | 81              | Web of Science | 是                       |

|   |   |                        |                              |                           |                 |                   |           |             |     |                |   |
|---|---|------------------------|------------------------------|---------------------------|-----------------|-------------------|-----------|-------------|-----|----------------|---|
| 4 | Electrical and photocatalytic properties of boron-doped ZnO nanostructure grown on PET-ITO flexible substrates by hydrothermal method | Scientific Reports     | Wei Wang, Taotao Ai*, Qi Yu* | 2017 年 7 卷 42615 页        | 2017 年 2 月 13 日 | Tao tao Ai, Qi Yu | Wei Wang  | 王维; 艾桃桃; 于琦 | 136 | Web of Science | 是 |
| 5 | Preparations, properties and applications of graphene in functional devices: A concise review   | Ceramics International | Shuai Ren, Ping Rong, Qi Yu* | 2018 年 44 卷 11940-11955 页 | 2018 年 5 月 16 日 | Qi Yu             | Shuai Ren | 任帅; 容萍; 于琦  | 163 | Web of Science | 是 |

补充说明（视情填写）：

## 六、主要完成人情况

姓名：于琦

排名：1/5

行政职务：无

技术职称：教授

工作单位：陕西理工大学

完成单位：陕西理工大学

**对本项目贡献：**作为项目负责人，为本项目学术思想提出者。在课题研究过程中，确定总体研究方案和技术路线，组织项目的具体实施工作并进行指导，负责与其他完成人协调、合作，

对项目的理论研究与应用起到决定性的作用。主持完成项目任务来源 5 项，代表性论文 1-5 的通讯作者，专利 1 的第一发明人，专利 2 的主要参与者，对创新点 1、2、3 有贡献。

**姓名：**姜立运

**排名：**2/5

**行政职务：**无

**技术职称：**副教授

**工作单位：**陕西理工大学

**完成单位：**陕西理工大学

**对本项目贡献：**为本项目的主要参与者，负责柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，参与了相关课题的实验与理论计算，代表性论文 3 的主要参与者，专利 2 的第一发明人，专利 1 的主要参与者，对创新点 1、3 有贡献。

**姓名：**任帅

**排名：**3/5

**行政职务：**无

**技术职称：**讲师

**工作单位：**陕西理工大学

**完成单位：**陕西理工大学

**对本项目贡献：**为本项目的主要参与者，负责柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，代表性论文 3、5 的第一作者，专利 2 的主要参与者，对创新点 1、2 有贡献。

**姓名：**于小虎

**排名：**4/5

**行政职务：**无

**技术职称：**教授

**工作单位：**陕西理工大学

**完成单位：**陕西理工大学

**对本项目贡献：**为本项目的主要参与者，负责柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，代表性论文 3 的主要参与者，对创新点 1、2 有贡献。

**姓名：**容萍

**排名：**5/5

**行政职务：**无

**技术职称：**讲师



**工作单位：**陕西理工大学

**完成单位：**陕西理工大学

**对本项目贡献：**为本项目的主要参与者，负责柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，代表性论文 2 的第一作者，代表性论文 3、5 的主要参与者，对创新点 1、2 有贡献。

## 七、主要完成单位情况

**单位名称：**陕西理工大学

**对本项目主要学术贡献：**

作为项目的依托完成单位，主要负责项目的总体规划和组织实施，在项目的实施过程予以项目全面支持、管理和监督等工作，在人力、物力、财力等方面给予了全面的支持，保障项目的良好运行。项目组所在二级学院也在人员、工作安排、研究条件、实验设备、分析检测、场地等方面给予了大力的支持，确保项目按规划顺利完成。依托单位瞄准柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，解决了柔性器件的设计与结构、界面效应、性能优化等关键科学问题，为柔性器件的集成化设计和开发应用奠定理论和技术基础，确保项目按规划顺利完成。

## 八、完成人合作关系说明

**第一完成人于琦：**作为项目负责人，为本项目学术思想提出者。在课题研究过程中，确定总体研究方案和技术路线，组织项目的具体实施工作进行指导，负责与其他完成人协调、合作，对项目的理论研究与应用起到决定性的作用。主持完成项目任务来源 5 项，代表性论文 1-5 的通讯作者，对创新点 1、2、3 有贡献。

**第二完成人姜立运：**为本项目的主要参与者，负责柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，参与了相关课题的实验与理论计算，代表性论文 3 的主要参与者，对创新点 1、3 有贡献。

**第三完成人任帅：**为本项目的主要参与者，负责柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，代表性论文 3、5 的第一作者，对创新点 1、2 有贡献。

**第四完成人于小虎：**为本项目的主要参与者，负责柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，参与了相关课题的理论计算与机理分析，代表性论文 3 的主要参与者，对创新点 1、2 有贡献。

**第五完成人容萍：**为本项目的主要参与者，负责柔性二维纳米器件中构效耦合与光电机理的协同机制研究，代表性论文 2 的第一作者，代表性论文 3、5 的主要参与者，对创新点 1、2 有贡献。