

项目情况简介（省自然科学奖）

1、项目名称 二维功能材料的计算设计、调控及物理机理研究

2、主要完成人 郭三栋；郭小姝

3、提名单位 陕西省教育厅

4、提名意见

二维材料独特的结构特征和物理化学性质赋予其广阔的潜在应用前景，使其成为一类极具吸引力的功能候选材料。在陕西省自然科学基金及教育厅项目等的资助下，本项目聚焦二维功能材料的计算设计、调控及物理机理这一科学问题，取得了一系列原创性研究成果：提出压电反常谷霍尔效应；首次设计 Janus MA_2Z_4 材料，并且通过应变在磁性 Janus MA_2Z_4 中诱发出多种新奇电子态，相关成果被 [2010 年诺贝尔物理学奖得主 K.S. Novoselov 的综述文章引用](#)；理论计算了第一个实验合成的二维 Janus 材料的晶格热导率，并设计出 Janus SnSSe 。研究结果为二维功能电子器件的应用领域奠定坚实的理论基础，具有重要的科学意义和创新价值。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，提名该项目为陕西省自然科学奖二等奖。

5、项目简介

本项目聚焦二维功能材料的计算设计、调控及物理机理这一科学问题，取得了一系列原创性研究成果：

① 在铁谷材料中，提出可以通过压电效应产生电场，从而实现反常谷霍尔效应。把这种现象称为压电反常谷霍尔效应，可以归入压电谷电子学 (Piezovallelectronics)。[Phys. Rev. B 104, 224428 (2021)]

② 首次设计了二维 Janus MA_2Z_4 材料 MSiGeN_4 ($\text{M} = \text{Mo and W}$), 并深入探讨了它们的物理和化学特性。在此基础上, 进一步设计了磁性 Janus MA_2Z_4 材料 VSiGeN_4 , 并通过应变调控手段, 成功实现了多种新奇的电子态, 包括铁谷态、半铁谷金属态以及谷极化量子反常霍尔态。这些态之间的转变机制可以通过能带反转以及 Berry 曲率符号的改变来解释。[J. Mater. Chem. C 9, 2464 (2021); Phys. Rev. B 106, 064416 (2022)]

③ 首次从理论上预言了首个实验合成的二 Janus 材料 MoSSe 的晶格热导率, 并对其相关的物理机制进行了深入分析。在此基础上, 进一步预言了新型二维 Janus 材料 SnSSe , 并对其物理和化学性质进行了系统研究。[Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 7236 (2018); Phys. Chem. Chem. Phys 21, 24620 (2019)]

6、客观评价

经过课题组多年坚持不懈的努力, 并在多项基金项目的大力支持下, 本项目取得了丰硕且高质量的研究成果。相关成果已在 **Physical Review Letters, Physical Review B, Physical Review Materials, Applied Physics Letters, Journal of Materials Chemistry C** 等国际权威期刊上发表高水平研究论文 40 余篇。这些成果中所预言的功能材料、新型电子态以及新物理效应, 受到了国内外众多课题组的高度关注和积极引用, 被 SCI 论文引用 2700 余次。

5 篇代表性论文发表于国际著名期刊 Physical Review B, Journal of Materials Chemistry C, Physical Chemistry Chemical Physics。项目成果得到了国内外同行的广泛关注, **Google 学术**: 总引用 655 次, 单篇最高被引 202 次, 他引总次数 590 余次; **Web of Science 核心合集**: 总引用 605 次, SCI 他引 550 次, 单篇最高 SCI 他引 180 次, 入选 ESI 前 1% 高被引论文 2 篇。引用期刊包括众多国际著名期刊, 包括 Nature Reviews Physics (**诺贝尔物理学奖得主 K.S. Novoselov 综述文章**), Physical Review Letters, Physical Review B, Applied Physics Letters. Nano Letter, Advanced Functional Materials, Nano Today, ACS Nano 等期刊。

这些数据充分体现了项目成果的学术影响力和研究价值, 得到了国内外同行的高度认可。例如: **2010 年诺贝尔物理学奖获得者**

[K. S. Novoselov 课题组 Nat. Rev. Phys. 6, 426 \(2024\)综述论文](#)评价代表作 2：具有破坏的面外反演对称性的 Janus 结构（例如，MoSiGeN₄）是可能存在的。此类结构将具有固有电偶极矩，并且对于催化和光电子应用具有重要意义。理论上，像 MoSiGeN₄（以及许多其他属于 MABZ₄ 家族的材料）这样的材料可以通过在生长过程中不仅添加硅（Si），还添加锗（Ge）来简单合成。[中国科学院院士夏建白领衔完成的 Acta Phys. Sin. 70, 026801\(2021\)综述文章](#)评价代表作 5：近期, Guo 等预测了一种动力学和力学稳定的间接带隙半导体–Janus SnSSe. 研究发现, SnSSe 单层具有高载流子迁移率, 高的吸收系数, 高的功率因子, 强的面内压电极化, [这表明 Janus SnSSe 结构可以制造成具有独特的电子, 光学, 压电和输运特性结合的器件.](#)

7、代表性论文专著目录

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	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	Possible way to achieve anomalous valley Hall effect by piezoelectric effect in a GdCl ₂ monolayer	Physical Review B	San-Dong Guo, Jing-Xin Zhu, Wen-Qi Mu, Bang-Gui Liu	2021, 104: 224428	2021-12-23	San-Dong Guo	San-Dong Guo	郭三栋, 朱靖欣, 穆雯琪, 刘邦贵	59	44	是

2	Predicted septuple-atomic-layer Janus MSiGeN ₄ (M = Mo and W) monolayers with Rashba spin splitting and high electron carrier mobilities	Journal of Materials Chemistry C	San-Dong Guo, Wen-Qi Mu, Yu-Tong Zhu, Ru-Yue Han, Wen-Cai Ren	2021, 9: 2464-2473	2021-01-04	San-Dong Guo	San-Dong Guo	郭三栋, 穆雯琪, 朱毓彤, 韩如玥, 任文才	134	129	是
3	Strain effects on the topological and valley properties of the Janus monolayer VS ₂ GeN ₄	Physical Review B	San-Dong Guo, Wen-Qi Mu, Jia-Hao Wang, Yu-Xuan Yang, Bing Wang, and Yee-Sin Ang	2022, 106: 064416	2022-08-11	San-Dong Guo	San-Dong Guo	郭三栋, 穆雯琪, 王佳豪, 杨雨萱, 王冰	64	49	是
4	Phonon transport in Janus monolayer MoSSe: a first-principles study	Physical Chemistry Chemical Physics	San-Dong Guo	2018, 20: 7236-7242	2018-02-15	San-Dong Guo	San-Dong Guo	郭三栋	188	180	是

5	Predicted Janus SnSSe monolayer: a comprehensive first-principles study	Physical Chemistry Chemical Physics	San-Dong Guo, Xiao-Shu Guo, Ru-Yue Han, Ye Deng	2019, 21: 24620-24628	2019-10-16	San-Dong Guo	San-Dong Guo	郭三栋, 郭小姝, 韩如玥, 邓烨	160	148	是
合 计									605	550	

8、主要完成人情况

排序	完成人	行政职务	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目的贡献
1	郭三栋	无	副教授	西安邮电大学	西安邮电大学	提出压电反常谷霍尔效应；首次设计了二维 Janus MA ₂ Z ₄ 材料 MSiGeN ₄ (M = Mo and W), 并深入探讨了它们的物理和化学特性。在此基础上, 进一步设计了磁性 Janus MA ₂ Z ₄ 材料 VSiGeN ₄ , 并通过应变调控手段, 成功实现了多种新奇的电子态; 首次预言了实验合成的二维 Janus 材料 MoSSe 的晶格热导率, 并拓展至新型二维 Janus 材料 SnSSe。本项研究工作占本人工作量约 80%。对该项目《主

						要发现、发明及创新点》中的所有创新项做出了创造性贡献，是四个主要科学发现的主要完成人。 旁证材料：所有代表作。
2	郭小姝	无	助理工程师	西安邮电大学	西安邮电大学	主要参与二维 Janus 材料 SnSSe 的预言和计算研究，特别是构建了 SnSSe 的晶体结构，证明了它的动力学和力学稳定性，计算了它的压电和光学性质。本项研究工作占本人工作量约 30%。 对该项目《主要发现、发明及创新点》中的第三创新项做出了突出贡献，是该项科学发现的主要完成人。 旁证材料：代表作 5。

9、主要完成单位情况

排序	完成单位	对本项目的贡献
1	西安邮电大学	西安邮电大学为项目的顺利完成并取得优异成绩做出了重要贡献，主要表现为： 1) 组织并完成了项目的策划和实施工作； 2) 为项目的顺利实施提供了人力资源与优质的工作环境与场所； 3) 提供了本项目所需的计算设备、图书资料和数据库等资源。

10、完成人合作关系说明

完成人郭三栋主要负责该项目的所有创新发现，对重要的创新发现均做成突出贡献，主要包括：提出压电反常谷霍尔效应；首次设计了二维 Janus MA_2Z_4 材料 $MSiGeN_4$ ($M = Mo \text{ and } W$)，并深入探讨了它们的物理和化学特性。在此基础上，进一步设计了磁性 Janus

MA₂Z₄ 材料 VSiGeN₄, 并通过应变调控手段, 成功实现了多种新奇的电子态; 首次预言了实验合成的二维 Janus 材料 MoSSe 的晶格热导率, 并拓展至新型二维 Janus 材料 SnSSe。

完成人郭小姝主要对该对预言新型单层 Janus SnSSe 做出了突出贡献, 是该项科学发现的主要完成人。 旁证材料: 代表作 5。