

## 项目情况简介（省自然科学奖）

1、项目名称：半导体异质结的界面结构设计及其气敏特性研究

2、主要完成人：丁继军；陈海霞；屈永锋；傅海威

3、提名单位：陕西省教育厅

4、提名意见

该项目面向环境监测、工业安全和智能家居等领域对有毒有害气体浓度超阈值的实时动态监测需求，开展了半导体新型异质结气敏材料的界面结构设计和性能调控方面的实验与理论研究工作，并取得了系统性创新成果：有针对性地设计制备了贵金属修饰的各种半导体异质结气敏材料并通过引入石墨烯来调控其气敏性能，为实现高灵敏和低检测限的半导体气敏传感器提供了可靠的、有价值的制备参数；另外以 ZIF-8 和 MOFs 双模板衍生合成了性能优异的生物形态半导体异质结材料，开发具有高灵敏度、高选择性、长期稳定性等优异性能的半导体传感器提供了新的思路和方法。最后结合理论模拟研究了各种构型下的半导体异质结的气体吸附特性，为半导体气敏传感器的应用提供了可靠的理论基础。该项目发表相关学术论文 116 篇（其中 SCI 论文 92 篇），授权国家发明专利 10 项，其中 5 篇代表性论文被 Web of science 核心合集他引 190 次，且全被 SCI 他引，该项目创新成果显著，成果材料齐全、规范，无知识产权纠纷，人员排序无争议，符合陕西省自然科学奖提名条件。

提名该项目为陕西省自然科学奖二等奖。

5、项目简介（500 字以内）

气敏传感器是一种能够对周围环境中某种特定有毒有害气体的成分及浓度进行实时准确的检测，并将其转化为电信号输出的传感器，目前已经在工业生产、宇宙开发、海洋探测、环境保护、资源勘探、医药诊断、生物工程、甚至文物保护等领域被广泛应用。在各类材料中，半导体式气敏传感器具有造价低廉、体积便携、寿命稳定、灵敏度高、制备简易、响应快速以及可以检测复杂环境中的气体类别等特点，是目前人类应用最为广泛的气敏传感器之一，也是气敏传感器科研领域的研究热点。然而，本征半导体的性能仍存在着单一化、可调节性差、选择性差、抗湿性低等缺点，因此对于本征半导体性能的优化和改性备受关注。提高半导体纳米材料气敏性能的主要方式有贵金属改性、非金属掺杂、构建异质结和引入碳基纳米材料等。

本项目结合实验和理论方法，构造各种新型半导体异质结并对其界面结构设计，明确提升其气敏性能的物理机制，有效降低工作温度、提高灵敏度、选择性和稳定性等气敏特性。同时，在此基础上，还借助于贵金属修饰、引入生物质模板、金属-有机框架(MOFs)等方

法，为调控半导体式气敏传感器的特性提供了新的可能性。通过理论计算半导体异质结结构模型中的界面电荷输运以及异质结的气体捕获能力，为半导体异质结在气敏传感器中的应用提供了可靠的、有价值的理论基础和材料制备参数。

主要创新性成果包括以下三个方面：

1. 基于半导体材料特点全面考虑并系统性的设计制备了各种贵金属修饰的半导体异质结气敏材料，对乙二醇气体的响应值高达 330.226，检测限低至 1 ppm，通过对比不同界面结构设计对其气敏性能的影响，探讨相应的气敏机制，为实现高灵敏和低检测限的半导体气敏传感器提供了可靠的、有价值的制备参数。

2. 基于生物模板和金属-有机框架(MOFs) 在气体传感器领域显示出的优异性能和巨大的潜力，以 ZIF-8 和 MOFs 双模板衍生合成了基于金属有机骨架的生物形态半导体异质结气敏材料，为开发具有高灵敏度、高选择性、长期稳定性等优异性能的半导体传感器提供了新的思路和方法。

3. 借助密度泛函理论(DFT)构建各种异质结模型，将实验中气体覆盖范围的变化简化为双气体分子吸附在异质结两端的模拟，并对其界面电荷输运进行理论分析，利用电子局域函数研究了异质结的气体捕获能力，验证了半导体异质结优异的气敏特性，为半导体气敏传感器的应用提供了可靠的理论基础。

该项目申请到国家级项目 2 项，省部级项目 4 项，厅局级项目 2 项；发表相关学术论文 116 篇（其中 SCI 论文 92 篇）；出版学术专著 3 部；授权国家发明专利 10 项。此次申报的 5 篇 SCI 学术论文中，目前被 Web of science 核心合集他引 190 次，且全被 SCI 他引，其中 SCI 一区期刊论文 3 篇。项目成果获 2024 年度陕西高等学校科学技术研究优秀成果二等奖。

## 6、客观评价（500 字以内）

该项目发表相关学术论文 116 篇（其中 SCI 论文 92 篇），授权国家发明专利 10 项，5 篇代表性论文目前被 Web of science 核心合集他引 190 次，且全被 SCI 他引，其中 SCI 一区期刊论文 3 篇。项目成果获 2024 年度“陕西高等学校科学技术研究优秀成果二等奖”。

**创新点 1：结合贵金属和石墨烯修饰进行异质结界面设计，有效提高了半导体气体传感器的灵敏度、降低了检测限。**本项目制备的半导体气敏传感器对乙二醇的响应值为 277，其检测限低至 1 ppm。采用贵金属 Au 对其表面进行修饰后，结果发现对乙二醇气体的响应值高达 330.226，选择性与响应恢复等性能提升，相应的气敏机制被探讨。贵金属不但增加传感器吸附氧负离子数量，而且能迅速提升与目标气体的反应速率，有利于提高传感器的响应灵敏度。当合成体系引入石墨烯后，为气体吸附提供更多活性位点。发表在《Sensors and Actuators

B》(2022, 372: 132655)上的论文, 至今被 Web of science 核心合集他引 62 次(其中 SCI 他引 62 次), 并被国际著名期刊 Coordination Chemistry Reviews (2025, 539: 216733. 影响因子 23.5)、ACS sensors (2024, 9: 3604-3615. 影响因子 9.1) 和 Sensors & Actuators: B. Chemical (2023, 394: 134306. 影响因子 8.4) 引用。

**创新点 2: 借助生物模板和金属-有机框架(MOFs)制备了具有高灵敏度、高选择性、长期稳定性等优异性能的生物形态半导体传感器。**本项目以 ZIF-8 和 MOFs 双模板衍生合成了基于金属有机骨架的生物形态半导体异质结传感器, 结果发现其对乙酸气体的响应值远高于其他气体传感器, 对乙酸的响应值为 410, 响应时间为 45 s, 恢复时间为 13 s, 具有良好的重复性和长期稳定性。对于 1 ppm 的乙酸气体, 响应值为 2.614, 进一步表明半导体异质结结构的气体传感器具有低检测极限。发表在《Applied Surface Science》(2020, 508, 145202)上的论文至今被 Web of science 核心合集他引 50 次, 全部为 SCI 他引, 并被国际著名期刊 Nature Communication (2024, 15: 6936. 影响因子 15.7)以及 Trends in analytical chemistry (2020, 132: 116016. 影响因子 12.0) 和 ACS Applied Materials & Interfaces (2022, 14: 35229-35236. 影响因子 8.2) 引用。

**创新点 3:** 借助密度泛函理论(DFT)构建了各种半导体异质结模型,为调控半导体异质结的电子和吸附特性提供了新的可能性,有助于更好地理解半导体气体传感器的机理。本项目利用密度泛函理论研究了能带结构、态密度、电荷分布等特性,通过研究多种气体分子吸附对异质结电子特性的影响,并对其界面电荷输运进行理论分析,利用电子局域函数研究了异质结的气体捕获能力,验证异质结结构优异的电学及气敏特性;然后利用磁控溅射技术制备相应的异质结,对样品的 I-V 特性、电阻率、开启电压、整流比、理想因子等电学特性进行研究。发表在《Applied Surface Science》(2021, 542, 148763.)上的论文至今被 Web of science 核心合集他引 18 次,全部为 SCI 他引,并被国际著名期刊 Interdisciplinary Materials (2024, 3: 189-202. 影响因子 31.6)、Advanced Functional Materials (2022, 32(14): 2110119. 影响因子 19.0)、Chinese Journal of Catalysis (2023, 47: 150-160. 影响因子 17.7) 和 Advanced Science (2023, 10(18): 2301045. 影响因子 14.1)引用。

## 7、代表性论文专著目录

序号	论文专著 名称	刊名	作者	卷 年 页 码 (xx 年xx 卷xx 页)	发表 时间	通讯 作者	第一 作者	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	Highly sensitive ethylene glycol gas sensor based on ZnO/rGO nanosheets	Sensors and Actuators B	Jijun Ding, Hangfei Dai, Haixia Chen, Yanxin Jin, Haiwei Fu, Bing Xiao	2022, 372, 132655	2022年12月01日	Jijun Ding	Jijun Ding	丁继军, 代航飞, 陈海霞, 靳岩鑫, 傅海威, 肖冰	62	Web of science 核心合集	是
2	Adsorption of CO, NO, and NH <sub>3</sub> on ZnO monolayer decorated with noble metal (Ag, Au)	Applied Surface Science	Yongfeng Qu, Jijun Ding, Haiwei Fu, Jianhong Peng, Haixia Chen	2020, 508, 145202	2020年04月01日	Haixia Chen	Yongfeng Qu	屈永锋, 丁继军, 傅海威, 彭建洪, 陈海霞	50	Web of science 核心合集	是
3	Investigation on tunable electronic properties of semiconducting graphene induced by boron and sulfur doping	Applied Surface Science	Yongfeng Qu, Jijun Ding, Haiwei Fu, Haixia Chen, Jianhong Peng	2021, 542, 148763	2021年03月15日	Jijun Ding	Yongfeng Qu	屈永锋, 丁继军, 傅海威, 陈海霞, 彭建洪	18	Web of science 核心合集	是
4	Adsorption behavior of graphene-like ZnO monolayer with oxygen vacancy defects for NO <sub>2</sub> : a DFT study	Superlattices and Microstructures	Haixia Chen, Yongfeng Qu, Jijun Ding, Haiwei Fu	2019, 134, 106223	2019年10月01日	Haixia Chen	Haixia Chen	陈海霞, 屈永锋, 丁继军, 傅海威	37	Web of science 核心合集	是
5	Effect of noble metal atoms on adsorption and electronic properties of graphene toward toxic gas	Computational & Theoretical Chemistry	Yongfeng Qu, Jijun Ding, Haixia Chen, Jianhong Peng	2021, 1196, 113115	2021年02月01日	Jijun Ding	Yongfeng Qu	屈永锋, 丁继军, 陈海霞, 彭建洪	23	Web of science 核心合集	是
6	石墨烯与半导体复合纳米材料的光电特性	中国石化出版社	丁继军	ISBN: 978-7-5114-5586-4	2019年11月01日	丁继军	丁继军	丁继军	1	中国图书引证统计分析数据库	是

7	金属掺杂 ZnO 纳米材料及多层复合结构	中国石化出版社	陈海霞	ISBN: 978-7-5114-5154-5	2018 年 12 月 01 日	陈海霞	陈海霞	陈海霞	2	中国图书引证统计分析数据库	是
8	氧化锌和氧化硅纳米薄膜材料的微结构和光学特性	国防工业出版社	陈海霞, 丁继军	ISBN: 978-7-118-10495-0	2015 年 09 月 01 日	陈海霞	陈海霞	陈海霞	15	中国图书引证统计分析数据库	是

## 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	丁继军	无	教授	西安石油大学	西安石油大学	项目负责人, 主要负责项目的总体运行与实验方法设计。同时基于半导体异质结特点全面考虑并系统性的设计贵金属修饰的半导体异质结材料并研究其气敏性能, 在明确其各种构型下的异质结气敏增强机理的基础上, 有针对性地进行了结构和性能调控研究, 有效改善了气敏传感器的工作温度、选择性和灵敏度等主要特性, 为实现高灵敏和低检测限的半导体气敏传感器提供了可靠的、有价值的制备参数。对应“四、重要科学发现”所列第 1、2、3 项科技创新内容。
2	陈海霞	无	教授	西安石油大学	西安石油大学	在项目中参与研究了各种异质结的界面结构设计及其气敏性能的影响, 优化实验参数, 揭示可重复制备的、具有优异气敏性能的半导体气敏材料制备条件并对其气敏增强机制做出系统全面的分析。参与撰写与修改了与项目相关的所有论文。对应“四、重要科学发现”所列第 1、2、3 项科技创新内容。
3	屈永锋	无	讲师	西安石油大学	西安石油大学	在项目中参与分析了半导体异质结的气敏机制, 为半导体异质材料在气敏传感器中的应用提供了可靠的理论基础。参与撰写与修改了与项目相关的论文。对应“四、重要科学发现”所列第 2、3 项科技创新内容。
4	傅海威	无	二级教授	西安石油大学	西安石油大学	在项目中参与分析了半导体异质结的气敏机制, 为半导体异质材料在气敏传感器中的应用提供了可靠的理论基础。参与修改了与项目相关的论文。对应“四、重要科学发现”所列第 1、2、3 项科技创新内容。

## 9、主要完成单位情况

排序	完成单位	对本项目的贡献
1	西安石油大学	<p>西安石油大学拥有良好的科研平台，包括多种科研仪器和检测设备，便于进行本项目的样品制备和性能测试等工作。校内建有完善的大型仪器共享与测试平台，学校现代分析检测中心顺利通过国家市场监督管理总局检验检测机构资质认定评审，具有良好的材料表征和测试条件，完善的科研平台和先进的仪器设备，有效保障了开展新型微纳气敏材料的制备和表征条件，保证了本项目前期科研工作的顺利开展。</p> <p>西安石油大学高度重视基地建设，项目完成人为陕西省油气井测控技术重点实验室、陕西省油气资源光纤探测工程技术研究中心、中国石油测井公司油藏光纤动态监测研究室等省部级科研基地成员和校级科研创新团队核心成员，这些为本项目的基础物理现象的表征、测试、分析提供了有力的支撑。</p> <p>学校良好的科研氛围和严格的项目管理制度，进一步确保了本项目的顺利开展和完成。</p>

## 10、完成人合作关系说明（200 字以内）

序号	合作方式	合作关系人及排名	合作成果	证明材料
1	论文合著	丁继军 1, 陈海霞 3, 傅海威 5	Highly sensitive ethylene glycol gas sensor based on ZnO/rGO nanosheets	代表性论文 1
2	论文合著	屈永锋 1, 丁继军 2, 傅海威 3, 陈海霞 5	Adsorption of CO, NO, and NH <sub>3</sub> on ZnO monolayer decorated with noble metal (Ag, Au)	代表性论文 2
3	论文合著	屈永锋 1, 丁继军 2, 傅海威 3, 陈海霞 4	Investigation on tunable electronic properties of semiconducting graphene induced by boron and sulfur doping	代表性论文 3
4	论文合著	陈海霞 1, 屈永锋 2, 丁继军 3, 傅海威 4	Adsorption behavior of graphene-like ZnO monolayer with oxygen vacancy defects for NO <sub>2</sub> : a DFT study	代表性论文 4
5	论文合著	屈永锋 1, 丁继军 2, 陈海霞 3	Effect of noble metal atoms on adsorption and electronic properties of graphene toward toxic gas	代表性论文 5
6	专著合著	陈海霞 1, 丁继军 2	氧化锌和氧化硅纳米薄膜材料的微结构和光学特性	代表性专著 8