

2026 年度拟提名陕西省自然科学奖项目公示内容

一、项目名称

二维 III-VIA 族化合物半导体结构稳定性与界面输运调控机制

二、提名者及提名意见

提名者：陕西省知识产权局

提名意见：该项目系统研究了二维 III-VIA 族层状半导体原子尺度结构演化、缺陷-环境相互作用及界面与应变调控载流子输运等基础科学问题。建立了适用于二维半导体的厚度识别、确定性组装和极端环境物性研究方法；首次发现 GaTe 厚度诱导单斜-六方结构相变，揭示表面能竞争主导晶相选择的热力学机制；阐明 GaSe 环境氧化与 InSe 缺陷钝化规律，揭示本征缺陷对材料稳定性及光生载流子动力学的调控机制；发现范德瓦耳斯界面可显著削弱费米能级钉扎，使 InSe 肖特基势垒依赖因子达到 0.55，并首次实验测定其异常低的杨氏模量，揭示近完全应变传递及强应变-电子结构耦合规律。项目研究选题面向国际学术前沿和国家重大需求，科学问题凝练，研究体系完整，研究起点高，理论与方法具有创新性。发表主要论文 20 篇，其中 Advanced Functional Materials 等重要期刊论文 6 篇，Materials Horizons 论文入选 2020 年度最受欢迎论文合集，高被引论文 1 篇；20 篇主要论文 SCI 引用 1177 次，5 篇代表作 SCI 引用 569 次（他引 538 次）。相关成果被 Nature、Chemical Reviews 等国际权威期刊引用和评述，受到国内外同行关注和认可，对二维 III-VIA 族半导体结构稳定性、缺陷电子态及界面输运研究具有重要科学价值和推动作用。项目成果获国家重点研发计划优秀结题，并支撑相关人才培养和学术队伍建设。

项目成果材料齐全、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，特提名该项目为陕西省自然科学奖二等奖。

三、项目简介

该项目成果属于半导体材料与器件物理领域。以 GaTe、GaSe 和 InSe 为代表的二维 III-VIA 族层状半导体具有高载流子迁移率、宽光谱响应和强非线性光学效应，是发展中远红外频率转换、太赫兹探测、高灵敏光电探测等新型光电子技术的重要材料。与传统三维半导体不同，当材料减薄至原子尺度后，表面能、本征空位缺陷及界面效应显著增强，使其晶体结构、电子态及载流子输运对厚度、环境、界面和机械外场高度敏感。揭示原子尺度二维化条件下结构稳定性的演化规律，阐明缺陷、环境与界面对电子态和载流子输运的作用机制，是实现该类材料物性可控及可靠器件应用的关键基础科学问题。该项目在国家自然科学基金、国家重点研发计划等项目支持下，自 2016 年以来围绕上述问题开展系统研究，建立了适用于原子层材料的跨尺度物性研究方法，揭示了维度、缺陷、环境、界面及应变作用下二维 III-VIA 族半导体结构与输运的新规律，主要科学发现为：

1、发现了原子尺度厚度改变二维 III-VIA 族半导体晶相稳定性的热力学规律，建立了相适配的跨尺度物性研究方法。针对原子层材料厚度难确定、结构难操控和环境物性难以连续表征的问题，建立了厚度快速定量识别、高自由度确定性组装及高真空变温原位测试方法，将二维半导体从厚度确定、结构组装到环境物性表征的全过程由数小时缩短至数十分钟。在此基础上，以多晶相 GaTe 为模型，首次发现其随层数降低发生由单斜相向六方相的自发转变，并确定 2 层为晶相转变的关键厚度。结合第一性原理计算和热力学分析，揭示了随厚度降低，表面能贡献不断增强并改变不同晶相的相对稳定性，从而驱动晶体结构自发重构的物理机制。该发现突破了将二维材料厚度主要视为几何尺寸或量子限域参数的传统认识，表明原子尺度厚度本身可以成为决定稳定晶相选择的重要热力学自由度。相关成果被 Chemical Reviews 原图引用和重点讨论，并被 Nature 后续研究用于拓展相关低维体系的普适认识。

2、揭示了缺陷与环境相互作用决定二维 III-VIA 族半导体结构稳定性和光生载流子动力学的机制。系统研究了二维 GaSe 空气暴露过程中形貌、晶体结构、化学组成及光电响应的演变，发现其高活性表面和本征缺陷为环境反应提供活性位点，继而引发晶格损伤和载流子输运退化，阐明了二维 GaSe 环境失稳的微观机制；据此采用六方氮化硼隔绝环境作用，使 GaSe 光探测器连续稳定工作 300 小时以上，较当时国际报道结果延长 30 倍以上。进一步发现 InSe 具有不同于 GaSe 的反常环境效应，空气分子能够钝化本征空位形成的陷阱态，连续改变光生载流子的俘获与释放动力学，实现了响应时间由毫秒至千秒量级、响应度由 mA/W 至 kA/W 量级的调控。相关研究突破了“环境暴露必然导致二维半导体性能劣化”的单一认识，揭示了本征缺陷性质及其电子态在材料环境稳定性和光电响应中的核心作用。相关成果被 Chemical Reviews、Advanced Materials、InfoMat 等国际权威期刊原图引用或重点讨论。

3、揭示了低损伤界面和机械应变调控二维 InSe 电子结构及载流子输运的规律。针对传统金属沉积易造成原子层半导体界面损伤和费米能级钉扎的问题，采

用范德瓦耳斯组装构筑 Au/InSe、Pt/InSe 和石墨/InSe 等低损伤界面，发现肖特基势垒对金属功函数的依赖因子达到 0.55，显著高于传统 Si (0.27) 和 GaAs (0.07) 体系，揭示了低缺陷范德瓦耳斯界面削弱费米能级钉扎、恢复金属功函数对势垒调控作用的界面输运机制。进一步首次实验测定二维 InSe 的本征杨氏模量，发现其仅约为石墨烯的五十分之一，并具有接近 100% 的应变传递效率；发现其双轴应变响应显著增强，光谱响应阈值对应变的调节系数达到 360 meV/%。上述研究揭示了二维 InSe 异常柔顺晶格产生强应变-电子结构耦合的物理机制，建立了界面与机械外场调控二维半导体载流子输运的新认识。相关成果被 Nature、Advanced Materials Technologies、Advanced Photonics Research 等后续研究引用和拓展。

该项目发表主要论文 20 篇，其中 Advanced Functional Materials 等本领域重要期刊论文 6 篇，Materials Horizons 论文入选 2020 年度最受欢迎论文合集（20 篇），高被引论文 1 篇。20 篇主要论文 SCI 引用 1177 次，篇均引用 58 次，5 篇代表作 SCI 引用 569 次（他引 538 次），篇均他引 107 次。研究成果被 Nature、Nature Reviews Physics、Chemical Reviews、Advanced Materials 等国际权威期刊持续引用和评述，多项成果被国际同行原图引用、明确归因并用于后续研究；Mark C. Hersam、Paolo Samorì、Jamie H. Warner、Nicholas A. Kotov、褚君浩等国内外著名学者对相关结构相变、环境稳定性、缺陷调控及应变物性研究进行了专题讨论。项目成果获国家重点研发计划优秀结题 1 次，支撑入选国家级青年人才 2 人次、国家级领军人才 1 人次、全国创新争先奖状 1 人次。基于上述基础规律发展的低损伤界面及光电子技术获授权专利 20 项，并拓展至 CdZnTe、CdTe 核辐射探测等化合物半导体体系，为相关科学规律的普适性及其应用延伸提供了验证。

四、客观评价

该项目发表主要论文 20 篇，其中 *Advanced Functional Materials* 等本领域重要期刊论文 6 篇，*Materials Horizons* 论文入选该刊 2020 年度精选论文及最受欢迎论文合集，高被引论文 1 篇。5 篇代表作 SCI 引用 569 次（他引 538 次），篇均他引 107 次。相关成果先后被 *Nature*、*Nature Reviews Physics*、*Chemical Reviews*、*Advanced Materials* 等国际权威期刊引用和专题评述，多项成果被国际同行原图引用、明确归因并用于后续研究。引文作者包括美国国家工程院院士、欧洲科学院院士、美国物理学会会士、英国皇家化学学会会士及国内外著名学者。

一、对于重要科学发现 1 的评价

1、国际著名二维材料专家、美国西北大学材料研究中心主任、ACS nano 前副主编、Mark C. Hersam 教授等在 *Chemical Reviews* (2021, 121(4), 2713-2775, Ref. 379) 中原图引用并重点讨论了该项目二维 GaTe 晶体结构相变的工作（代表性论文 1），认为“材料厚度是调控二维 III 族金属硫族化物多晶型结构的重要因素”（another factor in the polymorph control is the thickness of the material），并明确指出“Zhao 等观察到了 GaTe 自发相转变现象”（Zhao et al. observed its spontaneous transformation）。

2、美国物理学会会士、德国马克斯·普朗克研究所所长 Kin Fai Mak 教授和欧洲物理学奖获得者、普林斯顿大学 B. Andrei Bernevig 教授在 *Nature* (2025, 643(8071), 376-381, Ref. 79) 中引用了该项目 GaTe 相变研究成果（代表性论文 1），认为项目阐释的不同晶体结构 GaTe 体系“进一步拓展了相关莫尔体系的普适类别”（further expands this moiré ‘universality class’）。华中科技大学翟天佑教授（杰青）在 *Advanced Functional Materials* (2019, 29(23), 1901012, Ref. 13) 中进一步指出，该项目研究为 GaTe 相演变提供了“定性解释”（qualitative understanding on the phase evolution），并支撑了其在 GaTe 不同相结构的可控合成方法的研究。

3、该项目建立的二维材料确定性转移和跨尺度实验方法也得到国际同行采用。俄罗斯列别捷夫物理研究所 Aleksandr Y. Kuntsevich 等在 *Nanomaterials* (2020, 10(11), 2305, Ref. 33) 以及剑桥大学 Jakob Ewald Muencl 博士论文中（Photodetectors for graphene-based integrated photonics, Ref. 163）评价该方法使设备“成本接近绝对最低水平”（this price is close to absolute minimum），并显著降低了二维材料研究的“进入门槛”（low barrier to entry to this research field）。美国国家工程院院士、麻省理工学院 Michael Steven Strano 教授团队进一步进行了类似装置的仿制搭建，并有效支撑了其 *Nature communication* (2022, 13, 5734, Ref. 66) 研究。

二、对于重要科学发现 2 的评价

1、德国亥姆霍兹研究所主任、Artur Erbe 教授在 *InfoMat* (2021; 662-693, Ref. 140) 中原图引用并重点讨论了该项目 GaSe 环境稳定性的研究工作（代表

性论文 3)，认为该项目发展的包覆技术是极具挑战性且为数不多能够有效解决二维 GaSe 材料环境退化难题的方法，并实现了器件性能的长期稳定性（developing an encapsulation technique for GaSe is a demanding process, and very few reports have addressed it. In the work by Zhao et al,¹⁴⁰ ... encapsulated devices revealed long-term stability）。

2、英国皇家化学学会会士、英国牛津大学 Jamie H. Warner 教授在 *Advanced Materials* (2020, 32 (7), 1906958-1906969, Ref.34) 中引用了该项目通过封装改善 GaSe 器件在空气中的稳定性工作（代表性论文 3），明确指出“Zhao 等揭示了 GaSe 暴露于空气后数小时内即开始退化”（Zhao et al. demonstrated that GaSe begins to degrade within hours on exposure to air）。

3、欧洲科学院院士、法国斯特拉斯堡大学 Paolo Samorì 教授在 *Chemical Reviews* (2022, 122(1), 50-131, Ref.372) 中发文高度评价了该项目 InSe 空气钝化研究工作（代表性论文 2），指出“仅通过简单空气暴露即可引起光响应的显著改变”（by simply exposing the sample to air, resulting in a profound modification of the photoresponse）。

4、中国科学院院士褚君浩等在 *Advanced Materials Technologies* (2022, 7, 2200321, Ref. 192) 中引用了该项目 InSe 缺陷调控的研究工作（代表性论文 2），指出“Zhao 等研究了陷阱对 InSe 光探测器光电流产生的影响并揭示了相关响应退化机制”（Zhao et al. investigated the effect of traps on photocurrent generation in InSe-based photodetectors and revealed the photo response degradation mechanism）。全球高被引科学家张文静教授在 *Journal of Materials* (2023, 9, 527-540, Ref. 83) 中进一步以该项目为典型实例，指出硒空位诱导缺陷对 InSe 光电探测器性能调控具有“重要作用”（important role of traps induced by the selenium vacancies）。

三、对于重要科学发现 3 的评价

1、美国艺术与科学院院士、英国皇家化学学会会士、美国密歇根大学 Nicholas A. Kotov 教授等在 *Nature* (2023, 617, 92-99, Ref. 39 和 Ref. 44) 中引用了该项目 InSe 器件方面的研究成果（代表性论文 4），将非对称肖特基势垒（asymmetric Schottky barrier）和光生载流子输运作为解释反向偏压下手性响应增强的重要机制依据。

2、欧洲科学院外籍院士、亚太材料科学院院士 Hua Zhang 教授等在 *Advanced Photonics Research* (2022, 3, 2100221, Ref. 168) 中引用了该项目 Au/石墨/InSe 异质结构研究（代表性论文 4），认为该结构增强了器件 I-V 特性（Zhao et al. enhanced I-V behavior by building Schottky diodes based on Au/graphite/InSe heterostructures）。韩国延世大学 Hyungjin Kim 教授在 *Nano Energy* (2024, 109725, Ref. 148) 中指出该项目空气钝化和界面调控能够“抑制费米能级钉扎效应，并符合 Schottky-Mott 规律”（Fermi-level pinning was suppressed, which is consistent with a Schottky-Mott rule）。

3、中国科学院院士褚君浩等在 *Advanced Materials Technologies* (2022, 7, 2200321, Ref. 80) 中原图引用了该项目 InSe 力学及应变调控的研究工作(代表性论文 5), 认为该项目报道的二维 InSe 优异的应变可调性和弹性性能(sizeable strain tunability and outstanding elastic properties), 在柔性电子器件、应变传感和纳米机械应用领域具有巨大潜力(tremendous potential)。

此外, 北京航空航天大学蒋成保院士、英国皇家化学学会会士、加州大学洛杉矶分校段镶锋教授、英国皇家工程院讲席教授 Brian D. Gerardot 等国内外著名学者在相关综述和论文中也引用了该项目成果, 并对该项目结构调控、缺陷工程及器件应用研究给予了积极评价。

五、代表性论文专著目录（不超过 8 条，其中代表性论文不超过 5 篇，代表性专著不超过 3 部）

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	他引总次数	检索数据库	知识产权是否归国内所有
1	The role of traps in the photocurrent generation mechanism in thin InSe photodetectors	Materials Horizons	Qinghua Zhao, Wei Wang, Felix Carrascoso-Plana, Wanqi Jie, Tao Wang*, Andres Castellanos-Gomez*, Riccardo Frisenda*	2020, 7(1), pp.252-262	2020	Tao Wang*, Andres Castellanos-Gomez*, Riccardo Frisenda*	Qinghua Zhao	赵清华, 王涛	275	Web of Science	是

2	Thickness-induced structural phase transformation of layered gallium telluride	Physical Chemistry Chemical Physics	Qinghua Zhao, Tao Wang*, Yaping Miao, Fei Ma*, Yong Xie, Xiaohua Ma*, Yaxu Gu, Jie Li, Jie He, Bingqi Chen, Shouzhi Xi, Lingyan Xu, Hongjian Zhen, Ziang Yin, Jie Li, Jie Ren, Wanqi Jie	2016, 18(28), pp.18719-18726	2016	Tao Wang*, Fei Ma*, Xiaohua Ma*	Qinghua Zhao	赵清华, 王涛, 苗亚萍, 马飞, 谷亚旭, 李洁, 何杰, 陈炳奇, 席守智, 徐凌燕, 郑宏建, 殷子昂, 任洁, 介万	89	Web of Science	是
3	Toward Air Stability of Thin GaSe Devices: Avoiding Environmental and Laser-Induced Degradation by Encapsulation	Advanced Functional Materials	Qinghua Zhao, Riccardo Frisenda*, Patricia Gant, David Perez de Lara, Carmen Munuera, Mar Garcia-Hernandez, Yue Niu, Tao Wang*, Wanqi Jie, Andres Castellanos-Gomez*	2018, 28(47), pp.1805304	2018	Riccardo Frisenda*, Tao Wang*, Andres Castellanos-Gomez*	Qinghua Zhao	赵清华, 牛越, 王涛, 介万奇	64	Web of Science	是

4	InSe Schottky Diodes Based on Van Der Waals Contacts	Advanced Functional Materials	Qinghua Zhao, Wanqi Jie, Tao Wang*, Andres Castellanos-Gomez*, Riccardo Frisenda*	2020, 30(24), pp.2001-2007	2020	Tao Wang*, Andres Castellanos-Gomez*, Riccardo Frisenda*	Qinghua Zhao	赵清华, 王涛	74	Web of Science	是
5	Giant piezoresistive effect and strong bandgap tunability in ultrathin InSe upon biaxial strain	Advanced Science	Qinghua Zhao, Tao Wang, Riccardo Frisenda, Andres Castellanos-Gomez*	2020, 7(20), pp. 200164-200165	2020	Tao Wang*, Riccardo Frisenda*, Andres Castellanos-Gomez*	Qinghua Zhao	赵清华, 王涛	36	Web of Science	是
合 计									538		

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	对该项目贡献
赵清华	1	无	教授	西北工业大学	西北工业大学	项目负责人，第 1-5 篇代表性论文作者。对该项目主要科学发现 1-3 作出重要贡献：1. 建立二维半导体厚度识别、确定性组装及极端环境原位测试方法，揭示 GaTe 厚度诱导结构相变及表面能主导晶相选择机制；2. 揭示 GaSe 环境失稳及 InSe 缺陷钝化机制，阐明本征缺陷对材料稳定性和光生载流子动力学的调控规律；3. 揭示二维 InSe 范德瓦耳斯界面削弱费米能级钉扎及调控肖特基势垒的机制，首次测定其超低杨氏模量及强应变-电子结构耦合规律。承担了核心研究方案设计、关键技术突破及成果总结工作，占项目总工作量 90%。
王涛	2	副主任	教授	西北工业大学	西北工业大学	第 1-5 篇代表性论文作者。对该项目主要科学发现 1-3 作出重要贡献：1. 参与建立二维半导体厚度识别、确定性组装及极端环境原位物性研究方法，开展 GaTe 厚度依赖结构演化及相变机制研究；2. 参与 GaSe 环境退化和 InSe 缺陷钝化研究，开展

						材料结构、缺陷电子态及光电响应演变分析，支撑缺陷-环境作用及载流子输运机制揭示；3. 参与 InSe 范德瓦耳斯肖特基界面及应变调控研究，开展界面势垒、费米能级钉扎和力电耦合行为分析，支撑界面与应变输运规律揭示。承担了核心研究方案设计、关键技术突破及成果总结工作，占项目总工作量 80%。
谢涌	3	无	副教授	西安电子科技大学	西安电子科技大学	第 2 篇代表性论文作者。对该项目主要科学发现 1 作出重要贡献：1. 参与 GaTe 厚度相变表征及分析，揭示了 GaTe 厚度诱导结构相变及表面能主导晶相选择机制。承担了核心研究方案设计、关键技术突破及成果总结工作，占项目总工作量 50%。

七、主要完成单位情况（不超过 3 个）

完成单位	排名	对该项目主要贡献（限 600 字）
西北工业大学	1	本单位作为该项目的完成单位，负责项目总体规划、科学问题凝练、技术路线设计及组织实施。建立了二维 III-VIA 族半导体厚度定量识别、确定性组装及极端环境原位物性研究方法，为原子尺度结构、缺陷电子态及载流子输运研究提供了实验基础。揭示了二维 GaTe 厚度诱导结构相变及表面能主导晶相选择机制，阐明了 GaSe 环境失稳与 InSe 缺陷钝化规律；揭示了 InSe 范德瓦耳斯界面削弱费米能级钉扎及应变调控电子结构与载流子输运机制，形成了从结构稳定性、缺陷电子态到界面与外场调控输运的系统科学认识。为项目实施提供了科研条件、技术平台及组织保障。
西安电子科技大学	2	本单位作为该项目的完成单位，主要参与二维 GaTe 原子尺度结构演化规律研究。围绕不同厚度 GaTe 的晶体结构表征与分析，系统开展厚度依赖结构演变研究，为确认 GaTe 由单斜结构向六方结构转变及其临界厚度提供了重要实验依据，支撑了表面能主导晶相选择机制的揭示。与项目其他完成单位共同完成代表性论文 2，为主要科学发现一的形成作出了重要贡献，并为相关研究提供了实验条件和科研保障。

八、完成人合作关系说明

赵清华、王涛、谢涌围绕二维 III-VIA 族半导体原子尺度结构演化、缺陷与环境作用以及界面和应变调控载流子输运等科学问题开展了长期、稳定的合作研究，形成了从实验方法建立、材料结构与缺陷机制研究，到界面输运及力电耦合规律揭示的系统研究体系。

赵清华作为项目负责人，负责总体研究思路、技术路线设计和关键科学问题凝练，统筹二维半导体原子尺度物性研究方法、GaTe 结构演化、GaSe/InSe 缺陷与环境作用以及 InSe 界面与应变调控等研究工作。

王涛与赵清华保持长期紧密合作，共同开展实验方法建立、GaTe/GaSe/InSe 结构与物性演变、范德瓦耳斯肖特基界面及 InSe 力电耦合等研究，在代表性论文 1-5 及相关知识产权中形成系列合作成果，共同支撑该项目三项主要科学发现。

谢涌主要与赵清华、王涛合作开展了不同厚度 GaTe 晶体结构的表征和分析，

重点参与揭示了 GaTe 厚度依赖结构演化规律等工作，与赵清华、王涛共同完成代表作 2，为主要科学发现一的形成提供了重要支撑。

三位完成人通过共同凝练科学问题、承担研究任务、开展实验与理论分析、发表代表性论文及形成相关知识产权，建立了持续稳定的合作关系。其中赵清华负责项目总体组织与核心科学问题研究，王涛深度参与三项主要科学发现的形成，谢涌重点参与了主要科学发现一相关研究，共同完成了该项目主要科学成果。