

项目名称：二维材料的晶界、界面和缺陷效应的理论探索

主要完成单位：山西师范大学 大连理工大学

主要完成人：张均锋 赵纪军 高峻峰 韩楠楠 苏艳

获奖奖种及等级：山西省科学技术奖(自然科学奖)二等奖

项目简介：本项目属于基础科学学科：物理学-凝聚态物理学。以石墨烯为代表的二维材料已经在微电子、光电以及能源等领域展现出了广阔的应用前景。然而，对二维材料中不可避免的晶界、界面等缺陷的理论模型和物理图像非常欠缺。基于此，本项目进行了系列探索，主要取得了如下科学发现：(1) 预测了石墨烯晶界处的弯曲导致石墨烯力学强度下降，探索了拉伸断裂行为的温度效应；被国际同行誉为“先驱计算研究”，被美国工程院院士发表在 Science 上的实验研究证实。(2) 系统探索并提出了实验调控硅烯缺陷的思路，启发了后续和实验的合作。(3) 建立了二维面内异质结能带排列肖特基势垒物理图像，被美国国家科学院院士实验证实。发现了 GeS/SnS 电子空穴对实空间分离在光伏器件方面潜在的应用。上述科学发现主要成果发表在 ACS Nano 以及 Chem. Mater. 等重要刊物上，8 篇代表作中有 7 篇发表于 SCI 一区期刊，截至申请项目时他引 399 次，其中 2 篇论文单篇引用超过百次。

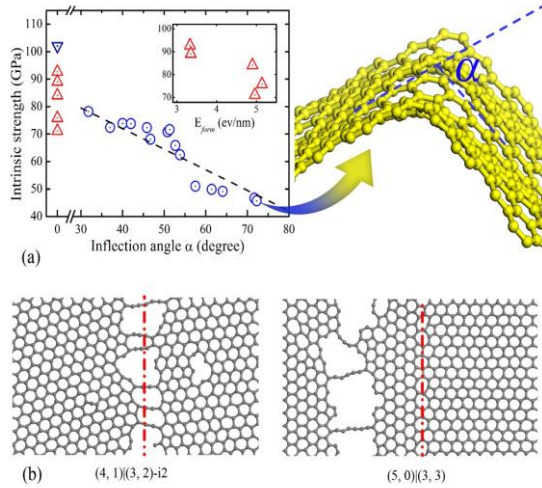


图 1 石墨烯晶界导致的力学强度下降

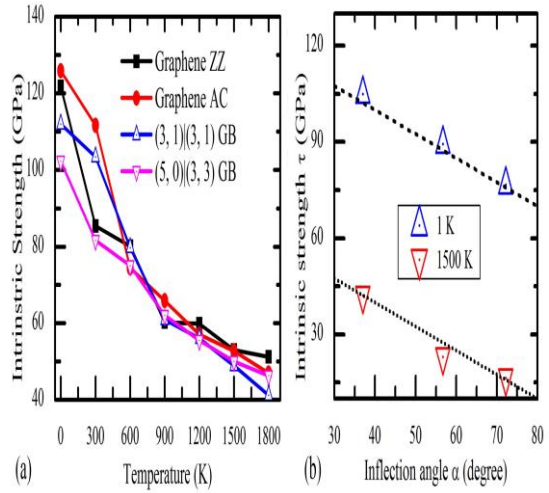


图 2 不同温度下石墨烯晶界力学强度

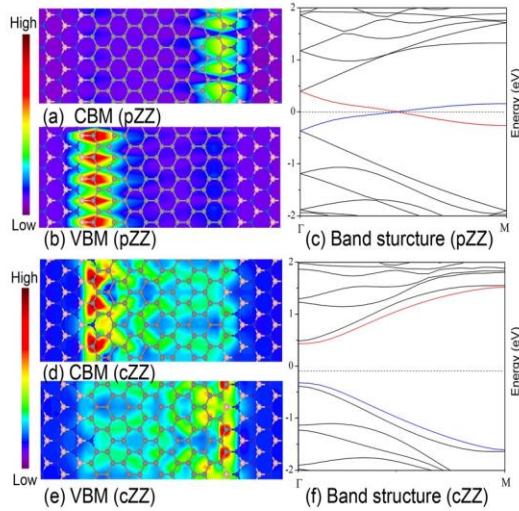


图 3 界面细节对能带的影响

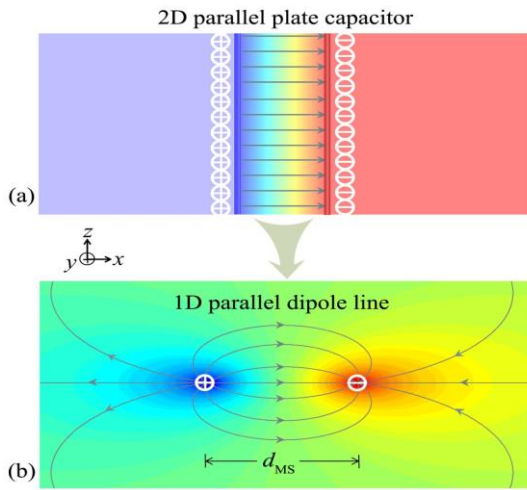


图 4 维度下降下界面偶极物理图像的变化

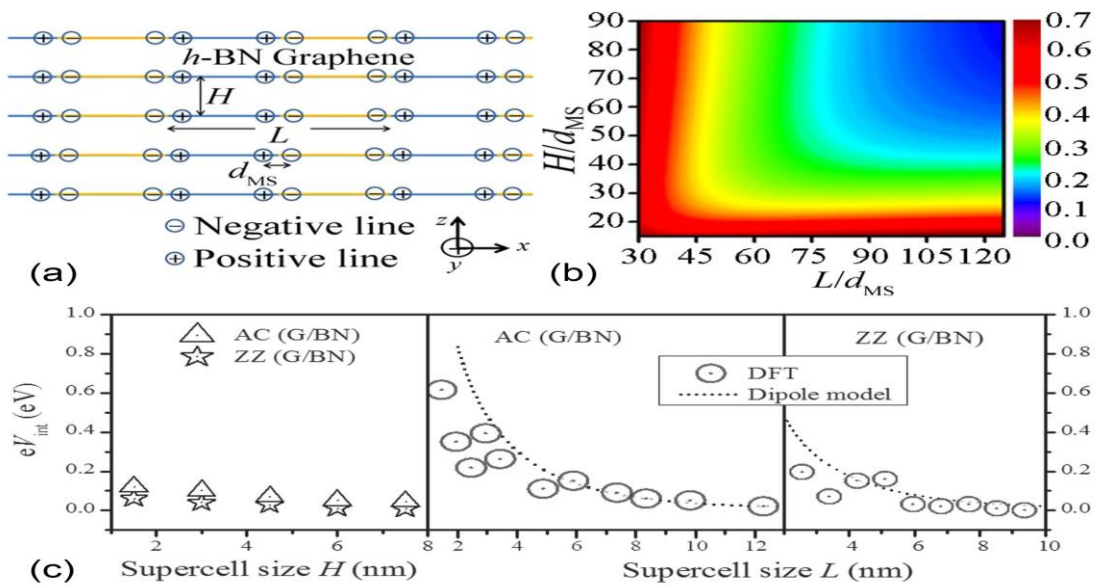


图 5 二维面内异质结中的肖特基势垒物理图像证实