

## 项目公示信息

**项目名称：**二维功能材料的计算设计、调控及物理机理研究

**完成单位：**西安邮电大学

**完成人：**郭三栋；郭小姝

**完成人合作关系情况：**第一完成人郭三栋与第二完成人郭小姝的合作关系说明：共同完成代表论文 7

**成果类别：**基础研究、应用基础类成果

**成果简介：**

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。自 2004 年石墨烯首次被机械剥离以来，二维材料在合成、表征和应用等方面都取得了很大的进展。人们合成了大量具有二维层状结构的材料，如六方氮化硼（h-BN）、MoS<sub>2</sub>、金属卤化物、MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub>、MXenes、MOFs 和 COFs 等，并将其应用于一系列领域的研究。这些领域包括电子学、光电子学、催化、储能、生物医学、传感器、人工智能等。毫无疑问，二维功能材料已经成为并将继续成为物质科学的重要研究课题。因此采用客观、准确的第一性原理方法对二维功能材料进行计算设计、调控及物理机理研究，能够避免大量的不必要的实验尝试，也为新型多功能器件提供理想的材料基础。在陕西省自然科学基金及教育厅项目等项目的资助下，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：

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(Piezovalleleytronics)。[Phys. Rev. B 104, 224428 (2021)]

2: 通过应变或者电子关联调控, 在特殊的二维材料中实现多种新奇电子态: 铁谷态、半铁谷金属态和谷极化量子反常霍尔态。这些态之间的转变能通过带反转以及 Berry 曲率符号改变解释。[Phys. Rev. B 105, 104416 (2022); Phys. Rev. B 106, 064416 (2022)]

3: 预言  $\text{RuBr}_2$  可能内在就是一个能谷极化量子反常霍尔绝缘体。即使不是, 也可以通过应变调控能带实现能谷极化量子反常霍尔绝缘体。另外通过具体的材料计算得到调控关联强度可以通过应变等价的实现。[2D Mater. 9, 035011 (2022)]

4: 提出压电量子反常霍尔绝缘体电子态, 可以实现压电、铁磁和拓扑共存。理论预言单层 Janus  $\text{Fe}_2\text{IX}$  ( $\text{X}=\text{Cl}$  和  $\text{Br}$ ) 是一个性能优异的内禀压电量子反常霍尔绝缘体, 具有高的居里温度 (大约 400 K)、高陈数 ( $C=2$ )、大拓扑能隙 (大约 200 meV) 和高的面外压电系数 (大约 0.4 pm/V) 的综合优势。[Nanoscale 13, 12956 (2021)]

5: 预言了新型的二维 Janus 材料  $\text{SnSSe}$  和  $\text{MSiGeN}_4$  ( $\text{M} = \text{Mo}$  and  $\text{W}$ ), 理论研究了它们的物理和化学性质。[Phys. Chem. Chem. Phys. 21, 24620 (2019); J. Mater. Chem. C 9, 2464(2021)]

6: 首次理论计算了第一个实验合成的二维 Janus 材料  $\text{MoSSe}$  的晶格热导率。[Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 7236 (2018)]

经过课题组多年的不懈努力, 在多项基金等项目的资助下, 本项目取得了一系列高质量的研究成果。相关的研究成果在 Physical Review B, Physical Review Materials, Applied Physics Letters, 2D Materials, Journal of Materials Chemistry C, Nanoscale, Frontiers of Physics 等权威期刊上发表高水平研究论文 40 余篇, 其预言的功能材料、新的电子态和新的物理效应受到国内外多个课题组关注及正面引用, 被 SCI 论文他引 1100 余频次。

8 篇代表性论文发表于国际著名期刊 Physical Review B, 2D Materials, Nanoscale, Journal of Materials Chemistry C, Physical Chemistry Chemical Physics。Google 总引用 558 次 (截止 2024. 3. 2), 单篇最高被引 160 次, 他引总次数 490 余次。Web of Science 核

心合集（检索证明截止 2023.12.4）： 他引 376 次，单篇最高 SCI 他引 126 次。引用期刊包括众多国际著名期刊，例如 Nature Communications, Physical Review B, Nano Letter, Advanced Functional Materials, Nano Today, ACS Nano, Materials Horizons, Physical Review Materials, Applied Physics Letters, 2D Materials, Journal of Materials Chemistry A, Journal of Materials Chemistry C, Nanoscale, Frontiers of Physics 等

项目完成人以第一作者/通讯作者发表于 Physical Review B, Physical Review Materials, Applied Physics Letters, 2D Materials, Journal of Materials Chemistry C, Nanoscale, Frontiers of Physics 等重要学术期刊文章 90 余篇，被引用 2900 余次(Google)，其中 5 篇第一作者被引大于 100 次(Google)，H-index 30(Google)。入选“陕西高校青年杰出人才项目”支持。入选英国皇家化学会物理化学类期刊 2019 年“Top 1%高被引作者排行榜”。获得英国物理学会 2021 年“高被引文章奖”。2021-2023 年连续全球前 2%科学家——年度科学影响力排行榜，2023 年进入世界前 2 万名。2022-2023 年连续全球前 2%科学家——学术生涯科学影响力排行榜。最近代表文章（**全部为第一作者和唯一通讯作者**）：Phys. Rev. B 108, L180403 (2023); Phys. Rev. B 104, 224428 (2021); Phys. Rev. B 105, 104416 (2022); Phys. Rev. B 106, 064416 (2022); Phys. Rev. B 107, 054414 (2023); Phys. Rev. B 108, 075421 (2023); Phys. Rev. Mater. 7, 044604 (2023); Appl. Phys. Lett. 120, 232403 (2022); Appl. Phys. Lett. 121, 062403 (2022); Appl. Phys. Lett. 123, 082401 (2023); Appl. Phys. Lett. 123, 173102 (2023).

### 主要论文专著目录（限 8 条）

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
1	Possible way to achieve anomalous valley Hall effect by piezoelectric effect in a GdCl <sub>2</sub> monolayer	Physical Review B	郭三栋, 朱靖欣, 穆雯琪, 刘邦贵	2021, 104: 224428	2021-12-23	郭三栋	郭三栋
2	Substantial electronic correlation effects on the electronic properties in a Janus FeClF monolayer	Physical Review B	郭三栋, 朱靖欣, 殷梦圆, 刘邦贵	2022, 105: 104416	2022-03-15	郭三栋	郭三栋
3	Strain effects on the topological and valley properties of the Janus monolayer VSiGeN <sub>4</sub>	Physical Review B	郭三栋, 穆雯琪, 王佳豪, 杨雨萱, 王冰, 洪逸欣	2022, 106: 064416	2022-08-11	郭三栋	郭三栋
4	Intrinsic room-temperature piezoelectric quantum anomalous hall insulator in Janus monolayer Fe <sub>2</sub> IX (X = Cl and Br)	Nanoscale	郭三栋, 穆雯琪, 肖湘波, 刘邦贵	2021, 13: 12956-12965	2021-06-25	郭三栋	郭三栋
5	Valley-polarized quantum anomalous Hall insulator in monolayer RuBr <sub>2</sub>	2D Materials	郭三栋, 穆雯琪, 刘邦贵	2022, 9: 035011	2022-05-30	郭三栋	郭三栋
6	Predicted septuple-atomic-layer Janus MSiGeN <sub>4</sub> (M = Mo and W) monolayers with Rashba spin splitting and high electron carrier mobilities	Journal of Materials Chemistry C	郭三栋, 穆雯琪, 朱毓彤, 韩如玥, 任文才	2021, 9: 2464-2473	2021-01-04	郭三栋	郭三栋

7	Predicted Janus SnSSe monolayer: a comprehensive first-principles study	Physical Chemistry Chemical Physics	郭三栋, 郭小姝, 韩如玥, 邓焯	2019, 21: 24620-24628	2019-10-16	郭三栋	郭三栋
8	Phonon transport in Janus monolayer MoSSe: a first-principles study	Physical Chemistry Chemical Physics	郭三栋	2018, 20: 7236-7242	2018-02-15	郭三栋	郭三栋