

陕西省自然科学奖公示信息

(2026年度)

一、项目基本情况

项目名称	半导体异质界面量子输运调控的物理机理与器件设计
主要完成人	张弦；郭志新；陈时友；刘邦；曹欣伟
主要完成单位	西安文理学院；西安交通大学；华东师范大学；

二、提名意见（适用于部门、机构提名）

提 名 者	陕西省教育厅	提名等级	☐ 一等奖 ☒ 二等奖及以上
提名意见： 该项目围绕“异质界面结构如何调控量子输运”这一核心科学问题，自主发展 RSDFT-NEGF 量子输运计算框架，沿“电荷流—自旋流—光电流”主线，原创“三明治”界面保护沟道设计、“无悬挂键”范德华多铁异质结新范式与“近界面载流子浓度”统一物理量三大机制。5 篇代表性论文累计 SCI 他引约 150 次，被 Nat. Rev. Mater.、Chem. Rev. 等顶级期刊正面引用，获国内外院士级同行高度评价，科学价值与引领性突出。提名申报陕西省科学技术奖自然科学奖二等奖。 说明：省科学技术奖一、二等奖项目，实行按等级标准提名、独立评审表决的机制。提名单者应严格依据省科学技术奖的标准条件，说明提名项目的贡献程度及等级建议。“仅提名一等奖”评审落选项目不再降格参评二等奖。提名项目正式提交后，提名等级建议本年度不得变更。			

三、项目简介

半导体是新一代信息技术与新型能源体系的共性基石，亦是我国“卡脖子”攻关的核心方向。先进 CMOS、非易失自旋存储与薄膜光伏三类核心器件，分别支撑着芯片自主可控、低功耗存储与“双碳”光电转换三大国家重大战略需求；三者原理与应用场景虽迥异，却共同受制于异质界面处原子重构与电子结构重整这一国际公认的物理瓶颈：当器件特征尺寸逼近原子量级，界面电子态杂化、自旋-轨道耦合（SOC）与量子隧穿效应被显著放大，界面物理由次要修正项跃升为决定器件极限的主导因素。

本项目聚焦“**异质界面结构如何调控量子输运**”这一核心科学问题，沿“**电荷流—自旋流—光电流**”递进主线，自主发展第一性原理与量子输运多尺度计算框架，系统揭示了异质界面处电子态重构、磁电耦合与载流子输运三类核心量子效应，提出多项突破性新型器件设计方案，建成贯通三类核心半导体技术的统一物理图像。主要创新成果如下：

1. 电荷流主线：构建亚 5 nm 二维/一维 CMOS 沟道自主可控的理论设计范式，自主发展实空间第一性原理格林函数（RSDFT-NEGF）程序，原创“三明治”结构界面保护设计思想与“通道筛选”输运新机制。基于“界面保护”逆向设计思想，遴选出 MoSi_2N_4 “三明治”结构界面保护沟道材料，其外层 SiN 屏蔽衬底干扰、中间 MoN_2 层承担电子输运，所设计 5 nm 双栅 n 型器件开态电流达 $1025 \mu\text{A}/\mu\text{m}$ 、亚阈值摆幅 76 mV/dec、功耗-延迟积仅 $0.03 \text{ fJ}/\mu\text{m}$ ；进一步将维度拓展至一维，揭示 7-9-7-AGNR 中边缘苯环形成“锯齿形”输运通道的“通道筛选”新机制，所设计器件开态电流高达 $4277 \mu\text{A}/\mu\text{m}$ ，SS 低至 54 mV/dec，各项指标全面超越国际半导体技术路线图（ITRS）2028 标准。

2. 自旋流主线：开辟范德华多铁异质结新范式，奠定下一代低功耗、高密度非易失自旋电子器件的物理基础与设计框架。针对常规铁磁金属/铁电氧化物异质结因界面悬挂键引发磁层不可逆破坏的国际共性瓶颈，原创性地提出以“无悬挂键”vdW（范德华）界面构筑“二维铁磁体/钙钛矿铁电氧化物（2DFM/POF）”多铁异质结新构型；基于新型多铁异质结，进一步提出非易失性自旋场效应晶体管设计，绕开了 Datta-Das 自旋晶体管悬而未决近 40 年的 π 相位控制瓶颈；以双层 $\text{CrI}_3/\text{BiFeO}_3$ 为模型，揭示铁电极化通过 t_{2g} 轨道电荷转移调制磁基态切换的微观机制。据此衍生出非易失 vdW 自旋阀、超低偏压自旋场效应晶体管（SFET，0.02 V 下开关比达

650 %) 、多阻态 vdW 磁性隧道结 (MTJ, 隧穿磁电阻高达 6.2×10^5 %、阻态数是同质结 MTJ 的 2 倍以上) 、以及 CrPTe₃ 单层 150 %巨各向异性磁电阻 (较块体提升 1-2 个数量级) 等系列原创器件方案。

3. 光电流主线: 提出“近界面载流子浓度”统一物理量, 奠定超越传统带阶调控工程的光半导体异质界面工程理论基础。针对薄膜异质结电池长期受 0-0.4 eV 导带带阶工程束缚的局面, 颠覆性地揭示导带带阶 (CBO) 、缓冲层导带底态密度与温度三个看似独立的参数实质上通过“近界面电子浓度”这一统一物理量协同决定短路电流 J_{SC} , 进而提出“选用高导带底态密度缓冲层、引入施主型界面缺陷、提升缓冲层重掺杂”三条全新普适优化策略; 并从“p-d 轨道杂化缺失”统一图像出发, 首次阐明碱金属次生相“阻空穴、通电子”的选择性载流子输运机制。上述机制可普适推广至 CIGS (Cu(In,Ga)Se₂) 、CdTe、Sb₂Se₃、CZTSSe (Cu₂ZnSn(S,Se)₄) 等多类异质结薄膜电池。

四、客观评价

【限 2 页。围绕科学发现点的原创性、公认度和科学价值进行客观、真实、准确评价。填写的评价内容要有客观依据，主要包括国内外同行在重要学术刊物（专著）和重要国际学术会议等公开发表的学术性评价意见，国内外重要科技奖励等，可在附件中提供证明材料。非公开资料（如私人信函等）不能作为评价依据。】

本项目发表论文 10 余篇，其中代表性论文 5 篇 [包括 npj Comput. Mater.、Phys. Rev. B、Phys. Rev. Applied、Appl. Phys. Lett.、J. Energy Chem.]，累计 SCI 他引约 150 次，并被 Nat. Rev. Mater.、Chem. Rev.、Phys. Rev. Lett.、Nat. Commun.、Adv. Mater.、Mater. Today 等多领域顶级 SCI 期刊正面引用，研究影响覆盖凝聚态物理、半导体器件、自旋电子学与光伏能源等多个学科方向。代表性国际同行评价方面，Stuart S. P. Parkin 院士在 Mater. Today 70, 193 (2023) 综述中将本项目多阻态异质结工作列为“**无外场多态翻转 PMA 磁体方向的代表性进展**”；郭万林院士在 Adv. Funct. Mater. 33, 2214050 (2023) 中肯定本项目所提新型晶体管“**工作频率高、增益控制性能好、反馈电容小**”；韩秀峰院士等在 J. Phys. Chem. C 129, 10709 (2025) 中将本工作列为 **vdW 磁体自旋场效应晶体管 (SFET) 方向的代表性研究之一**。产业转化方面，本项目所揭示的 vdW 多铁异质结非易失磁电调控机制与电场可调多态磁电阻新机制，被鸿之微科技认定为发展高密度、低功耗存储器的关键理论基础；该公司出资 **400 万元**与完成人联合开展自旋轨道矩磁存储器结构及紧凑模型研究，有力推动了成果向工程化、产业化层面的实质性落地。项目支撑方面，围绕“异质界面调控量子输运”三条主线，完成人持续获得国家级与省部级项目稳定资助（含国家自然科学基金面上项目 **2 项**、国家重点研发计划子课题 **2 项**、省级项目 **3 项**），并已成功结题 3 项，为“电荷流—自旋流—光电流”主线研究提供了稳定的经费保障。

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	Promising Properties of a Sub-5-nm Monolayer MoSi2N4 Transistor	Physical Review Applied	黄俊生, 李平, 任晓雄, 郭志新	2021 年 16 卷 04402 2 页	2021-10-13	郭志新	黄俊生, 李平	黄俊生, 李平, 任晓雄, 郭志新	70	Web of Science	是
2	Intriguing Magnetoelectric Effect in Two-dimensional Ferromagnetic /Perovskite Oxide Ferroelectric Heterostructure	npj Computational Materials	李平, 周学松, 郭志新	2022 年 8 卷 20 页	2022-01-27	郭志新	李平	李平, 周学松, 郭志新	32	Web of Science	是
3	Nonvolatile spin field effect transistor based on VSi2N4/Sc2CO2 multiferroic heterostructure	Physical Review B	张弦, 刘邦, 黄俊生, 曹欣伟, 张云哲, 郭志新	2024 年 109 卷 20510 5	2024-05-01	郭志新	张弦	张弦, 刘邦, 黄俊生, 曹欣伟, 张云哲, 郭志新	14	Web of Science	是
4	Electric field tunable multi-state tunnel magnetoresistances in 2D van der Waals magnetic heterojunctions	Applied Physics Letters	刘邦, 任晓雄, 张弦, 董岩, 李平, 郭志新	2023 年 122 卷 15240 8 页	2023-04-13	张弦, 董岩, 郭志新	刘邦	刘邦, 任晓雄, 张弦, 董岩, 李平, 郭志新	7	Web of Science	是

5	First-principles study on the alkali chalcogenide secondary compounds in Cu(In,Ga)Se-2 and Cu ₂ ZnSn(S,Se)(4) thin film solar cells	Journal of Energy Chemistry	张弦, 韩丹, 陈时友, 段纯刚, 褚君浩	2018 年 27 卷 1140 页	2017-12-05	陈时友	张弦	张弦, 韩丹, 陈时友, 段纯刚, 褚君浩	20	Web of Science	是
合 计									143		
补充说明 (视情填写) :											

六、主要 七、完成人情况表

姓 名	张弦	排 名	1
行政职务	无		
技术职称	讲师		
工作单位	西安文理学院		
完成单位	西安文理学院		
对本项目主要学术贡献： 主导完成了项目相关研究的计算模拟、数据分析和论文撰写等工作。具体包括：系统筛选 CIGS 和 CZTS 太阳能电池中的碱金属二次相，并揭示其对器件性能提升的有益作用机制；发现异质结界面低电子浓度是限制太阳能电池短路电流的根本因素，并提出相应优化策略；主导开展二维磁性异质结多态隧穿磁电阻效应研究，以及自旋场效应晶体管的设计。代表论文 3、5 的第一作者，代表论文 4 的通讯作者。			

姓 名	郭志新	排 名	2
行政职务	无		
技术职称	教授		
工作单位	西安交通大学		
完成单位	西安交通大学		
对本项目主要学术贡献： 提出了 2DFM/POF 多铁异质结新策略并揭示了磁电耦合微观机制；研究了各向异性磁电阻效应的自旋轨道耦合起源；设计了 MoSi2N4 亚 5 纳米晶体管和 VSi2N4/Sc2CO2 非易失性自旋场效应晶体管。是代表性论文第 1-4 篇的通讯作者。			

姓 名	陈时友	排 名	3
行政职务	无		
技术职称	教授		
工作单位	复旦大学		
完成单位	华东师范大学		
对本项目主要学术贡献： 在项目中负责薄膜太阳能电池界面物理部分的研究设计与理论框架构建。具体包括：提出基于化学势空间分析确定最可能二次相的研究方案；指导开展异质结界面近区低电子载流子浓度限制短路电流的机制分析。是代表论文 5 的通讯作者。			

姓 名	刘邦	排 名	4
行政职务	无		
技术职称	无		
工作单位	西安交通大学		
完成单位	西安交通大学		
对本项目主要学术贡献： 代表性论文 4 中计算模拟工作的主要执行者，是该论文的第一作者。同时是代表论文 3 的重要参与者。			

姓 名	曹欣伟	排 名	5
行政职务	系主任		
技术职称	副教授		
工作单位	西安文理学院		
完成单位	西安文理学院		
对本项目主要学术贡献： 是代表论文 3 的重要参与者，参与了二维多铁异质结自旋电子器件部分的计算模拟、数据分析等工作。			

七、主要完成单位情况表

单位名称	西安文理学院
对本项目主要学术贡献： 西安文理学院是本项目的牵头单位和推荐单位。本单位支持张弦、曹欣伟等完成了多铁界面磁电耦合与自旋输运方向的核心理论计算工作，为项目提供了重要的计算平台和人力支撑。	

单位名称	西安交通大学
对本项目主要学术贡献： 西安交通大学是本项目的核心合作单位。该单位支持郭志新、刘邦完成了亚 5 nm 二维 CMOS 沟道的理论设计和多阻态磁性隧道结的重要研究工作，对本项目自旋输运方向核心成果的形成作出了关键贡献。	

单位名称	西安文理学院
对本项目主要学术贡献： 华东师范大学是本项目光半导体界面物理方向的重要合作单位。该单位支持陈时友、张弦等在光半导体器件异质界面能带调控与光电流输运方向承担了关键研究工作，为本项目光电流输运方向核心成果的取得提供了重要支撑。	

完成人合作关系说明

第一完成人张弦、第二完成人郭志新与第四完成人刘邦为长期合作研究团队, 主要围绕半导体器件电子输运性质的计算开展研究, 共同署名代表性论文3和论文4。

第一完成人张弦与第五完成人曹欣伟合作完成了代表性论文3。

第一完成人张弦与第三完成人陈时友聚焦于太阳能电池材料及器件性能仿真研究, 共同署名代表性论文5。

完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/ 项目排名	合作时间	合作成果	证明材料
1	论文合著	张弦 (1/5) , 郭志新 (2/5) , 刘 邦 (4/5) , 曹欣伟 (5/5)	2022 年至今	Nonvolatile spin field effect transistor based on VSi ₂ N ₄ /Sc ₂ CO ₂ multiferroic heterostructure	代表性论文 3
2	论文合著	张弦 (1/5) , 郭志新 (2/5) , 刘 邦 (4/5)	2021 年至今	Electric field tunable multi-state tunnel magnetoresistances in 2D van der Waals magnetic heterojunctions	代表性论文 4
3	论文合著	张弦 (1/5) , 陈时友 (3/5)	2016 年至今	First-principles study on the alkali chalcogenide secondary compounds in Cu(In,Ga)Se ₂ and Cu ₂ ZnSn(S,Se) ₄ thin film solar cells	代表性论文 5