

山东省自然科学奖提名公示

一、项目基本情况

提 名 者	山东省教育厅		
项目名称	环境友好型层状柔性热电材料的设计与开发		
主要完成人	刘晓兵、陈欣、张永胜、孙海瑞、杨兵超		
主要完成单位	曲阜师范大学、中国科学院合肥物质科学研究院		
提名单位	山东省教育厅		
提名等级	二等奖		
通讯地址	济南市市中区舜耕路 60 号	邮政编码	250002
联 系 人	王勇	联系电话	0531-51793860
电子邮箱	wuyong@shandong.cn	传 真	
提名意见： <p>热电材料在回收利用废热、缓解能源危机和环境污染问题等方面具有重要的社会意义及实际应用价值，设计和制备具有高热电转化效率、无贵金属、无毒、廉价、轻质、环保的热电材料成为当前材料科学领域的热点问题之一。</p> <p>该项目进行了深入系统的研究，完成了一些很有意义、具有原创性的工作，取得了具有国际影响力的创新性研究成果。该项目的重要科学发现包括：科学发现一，结合理论模拟与高温高压合成技术，取得了系列创新性成果，通过掺杂微量元素、低维化、构建异质结与转角、压力调控等手段，成功改善了黑磷基材料的稳定性及热电转换效率，为发展柔性、轻质、环境友好、低成本、高性能的新型热电材料开辟了新方向。科学发现二，揭示了 SnSe 低热导率的来源，提出了压应力调控热电性能的新方式，成功实现了该材料在中低温区热电性能的提升，结合应力工程下的低热导率和能带工程下的高功率因子为设计新型的高效热电材料提供了方案。5 篇代表性论文发表在材料科学领域国际权威性期刊 <i>Advanced Functional Materials</i>, <i>Small</i>, <i>ACS Nano</i>, <i>Journal of Material Chemical A</i>。研究工作得到了国内外著名学者的广泛关注和较高评价。其中基于黑磷基热电材料的设计与开发工作，与领域内企业中磷科技(深圳)有限责任公司合作开展热电器件开发，获得成果转化经费 200 万（已到账），是推动产、学、研结合的代表性成果之一。第一完成人主要从事高压物理与材料科学研究工作，入选国家高层次人才特殊支持计划青年拔尖人才、山东省泰山学者青年专家，获山东省杰出青年基金、山东省优秀青年基金、山东省物理学会杰出青年成果奖等荣誉，第二完成人长期从事新型热电材料设计研究工作，入选山东省泰山学者青年专家，获山东省优秀青年基金；第三完成</p>			

人是热电材料领域专家人才，入选第十二批“国家青年千人计划”、山东省泰山学者特聘教授；第四与第五完成人为多年从事热电材料开发与黑磷基二维材料制备的优秀青年研究人员。

我单位认真审阅了该项目推荐书及其附件材料，确认真实有效，相关栏目符合填写要求。按照要求，我单位及完成人所在单位均进行公示，确认完成人、完成单位排序无异议。

二、项目简介

当前全球能源短缺和环境污染问题凸显的背景下，传统能源利用率低，70%以上以废热的形式被直接排放。热电材料在回收利用废热、缓解能源危机和环境污染问题等方面具有重要的社会意义及实际应用价值。设计和制备具有高热电转化效率、无毒、廉价、轻质、环保的热电材料成为当前材料科学研究领域的热点问题之一。黑磷与 SnSe 材料不仅具有类似的层状晶体结构，层内均存在沿 armchair 与 zigzag 方向热、电传输的强各向异性，对解耦材料的电声耦合存在先天优势，但实际应用面临整体热电转换效率低的科学难点。

本项目进行了深入系统的研究，理论结合实验，完成了一些很有意义、具有原创性的工作，取得了一系列关键性的突破，主要如下：科学发现一：揭示了黑磷基材料高热电转换效率，该项目首先通过理论计算，通过掺杂微量元素、低维化、构建异质结与转角、压力调控等手段，成功改善了黑磷基材料的稳定性及热电转换效率，揭示了黑磷结构在热电材料研究领域的巨大潜在价值；利用高温高压技术，首次成功制备“类一维”黑磷基复合材料，通过构建黑磷异质结的方式，大幅度优化了金属 Te 的热电转换 ZT 值，达到单质体系最高水平，首次验证了黑磷基结构在热电转换领域的优越特性。科学发现二：揭示了 SnSe 材料低热导率的来源，该项目提出通过压应力调控热电性能的新方式，成功实现了该材料在中低温区热电性能的提升，结合应力工程下的低热导率和能带工程下的高功率因子为设计新型高效热电材料提供了方案。

本项目共发表 SCI 论文 20 余篇，5 篇代表性论文发表在 *Adv. Funct. Mater.*, *Small*, *ACS Nano*, *J. Mater. Chem. A* 等材料科学领域国际权威性期刊。研究工作得到了国内外著名学者的广泛关注和较高评价。其中基于黑磷基热电材料的设计与开发工作，与领域内企业中磷科技（深圳）有限责任公司合作开展热电器件开发，获成果转化经费 200 万，是推动产、学、研相结合的成果代表性成果之一。第一完成人入选国家高层次人才特殊支持计划青年拔尖人才、山东省泰山学者青年专家，获山东省杰出青年基金、山东省优秀青年基金、山东省物理学会杰出青年成果奖等荣誉，第二完成人入选山东省泰山学者青年专家，获山东省优秀青年基金；第三完成人入选第十二批“国家青年千人计划”、山东省泰山学者特聘教授。研究团队评为山东省“干事创业好团队”，该项目培养研究生 20 余人，其中 2 人获山东省优秀毕业生，1 人获山东省优秀硕士毕业论文，4 人获山东省优秀研究生成果奖（包括一等奖 1 项），5 人获国家研究生奖学金，评为 2023 年山东省优秀研究生导师团队。这些都充分说明完成人取得了具有国际影响力的创新性研究成果，研究工作获得了领域内认可。

三、代表性论文专著目录（限 5 篇）

序号	论文（专著）名称	刊名（出版社）	Doi /ISN (ISBN)	发表（出版）时间	作者（按刊物发表顺序）	通讯作者（含共同）	第一作者（含共同）	他引总次数	检索数据库	通讯/一作（主编）否为第一完成人	第一单名是第几位
1	Ultrahigh thermoelectric performance realized in black phosphorous system by favorable band engineering through group VA doping	Adv. Funct. Mater.	10.1002/adfm.201904346	2019-07-19	Shuai Duan, Yangfan Cui, Xin Chen, Wencai Yi, Yunxian Liu and Xiaobing Liu	Xin Chen, Xiaobing Liu	Shuai Duan	42	SCI 数据库	是	是
2	Enhanced thermoelectric performance in black phosphorus nanotubes by band modulation through tailoring nanotube chirality	Small	10.1002/sml.202001820	2020-07-24	Xin Chen, Shuai Duan, Wencai Yi, David J. Singh, Jiangang Guo and Xiaobing Liu	Xin Chen, Jiangang Guo, Xiaobing Liu	Xin Chen	15	SCI 数据库	是	是
3	Superior conversion efficiency achieved in GeP3/h-BN heterostructures as novel flexible and ultralight thermoelectrics	ACS Appl. Mater. Interfaces	10.1021/acami.1c01860	2021-4-13	Shuai Duan, Yangfan Cui, Wencai Yi,	Xin Chen, Xiaobing Liu	Shuai Duan	14	SCI 数据库	是	是

					Xin Chen, Bingchao Yang and Xiaobing Liu						
4	Pressure induced thermoelectric enhancement in SnSe crystals	Journal of Materials Chemistry A	10.1039/c6ta03625b	2016-07-05	Yongsheng Zhang, Shiqiang Hao, Li-Dong Zhao, C. Wolverton and Zhi Zeng	Yongsheng Zhang, Zhi Zeng	Yongsheng Zhang	70	SCI 数据库	是	否
5	Lattice strain leads to high thermoelectric performance in Polycrystalline SnSe	ACS Nano	10.1021/acsnano.1c01469	2021-04-14	Xunuo Lou, Shuang Li, Xiang Chen, Qingtang Zhang, Houquan Deng, Jian Zhang, Di Li, Xuemei Zhang, Yongsheng Zhang, Haibo Zeng, Guodong Tang	Yongsheng Zhang, Guodong Tang	Xunuo Lou, Shuang Li	35	SCI 数据库	是	否

四、主要完成人及主要完成单位情况

主要完成人				
位次	姓名	工作单位	完成单位	对本项目贡献
1	刘晓兵	曲阜师范大学	曲阜师范大学	为科学发现一的项目负责人，是代表作 1、2、3 的通讯作者，主要工作包括：提出以黑磷结构为研究对象，以探索外界性能调控手段为研究目标的主体研究思路，确定了以微量掺杂第五主族元素、低维化、构建异质结与莫尔超晶格等方式调控黑磷结构热电性能的技术路线，实现了黑磷基“类一维”复合结构与异质结构的实验制备，为实现黑磷基材料在热电领域走向应用奠定了理论与实验基础。
2	陈欣	曲阜师范大学	曲阜师范大学	为科学发现一的主要完成人，是代表作 1、2、3 的共同通讯作者，通过理论研究率先提出黑磷结构的优势热电特性，并通过掺杂、低维化、超晶格等结构设计与调控手段优化了黑磷体系热电输运性能，为实验制备与性能探索提供了理论基础与研究方向。主持并结题国家自然科学基金青年基金“通过对电子能带结构和声子分布的调控提高黑磷热电性能的第一性原理研究”（11804184）。
3	张永胜	曲阜师范大学	中国科学院合肥物质科学研究院	为科学发现二的项目负责人，是代表作 4 和 5 的通讯作者，揭示了 SnSe 低热导率的来源，提出了压应力调控热电性能的新方式，实现在中低温区热电性能的提升；结合应力工程下的低热导率和能带工程下的高功率因子，为设计新型的高效热电材料提供了方案。
4	孙海瑞	曲阜师范大学	曲阜师范大学	在本项目中负责热电材料的实验制备，首次在单质 Te 中证实了黑磷的高热电转换潜力。主持并结题国家自然科学基金青年基金“多元系 CoSb ₃ /CNTs 复合材料的高压制备及其电声输运特性研究”（11804185）与山东省自然科学基金博士基金“复合掺杂型 CoSb ₃ 的压力调控及内部结构和热电性能的研究”（ZR2017BA012）。
5	杨兵超	曲阜师范大学	曲阜师范大学	1. 开发大尺寸、高质量黑磷定向制备技术，为黑磷基热电材料研发提供材料保障； 2. 发展二维黑磷纳米片宏量剥离技术，为验证黑磷基热电器件的高转换效率奠定实验基础。

主要完成单位情况

位次	单位名称	对本项目贡献：
1	曲阜师范大学	<p>为科学发现一的主要完成单位，学术贡献主要包括：围绕上述关键问题，结合理论模拟与高温高压合成技术，取得了系列创新性成果，通过掺杂微量元素、低维化、构建异质结与转角、压力调控等手段，成功改善了黑磷基材料的稳定性及热电转换效率，为发展柔性、轻质、环境友好、低成本、高性能的新型热电材料开辟了新方向，相关研究结果发表 SCI 学术论文 10 篇，其中影响因子超过 10 的论文 6 篇，包括 <i>Advanced Energy Materials</i> 1 篇， <i>Advanced Functional Materials</i> 1 篇， <i>Small</i> 2 篇， <i>ACS Applied Material Interfaces</i> 2 篇等，参与国家自然科学基金 3 项（面上 1 项、青年 2 项）、山东省优秀青年基金 2 项、山东省泰山学者人才计划 2 项。基于该研究成果，该科研团队与中磷科技（深圳）有限公司合作，成功实现技术成果转让，到账经费 200 万。</p>
2	中国科学院合肥物质科学研究院	<p>为科学发现二的主要完成单位，学术贡献主要包括：揭示了 SnSe 材料低热导率的来源，提出通过压应力调控热电性能的新方式，成功实现了该材料在中低温区热电性能的提升，结合应力工程下的低热导率和能带工程下的高功率因子为设计新型高效热电材料提供了方案，相关研究结果发表 SCI 学术论文 2 篇，包括 <i>Journal of Materials Chemistry A</i> 1 篇， <i>ACS Nano</i> 1 篇。</p>
3		
4		