

# 中国科学院学部 科学与技术前沿论坛简报 第 104 次

学部工作局学术与文化处 编报  
《中国科学》杂志社

2020 年 5 月 11 日

---

## “二维材料”论坛综述

### 一、背景

以石墨烯为代表的“二维材料”是目前材料科学领域最为活跃的研究前沿之一，不仅带来了一系列新物理、新效应的发现，而且表现出多种优异的物理化学性质，在电子、光电子、信息、能源、生物医学、航空航天等领域具有广阔的应用前景。近年来，一系列新型二维材料相继被制备出来，而且尚有大量的二维材料亟待挖掘和开发，为新的原创性突破提供了机遇。二维材料研究是一个多学科交叉领域，材料学与物理学、化学、信息科学、能源科学等学科的结合有望在若干特色方向取得突破，无论对于基础科学研究还是推动传统产业的升级换代和战略性新兴产业的发展都具有重要意义。

### 二、论坛概况

2019 年 12 月 27~28 日，“二维材料”科学与技术前沿论坛暨中国科学院建院 70 周年学术论坛在中国科学院金属研究所（沈阳）成功举办。本次论坛由中国科学院学部主办，中国科学院学部学术与出版工作委员会、技术科学部、化学部、数学物理学部承办，中国科学院

金属研究所、物理研究所、北京大学及《中国科学》杂志社共同协办。中国科学院技术科学部成会明院士、化学部刘忠范院士、数学物理学部高鸿钧院士担任论坛的执行主席。200 余位专家参加了论坛。

本次论坛聚焦新型二维材料的预测与制备、二维材料化学与生物应用、二维材料物理与发展趋势、二维材料在能源领域的应用、二维材料器件应用与挑战等 5 个议题。与会专家开展了广泛而深入的讨论，探讨了现阶段二维材料领域面临的科学和技术挑战与对策，展望了未来发展方向。论坛为相关领域的学者搭建了高层次的交流平台，为相关领域跨学科发展的决策提供了具有前瞻性与可行性的规划与建议，特别是为在国家层面上实施“二维材料”战略进一步凝练了目标，达成了共识。

### 三、报告及研讨

#### (一) 议题 1: 新型二维材料的预测与制备

韩国成均馆大学 Young Hee Lee 院士作了题为“**2D initiatives in Korea**”的报告。基于原子与电子结构的关系，二维过渡金属硫族化合物 (TMDC) 具有不同的结构和性质，且不同结构之间可发生相互转变。三维块体异质结的生长存在严重的晶格失配问题，而二维层状材料由于层间具有弱的范德华相互作用，因此其异质结不存在或只存在很小的晶格失配，在探索新奇物理现象方面具有广阔的空间。目前他们已经制备出晶圆级单晶单层和多层石墨烯薄膜、单层 h-BN 和 WS<sub>2</sub> 以及石墨烯/h-BN 异质结。此外，他还介绍了在二维材料物性和应用方面的探索，包括二维范德华异质结太阳能电池、二维铁磁性、Coulomb drag transistor 等；重点介绍了二维范德华异质结太阳能电池的研究，指出实现载流子倍增和热载流子效应是提高太阳能电池的转换效率、克服热力学极限的关键。

清华大学段文晖院士作了题为“**新型二维材料计算设计**”的报告。计算材料学通过建模与计算，揭示材料的化学和结构因素与材料性能

和功能之间的相关机制和内在规律。基于第一性原理的材料计算是原子和电子层次的自洽计算，不依赖实验参数，适用于新材料的定量预测。报告列举了一系列基于第一性原理的新型二维材料计算设计的实例：例如，高通量计算可筛选出 1800 多种易于剥离的化合物，及其新奇性质；预测了新型二维拓扑材料——锡烯，它是一种大能隙拓扑绝缘体，具有室温量子霍尔效应；发现高居里温度的二维铁磁材料  $\text{LiFeSe}$ ，其磁性完全来源于铁，存在自发的镜面对称性破缺，是一种本征的具有量子反常霍尔效应的材料。材料计算设计用于二维光电子学的研究也非常多，如通过计算发现二维激子的线性标度律，据此发现了  $\text{GaAs}$  激子材料，并预言了一系列半激子绝缘体。报告同时指出了计算材料学的发展趋势以及在材料筛选方面所面临的挑战，并强调大体系的计算需要对材料计算基础理论进行创新。高通量计算将成为新材料探索的有力手段，与材料试验、材料数据库的密切协同和融合将成为计算材料学应用的一个重要模式。

中国科学院物理研究所杜世萱研究员作了题为“新型二维材料的制备与物性调控”的报告。扫描探针显微系统 (STM) 可获得固体表面低维纳米结构的图像、扫描隧道谱、光电磁等物性，实现单个纳米结构的物性调控。他们首次实现了石墨烯纳米结构精准的原子级可控折叠，利用 STM 探针牵引可以实现同一个石墨烯结构沿任意方向的反复折叠、堆叠角度精确可调的旋转堆垛的双层石墨烯纳米结构、准一维碳纳米管纳米结构的构筑，以及双晶石墨烯纳米结构的可控折叠及其异质结的构筑。首次提出“自然图案化”新型二维材料的概念，并在实验上构筑了两种“自然图案化”材料：具有三角形拼图图案的 1H/1T 型单层  $\text{PtSe}_2$  和具有周期性三角形孔洞的单层  $\text{CuSe}$ 。提出了异质元素在石墨烯/金属界面的插层方法，获得了石墨烯保护的、空气中稳定存在的硅烯，并构筑了原型器件。

研讨由北京大学张锦院士主持。

(1) 关于利用机器学习对二维材料进行预测的探讨。机器学习是人工智能和大数据完美结合的产物，近年来迅速发展为一个重要研究方向。与传统计算相比，机器学习方法通过分析一部分数据集和建立模型进行预测，从而学习构成数据集的规则，大大加速了材料的设计、合成、表征和应用。例如，通过机器学习，目前从 3000 多种材料中预测出 90 多种铁磁材料，包括 20 多种铁磁半导体和 20 多种铁磁半金属。建议将来在理论计算中考虑大量的二维材料实验参数，利用机器学习预测出优化的合成条件，减少大量的尝试性探索。

(2) 关于非层状材料异质结的探讨。如果不同二维材料层间相互作用较弱、没有活泼的悬键，由此构筑的异质结基本上是一种混合体系，其性质主要由二维材料各自的性质所决定。基于非层状二维材料构筑的异质结构可以通过工程化层间悬键，调控层间耦合作用，为发现新奇现象和独特应用提供了全新思路。例如，量子级联激光器是纳米级厚度的半导体异质结，通过子带跃迁、能带工程以及层间相互作用调控，实现了中远红外及太赫兹波段的半导体光源革命，成为 6G 时代的重要技术之一。

(3) 关于二维材料如何实现技术应用的探讨。材料研究者需要明确目标，打破以往从发现材料到测试性能再到寻求应用的研究模式，切实解决产业界的实际问题。以芯片应用为例，二维材料在 6G 光通讯领域具有较大优势，二维异质结构集成有望突破未来芯片的技术壁垒。为实现该目标，首先要明确各级材料体系的特性要求，然后经过理论设计寻求目标材料，最终在实验上尝试实现，从而打破产业界与学术界脱节的现象，突破瓶颈，实现技术应用。

## (二) 议题 2：二维材料化学与生物应用

张锦院士作了题为“石墨炔：一种碳家族新成员”的报告。作为一种新的碳的同素异形体，石墨炔由于存在  $sp$  和  $sp^2$  两种杂化模式，制备难度大。石墨炔的制备主要有两个方向：(1) 如何获得单层大面

积的石墨炔，并基于此测试和验证其带隙和迁移率；(2) 各种石墨炔聚集体的制备。报告介绍了通过控制层数和提高结晶度实现石墨炔高质量制备的进展，如从控制 $\sigma$ 键的旋转和副产物产生的角度出发，采用石墨烯作为模板获得 ABC 堆垛的三层石墨炔。此外，为了实现其应用，需要在任意基底上生长石墨炔。目前，已实现在硅线、铜箔和石墨烯泡沫上生长石墨炔及其与石墨烯的复合结构，可用于光电化学分解水、油水分离、光热反应等领域。通过合成石墨炔与石墨烯的异质结，利用石墨烯的导电性和石墨炔的高迁移率、三键、大孔径、有带隙、可化学设计等特性可开发出高性能催化体系。报告还对石墨炔等碳纳米材料的发展提出了若干思考，如从  $sp-sp^2-sp^3$  的键合相图可以预想一定存在其他种类的碳材料；除了偶联法，是否存在实现大面积单层高结晶性石墨炔制备的其他方法；石墨炔的放量制备以及寻找杀手铜应用仍面临很大挑战。

苏州大学刘庄教授作了题为“二维材料在生物医学中的应用探索”的报告。他介绍了二维纳米材料应用于生物医学的优势，并首次提出基于石墨烯的肿瘤光热治疗。与石墨烯相比，TMDC 具有多样的元素组成，由此带来更加丰富的物理性质，可用于光声成像、CT 成像、磁共振成像以及药物载体、光热治疗和放射治疗。肿瘤免疫疗法利用患者自身的免疫系统来抗击疾病，对抗肿瘤复发和转移，被认为是最有希望攻克肿瘤的一种创新技术。碳纳米材料具有免疫刺激的生物学效应，能够增强光热治疗后肿瘤残留物中肿瘤相关抗原的免疫原性，与免疫检查点阻断药物协同联合，可抑制远端转移瘤。报告还列举了几个金属/有机配位二维材料与肿瘤免疫疗法的案例。基于临床高血压药物分子和锌离子的配位构建二维材料，材料表面可以与  $^{32}PO_4^{3-}$  配位，实现 P-32 放射性标记，进而对局部肿瘤进行完全杀灭，逆转肿瘤内免疫抑制的微环境；联合免疫疗法，杀灭原位肿瘤的同时，有效抑制远端转移肿瘤的生长。二维有机框架材料 (MOF) 的光动力/声动

力效率显著提升，可吸附免疫佐剂，实现局部超声诱导肿瘤杀灭和免疫原性细胞死亡，杀灭原位肿瘤后激活免疫反应，抑制肿瘤转移和复发。最后，报告总结了二维材料在生物学中的应用前景和面临的挑战，指出二维无机纳米材料在人体内的应用难度很大，局部治疗后激活全身肿瘤特异性免疫反应或许是二维材料在生物医学领域应用的一个突破口。

研讨由段文晖院士主持。

**(1) 关于石墨炔热力学与动力学稳定结构的探讨。**目前石墨炔难以获得大面积高质量的晶体，溶液合成的石墨炔存在很多副产物，表面吸附很多分子。针对石墨炔的制备既要考虑动力学因素，也要考虑热力学因素。目前已知的石墨炔结构是否是热力学稳定的以及是否需要引入缺陷才能获得稳定的结构，需要先从理论计算上予以证实。例如，与碳 6 圆环相比，5/7 圆环能垒较高，但是碳纳米管就是由这几种结构单元组成的稳定体系。通常情况下，无缺陷的晶体结构是热力学上最稳定的，但是动力学因素会影响晶体的生长，产生与材料自身结构相关的晶体缺陷。因此，在动力学合成或制备过程中，石墨炔的完美结构或许并非稳定结构。如果能够确切知道缺陷的种类、分布，就可进行理论预测，对控制石墨炔的高质量结晶至关重要。

**(2) 关于二维材料热力学非稳定相的探讨。**理论上，热力学稳定相数量是有限的，而热力学非稳定相却是无限的。制备热力学非稳定相存在诸多挑战，但为拓展二维材料体系和发现新特性的材料载体提供了更多选择。目前，通过控制动力学因素能够获得二维热力学非稳定相材料，例如金属性的 1T' 相 TMDC 材料；另外这些热力学非稳定相利用光、热等条件很容易制备异质结。因此，需要加强对热力学非稳定相的研究和探索。

**(3) 关于二维材料在生物医学应用中的优势的探讨。**在光热治疗方面，二维材料的光热转化效率较高。相比单分子而言，在二维材

料上分散性好的免疫佐剂的免疫激活效果显著提高。金属/有机配位二维材料由临床批准的药物分子构成，可体内降解代谢、生物安全性有较好的保证。

### (三) 议题 3: 二维材料物理与发展趋势

诺贝尔物理学奖获得者、石墨烯的发现者之一，英国曼彻斯特大学 **KS Novoselov** 院士作了题为“**van der Waals heterostructures**”的报告。具有不同能带结构和电学性质的二维层状材料为通过层层堆垛来人工制备范德华异质结构提供了可能。石墨烯/h-BN 范德华异质结构在制备高迁移率石墨烯器件以及高开关比隧穿晶体管等方面具有独特的优势。通过转动使石墨烯与 h-BN 错开特定角度时，一定的晶格适配度导致其产生超晶格，即摩尔条纹。摩尔条纹的出现使异质结构成为研究新奇物理现象的平台，包括二级狄拉克费米子、朗道能级、Brown-Zak 震荡等。h-BN/石墨烯/h-BN 三层范德华异质结构可以实现超级-超晶格，即超摩尔条纹，展示出更复杂的物理现象。此外，可将二维 TMDC 半导体与石墨烯和 h-BN 制作成发光二极管，在不同二维 TMDC 构成的异质结构中观察到杂化激子等物理现象。报告最后介绍了二维铁磁材料，由于维度的降低，不同类型铁磁材料在二维下表现出不同的性质，为制作磁隧穿结以及近邻效应器件奠定了基础。目前已实现磁滞辅助的隧穿器件以及弹道霍尔磁力仪，对新型二维器件的发展至关重要。

清华大学薛其坤院士作了题为“非常规高温超导到底非常规在什么地方？”的报告，生动地讲述了非常规高温超导的机制，并简单地回顾了超导的发展历史。他指出，作为介绍超导机制的经典理论，BCS 理论得出的超导材料的超导转变温度  $T_c$  的极限是  $\sim 40$  K。然而，高温超导的出现突破了这个极限。如铜基高温超导体的  $T_c$  可达 77 K 甚至 130 K。关于高温超导的机制争论不休，目前公认的最重要结论是，高温超导是 d-波超导而不再是 s-波的常规低温超导。 $T_c$  与掺杂浓度存在

依赖关系，超导相图异常复杂，极大地阻碍了非常规高温超导机制的研究。报告指出非常规高温超导的核心问题就是二维问题，其从结构上看是由超导层和非超导层相互堆叠而成的超晶格。薛院士提出，研究高温超导的关键是获得单独的超导层。其科研团队将原子层厚度的CuO或FeSe超导层镀在陶瓷材料上，实现了对超导层的直接测量，发现原子厚度的CuO或FeSe均为高温超导。该发现与高温超导领域达成的共识，即非常规高温是d-波的结论，并不一致，但与解释常规超导的s-波一致。其团队进一步通过相敏实验证实了该结论。薛院士最后指出，原子层厚度的二维超导体为非常规高温超导机制研究提供了新的思路和平台，关于非常规高温超导常规在什么地方，以及如何将常规超导体变成非常规高温超导体将是两个重要的研究方向。

**研讨：由成会明院士主持。**

**(1) 关于二维材料研究体系拓展的讨论。**二维材料的内涵一直在发生变化，从早期的石墨烯逐渐拓展到后来的二维原子晶体，包括二维TMDC及h-BN等。目前，二维材料还没有十分明确的物理化学定义，主要从形貌和厚度上来判定一个材料是否属于二维体系，以及厚度薄到一定程度后是否表现出与三维块体完全不一样的性质。例如块体的拓扑绝缘体，厚度上虽然是三维结构，但是其电子的关联性特别强，符合二维材料的电子态特征；因此，块体拓扑材料和薄膜属于二维电子体系，可以考虑纳入二维材料范畴。最近，超薄非层状材料，包括各种稀土、金属氧化物、氮化物的合成也取得了很大进展，虽然区别于广泛研究的石墨烯、h-BN等二维层状材料，但其在物理化学性质上也表现出与块体材料完全不一样的性质。

**(2) 关于二维材料异质结构中新物理探索的讨论。**二维材料构筑的范德华异质结构是人工制造的一类新型材料，存在数以万计的可能组合。理论预测后，再进行可控生长和组装，有望在新物性探索方面获得突破。目前，在魔角石墨烯中观察到超导性，而通过堆垛构筑



的其他二维材料超晶格也表现出丰富的物理现象。因此，异质结构是探索二维材料新物理现象研究中值得关注的领域。

(3) 关于二维材料热运输的讨论。目前，石墨烯最受关注的应用是作为热运输材料，石墨烯及其与聚合物复合的导热膜已在智能手机等电子设备中崭露头角。但是，石墨烯的热传导主要是声子的传输，对材料层状结构和表面状态非常敏感，微弱的变化就会对声子的分布或传输产生影响。因此，需要对声子的动力学传输过程、二维材料在各种环境下的热运输等科学问题进行深入的研究与探讨。

(4) 二维材料能带结构表征技术的讨论。目前，二维材料的制备技术已经比较成熟，在尺寸上可以满足 micro-ARPES 表征的要求。但大的比表面积使二维材料对小分子具有极强的吸附作用，且脱附困难，从而影响最终的表征结果。因此，如何获得表面清洁的二维材料是更好地表征其能带结构的关键。

#### (四) 议题 4：二维材料在能源领域的应用

中国科学技术大学谢毅院士作了题为“**Opportunity of 2D photocatalysts for promoting CO<sub>2</sub> reduction**”的报告。她指出仅有几个原子层厚度的二维材料具有与块体材料不一样的能带结构，更有利于电子的转换和传输，而超大的比表面积为出色的化学活性和改性提供了机会，因此其在光催化领域表现出独特优势。但是二维结构破坏了原有晶体厚度方向上的长程有序性，导致其表面出现了体相材料不会存在的空位缺陷，因而难以使用常规手段对其进行表征。谢院士团队采用先进的 XAFS 技术实现了对二维晶体结构和空位特征的表征，并利用二维材料吸收太阳光将 CO<sub>2</sub> 转换成有机小分子燃料。相比于块体材料，二维光催化材料有效的光吸收、短的载流子扩散长度、快的电子传输、丰富的活性位、高活性的位点，使得光吸收效率、光生载流子分离效率、表面还原反应效率全面提升，从而实现了 CO<sub>2</sub> 的高效光催化还原。此外，通过引入空位，在二维半导体中引入中间带隙，

可实现多种光催化剂在红外光波段的吸收并用于 CO<sub>2</sub> 还原；通过设计双金属空位二维光催化材料可实现 CO<sub>2</sub> 还原的高效率和产物的高选择性。最后，报告指出了二维催化剂仍然面临诸多挑战，主要包括二维催化剂的精准制备和宏量制备、精细结构表征及其结构和催化稳定性等。

中国科学院化学研究所李玉良院士作了题为“石墨炔研究：回顾与进展”的报告。由李院士团队首先合成的石墨炔是碳材料家族的新成员，由于其特殊的电子和化学结构，受到广泛的国际关注，正形成一个新的研究热点和领域。经过 8 年的研究，他们从创新理念出发，建立了石墨炔基材料自组装和自组织方法学，结合碳基材料的结构和生长规律，并考虑结构和能量等科学问题，实现了聚集态结构从一维到二维的可控制备，为石墨炔的性能研究和应用探索提供了平台。石墨炔 sp+sp<sup>2</sup> 的独特键合方式，为构建绿色化学可持续能源体系带来了新的契机。石墨炔基材料作为催化剂在电催化制氢、制氨等反应中表现出高的催化效率，甚至远优于商业催化剂。石墨炔无金属催化剂和异质结催化剂由于丰富的活性位点也在电催化析氢等领域表现出优异的性能。此外，石墨炔用于锂电池负极时具有高的能量密度，用于甲醇燃料电池中可有效抑制甲醇渗透，显著提高电池稳定性。探索石墨炔及其聚集态结构在能源、催化、光学、电学、光电等领域的基础科学问题以及潜在应用是该领域的挑战和发展趋势。

研讨由段文晖院士主持。

(1) 二维材料在光/电催化应用中独特优势的讨论。二维材料在光催化中的独特优势是它能使载流子扩散的距离变得很短，因此光生载流子可以很快分离，避免了在体相内的复合；其表面的缺陷也有利于光生载流子的分离。此外，二维材料具有明确的表面原子结构，以它作为模型体系可以更容易阐述光催化机理。相比于光催化，二维材料在电催化中少了光吸收过程，步骤更简单，只存在电子的转移和表

面化学反应，因此没有在光催化中的优势突出。

**(2) 关于石墨炔的可控制备及其在能源领域应用的讨论。**理论上，石墨炔家族有多个成员，目前合成出的石墨炔是石墨二炔。单炔聚合时要克服很大的位阻，导致单体聚合后活性非常高，难以稳定存在，因此其他结构石墨炔的合成还有很大挑战。最近国际上报道的十八环炔的合成为其他结构石墨炔的合成带来了希望。目前已在铜基底表面合成了厘米级石墨炔薄膜，但存在缺陷或破裂。这主要是因为石墨炔的生长过程是催化偶联的过程，其单体在六个方向都可发生偶联，随着偶联的不断发生，样品尺寸变大，但也很容易发生破裂，目前有序结构的尺寸一般为 100~200 nm。石墨炔已经在电池负极的应用中表现出明显的潜力，具有定向结构的石墨炔垂直阵列材料用于电池电极时可能会发挥更大的优势。

**(3) 关于二维材料在能源器件中作用机制的讨论。**二维材料无论应用在光/电催化还是电池中，都涉及复杂的化学反应。揭示二维材料在其中发挥的作用和物理机制，需要多学科的交叉融合，并运用多种高精度仪器设备进行表征，包括原位观察电池充放电过程，实时采集反应物的种类、浓度等信息，进而结合理论分析，研究它们之间的相关性。

### **(五) 议题 5: 二维材料器件应用与挑战**

中国科学院化学研究所刘云圻院士作了题为“二维纳米材料发展的一些思考”的报告。刘院士指出二维材料是一类新型材料，具有替代传统材料、提高器件性能、节省成本的应用潜力；对二维材料的研究可以发现新的现象、发展新的应用。他以 MOF 与有机/金属框架材料 (COF) 为例，介绍了该类材料的结构、制备方法，在气体选择性分离、高性能超级电容器、生物医药合成以及光电子器件等方面的前沿应用。此外，围绕“石墨烯可控生长机制”、“石墨烯电学性能调控”和“利用石墨烯特性开发器件新应用”三大关键科学问题，他详细介

绍了主要研究进展。新催化体系的提出和二维晶体生长过程的调控，开拓了大面积石墨烯的新合成方法，实现了其可控制备；采用在不同的介电层上直接生长多晶与单晶石墨烯的方法，开发出与硅加工工艺兼容的无金属催化直接制备石墨烯晶体技术；通过控制掺杂调控石墨烯的电学性能，探索石墨烯结构与性能调控的新手段，拓展石墨烯在电学器件领域的应用，促进相关学科的发展。最后他指出，结构决定性能，性能决定应用，因此，开发新型二维纳米材料，实现其大规模、高质量制备，对于研究新现象、新物理、开拓新应用具有重要意义。

南京航空航天大学郭万林院士作了题为“二维材料：从界面到器件”的报告，从能量尺度生动地介绍了其研究团队在纳米材料器件以及水伏效应方面取得的研究进展。由于范德华力是一种弱分子间作用力，如何确定二维材料在范德华异质结中的相互作用是一项具有挑战性的工作。他们分别采用石墨烯和 h-BN 包覆的 AFM 针尖，直接测量其与不同二维材料之间的作用关系，给出了二维材料间相互作用力的次序，为二维材料的转移与堆垛提供了理论指导。针对石墨烯等二维覆层体系的流-固-电耦合开展的研究表明，液滴在涂覆单层石墨烯的固体表面运动会产生两种新的动电效应：与液滴运动速度成正比的、拖曳液滴发电的“曳势”；液面沿涂覆石墨烯的固体表面上下波动产生与波动速度成正比的“波动势”。他们总结提出了双电层边界运动发电的新动电效应理论，实现了基于“曳势”的书画传感、云雾雨滴能量收集等新技术。此外，比较了人大脑的智能行为与水-离子体系、固体-电子体系的相似之处，提出了智能介质力学理论的研究方向，鼓励年轻科研人员投入这一新兴学科的研究。

清华大学范守善院士作了题为“深耕基础材料，迎接未来挑战”的报告，提出了对碳纳米材料研究与产业化发展的看法。在现代智能产业的架构中，由物质科学与工程科学支撑的材料与装备是科技发展的关键，但材料研究却面临诸如材料研究突破的长期性与不可预期性、

显示度不高、评价体系不完善、对人才吸引力弱以及人员不稳定等困境。碳纳米材料由于其独特而优异的电子结构，光、电、力学及导热性质，在场效应晶体管、光电、传感及超强超轻复合材料等领域有重要的发展前景，并且有可能成为未来集成电路的后备材料。材料的可控/宏量/低成本制备工艺与装备，可为技术研发和规模应用提供可靠的支持，是目前碳材料领域最为重要的研究方向。同时，他指出材料与装备之间相辅相成、相得益彰。为满足材料和器件的结构与性能需求，需要发展新的制备技术与装备，而新的制备技术与装备又为人们探索新型材料和器件提供了手段。最后，他生动地以“材-才-财”的比喻，展望了 21 世纪碳纳米材料的前景，强调了科研工作突破性进展的偶然性，鼓励青年科研人员要了解自身研究的长处，不断修正研究方向。

研讨由谢毅院士主持。

(1) 关于二维材料替代硅在器件中应用的探讨。人们用 70 余年研究硅材料，从材料到化工再到装备，建立了庞大的工业体系。以现有的技术，要建立这样的二维材料体系需要大量的资金投入。20 世纪 80 年代，IBM 制定了宏大的计划，尝试用砷化镓替代硅，利用其直接能隙的特点实现光电器件的集成；但是，该计划以失败告终。硅的集成依靠常规的氧化处理得到氧化硅来获得介电层，而砷化镓则需要沉积一层额外的介电材料来达到相同的作用，导致成本大幅增加。在器件领域，二维材料虽然已经有了一些可以与硅基器件相比拟的性能结果，但是大多并没有充分发挥其二维结构带来的独特作用。仅仅十余年的发展历程还无法对成熟的硅工业体系造成冲击，二维材料的研究应着眼于发展不可替代的应用。

(2) 关于二维材料在水伏器件中应用的探讨。水在二维材料堆叠形成的孔道中的输运很快，是制备高性能水伏效应器件的新思路。但是，均匀、定向排列的孔结构的规模制备仍面临挑战。此外，水伏

效应的物理机制涉及从微观到宏观多个层次的界面物理和力学过程，因此，建议具有物理、化学、器件和计算等背景的科研人员共同介入该领域，通过理论和实验相结合来设计并制备多孔、定向的二维材料结构，实现水伏器件的性能突破。

**(3) 关于石墨烯商业应用的探讨。**现阶段，与石墨烯相关的商业化应用正在逐步开展。如华为公司生产的 Mate20 系列手机使用了石墨烯散热膜，是一个很好的石墨烯商业应用范例。此外，科研人员针对石墨烯在光电器件、生物医疗、能源转换、防腐涂料等领域的应用也进行了广泛探索，并开发了多种相关产品；但是，仍然缺乏高端应用，尤其是被寄予厚望的电子和光电子领域的应用。该领域应用的突破不仅需要大量的资金投入，而且技术门槛高。因此，石墨烯的商业应用仍面临严峻的挑战。

## 四、共识和建议

本次论坛邀请了来自物理、化学、材料、信息、能源和理论计算等不同领域的专家围绕“二维材料”主题进行了深入探讨，就二维材料的发展目标、重要研究方向以及存在的关键科学问题等达成以下共识并提出了相关建议：

**二维材料的制备决定未来。**在过去的十几年中，石墨烯等二维材料的研究取得了显著进步，但宏观尺度二维材料的性能较机械剥离样品还存在很大的差别，导致其在应用中的优势不明显，究其原因是材料的质量和均一性较差所造成的。因此，二维材料的大面积、高质量、可控制备是决定能否发挥其独特性能和实现不可替代应用的前提和关键，而探索新的制备方法、发展新装备可为二维材料的研发与规模化应用提供可靠的支撑。

**加强新型二维材料的探索。**新型二维材料是新物性和新应用的载体。由于结构和成分不同，从石墨烯到 TMDC、黑磷烯、石墨炔，每种新型二维材料的出现都带来了一系列新物性、新效应和新应用。二

维材料体系极其丰富，目前已知的层状材料有 4000 多种，其中理论预测易于剥离的化合物有 1800 多种，为新奇物性的发现提供了无限可能。此外，应加强自然界不存在母体材料的层状二维材料、二维材料的热力学非稳定相以及非层状二维材料的研究。

**新型二维材料异质结构构筑。**二维层状材料构筑的范德华异质结构是人工创造的一类新型材料，组合方式多种多样。通过理论预测，再进行可控生长和组装，有望在新物性和应用探索方面取得突破。通过工程化非层状二维材料的悬键，使相邻二维材料发生强相互作用，是构建新型二维材料异质结构的另一个重要研究方向，为发现新奇现象和独特应用提供了新思路

**探索二维材料不可替代的应用。**二维材料在诸多领域表现出良好应用前景，但大多没有充分发挥其独特的性能优势。尽管目前在器件方面已取得了一些可以与硅基器件相比拟的性能结果，但实现的成本巨大。二维材料的应用应着眼于发展“不可替代”的应用，解决“卡脖子”问题。其中，如何使二维材料独特的优异性能在宏观尺度得到充分发挥，是实现其不可替代应用需要解决的关键问题之一。

**加强二维材料的理论计算研究。**理论计算在新材料研究中发挥着越来越重要的作用，不仅可以预测新材料，而且可以实现对新奇性质的筛选。高通量计算为新型二维材料的探索提供了有力手段，可大大加速具有新奇物性的二维材料的设计、合成、表征和应用。此外，应加强二维材料生长实验与理论计算的结合，利用机器学习预测、优化合成条件，减少大量尝试性的探索。

**构建基础研究与产业应用的桥梁。**相比于基础研究的快速发展，二维材料产业化应用还面临诸多挑战。这不仅需要多学科的高度融合，解决应用中遇到的科学与技术问题，而且需要构建基础研究与产业应用的桥梁，将基础研究和实际应用结合到一起。针对特定应用目标，建立按照需求进行材料设计与合成的研究范式，无论对于基础科学研

究还是推动产业发展都具有重要意义。

与会专家还对比了国内外二维材料的发展现状，认为国内二维材料的发展已经步入了国际前列，形成了一支有影响力的研究队伍，取得了一系列具有国际水平的创新性成果，在某些研究领域已处于国际领先地位，如发现了拥有中国标签的新型二维材料——石墨炔，起到了基础科学研究引领示范作用。国内在二维材料领域的投入也较大，科研与产业布局分布范围广。在企业的参与下，已具备了二维材料规模制备的能力，开发出多种基于二维材料的产品，包括石墨烯粉体材料与透明导电薄膜、锂离子电池用导电添加剂等。但是，国内二维材料的发展也存在很多问题：大多为跟踪式研究，原始创新成果较少；缺乏工匠精神，并未真正解决关键领域的卡脖子问题；在应用开发上，更多的是提出概念式产品，缺少真正的高品质产品和杀手铜级应用；缺乏整体布局，投入产出较低。因此，未来5~10年应加强顶层设计，综合考虑国内各单位在二维材料领域已形成的特色和优势，推动各学科的高度融合与交叉合作，对本论坛凝炼的目标和共识进行重点投入和集中攻关，引领我国二维材料基础研究和产业化进程。

本次论坛充分发挥了中国科学院学部对我国科学技术前沿的引领作用，进一步明确了未来5~10年二维材料的发展思路和目标，为相关领域的学者搭建了高层次的交流平台。论坛上集中自由讨论的形式也拉近了资深科学家与青年研究人员之间的距离，激励了青年人才的成长。本次论坛将为解决二维材料领域的关键科学问题、促进二维材料的快速发展与应用发挥积极作用。

（作者：任文才，中国科学院金属研究所研究员；杜金红，中国科学院金属研究所研究员；徐川，中国科学院金属研究所研究员；刘志博，中国科学院金属研究所副研究员；张鼎冬，中国科学院金属研究所助理研究员；成会明，中国科学院院士，中国科学院金属研究所研究员）

联系方式：中国科学院学部工作局学术与文化处，010-59358366