

个人简历

一、基本信息

姓名：袁俊辉
出生年月：1990年3月
籍贯：湖北利川
电子邮件：yuanjh90@hust.edu.cn
yuanjh90@163.com

性别：男
政治面貌：中共党员
健康状况：良好
联系电话：15071474226



教育经历：

- 2020.10-2022.12 华中科技大学 博士后（合作导师：缪向水教授）
- 2016.09-2020.06 华中科技大学 微电子学与固体电子学（工学博士）
（2017.08-2017.11 清华大学微电子所任天令教授组交流学习）
- 2013.09-2016.06 武汉理工大学 物理学（理学硕士）
- 2009.09-2013.06 武汉理工大学 光信息科学与技术（理学学士）

研究方向：

1. 新型存储器中的微观机理分析

忆阻器（Memristor），铁电存储器（FeRAM）等是目前最具应用前景的下一代非易失性存储器，但目前距离规模产业化仍有很大距离，其根本原因是还有很多关键问题亟需解决，特别是缺乏微观物理机制的深入认识，这对于开发其非易失性信息存储具有重要的指导意义。基于量子力学的第一性原理计算可以从材料出发，深入认识其本征特性，并结合材料基因工程的思想进行材料筛选，然后通过建立贴近实际尺寸的电极与介质材料的界面或器件模型更进一步模拟分析在实际器件中所存在的基础问题，最终达到理论指导实验的目的。目前基于此方向的研究已在 *Advanced Electronic Materials*, *IEEE Electron Device Letters*, *Annalen der Physik*, *Journal of Materials Chemistry C*, 2021 *IEDM*, 2019 *VLSI Technology* 等期刊/会议上发表多篇 SCI 论文/会议论文。此外，HfO₂ 铁电性起源的最新研究成果已投稿到 *Chemistry of Materials*（[Yuan J-H, et al. arXiv:2201.00210, major revision](#)）。

2. 新型电子结构计算方法 DFT-1/2 研究

现代微电子工艺建立在以硅基半导体或其他氧化物绝缘体为基础的 CMOS 工艺上，而目前基于密度泛函理论的带隙计算存在严重低估问题，严重阻碍了基于电子结构的理论研究。而基于自能势修正的 LDA-1/2 新型能带计算方法为解决这一问题带来了新的机会，其能够在较低水平的计算资源消耗下完成超过 500-1000 原子级别的理论计算，使得基于第一性原理计算来完成器件级别的超大尺度模拟成为可能。原始 LDA-1/2 计算方法存在应用规则不

明确以及在共价半导体计算中结果不理想的问题，我们首次创造性的提出了以球壳函数代替原始球函数截断的改进计算方法 **shell-DFT-1/2** (**shDFT-1/2**)，在明确应用规则的前提下成功解决了大部分共价半导体的能带计算问题，使得 **shDFT-1/2** 能够同时兼容离子半导体和共价半导体，为该计算方法的进一步推广奠定了基础，相关成果已发表在 **SCI** 期刊 *Computational Materials Science* 和 *Journal of Physics Communications* 上。自 **shDFT-1/2** 计算方法的论文于 2018 年发表以来，在国际和国内引起了一定的反响。奥地利维也纳工业大学 **BlaHa** 教授小组开发的第一性原理计算软件 **Wien2K** (全势线性缀加平面波计算领域世界领先的软件) 在新版中也引入了 **shDFT-1/2** 计算方法。此外，北京航空航天大学开发的高通量材料计算软件 **ALKEMINE** 也采用了 **shDFT-1/2** 算法，并作为其材料高通量带隙计算的核心算法之一 (<https://alkemine.cn>)。目前基于算法的应用研究已在 *Nature Communications*, *Advanced Materials*, *Advanced Functional Materials*, *Computational Materials Science* 等期刊上发表多篇论文。

3. 低维先进功能材料的理论研究

二维材料由于其在新奇物理，化学催化和生物应用等领域的潜在应用前景而被广泛研究和关注。然而二维材料的合成依赖于众多外在条件，如压强，温度，元素配比等，难以在实验上穷尽所有可能。并且实验研究存在周期长和资源需求大等问题，而计算预测则可以在现有理论框架的指导下设计出更多潜在的具有各种新颖特性的“不存在”新材料。一方面可以为实验合成提供理论指导，另一方面也可以先于实验研究，为未来提供更多的可能性。在这方面目前已有部分工作发表于 *Nanoscale*, *Applied Physics Letters*, *Applied Surface Science* 等 **SCI** 期刊上。

另一方面，材料物性的探索是一个长期且复杂的过程，需要长时间的研究和积累。理论预测则可以在充分节约资源和时间的前提下帮助研究人员尽可能地加深对于特定材料物性的认识，探索其更广泛的应用潜力。因此，基于第一性原理计算的理论预测对于发现和挖掘新颖功能材料具有重要的指导意义。目前在这方面本人也有部分工作已在 *ACS Applied Materials & Interfaces*, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, *Nanoscale*, *Journal of Materials Chemistry C* 等 **SCI** 期刊上发表。

二、科研成果

目前在国际期刊上已发表 40 余篇 **SCI** 论文，其中以第一作者/共同第一作者/通讯作者或导师第一作者、本人第二作者在 *Advanced Functional Materials*, *ACS Applied Materials & Interfaces*, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, *Nanoscale*, *Journal of Materials Chemistry*

C, *Advanced Electronic Materials*, *Applied Surface Science*, *Applied Physics Letters* 等期刊上已发表论文 28 篇, 包括 SCI 国际 A 区论文 16 篇 (其中包含中科院 1 区论文 8 篇), 国际 B 区论文 9 篇, 其他论文 3 篇。在包括 *Nature Communications*, *Advanced Materials*, *Advanced Science* 等期刊上发表了 20 余篇合作论文。参加国际会议多次, 在 2019 *VLSI Technology* 和 2021 *IEDM* 微电子顶级会议上发表合作会议论文 2 篇。Google Scholar 引用次数为 1336, H 指数 20, i10 指数 31。目前有 5 篇第一作者/共同第一作者/通讯作者论文在审稿/返修阶段。

1. 已发表或返修论文 (视同一作论文)

1. Cui H, Yang S, **Yuan J-H***, Li L-H, Ye F, Huang J, Xue K-H, Miao X-S. Shell DFT-1/2 method towards engineering accuracy for semiconductors: GGA versus LDA, *Computational Materials Science*, 2022, 213, 111669. (IF 3.572, JCR Q2, 通讯作者, 被引 1 次)
2. Zhang P, **Yuan J-H***, Fang W-Y, Li G, Wang J. Two-dimensional V-shaped PdI₂: Auxetic semiconductor with ultralow lattice thermal conductivity and ultrafast alkali ion mobility, *Applied Surface Science*, 2022, 601, 154176. (IF 7.392, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 被引 1 次)
3. **Yuan J-H**, Xue K-H, Wang J, Miao X-S. Designing stable 2D materials solely from VIA elements, *Applied Physics Letters*, 2021, 119, 223101. (IF 3.971, JCR Q1, Top 期刊, 被引 1 次)
4. Li Z-H, Wang* J, **Yuan J-H***. Prediction of two-dimensional M₂As (M = Mn, Fe) with high Curie temperature and large perpendicular magnetic anisotropy, *Computational Materials Science*, 2021, 200, 110838. (IF 3.572 JCR Q2, 通讯作者, 被引 2 次)
5. **Yuan J-H**, Mao G-Q, Xue K-H, Wang J, Miao X-S. A new family of two-dimensional ferroelastic semiconductors with negative Poisson's ratios, *Nanoscale*, 2020, 12, 14150-14159. (IF 8.307, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 被引 19 次)
6. Xia M[#], **Yuan J-H[#]**, Niu G, Du X, Yin L, Pan W, Luo J, Li Z, Zhao H, Xue K-H, Miao X-S, Tang J. Unveiling the structural descriptor of A₃B₂X₉ perovskite derivatives toward X-ray detectors with low detection limit and high stability, *Advanced Functional Materials*, 2020, 1910648. (IF 19.924, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 共同第一作者, 被引 74 次)
7. **Yuan J-H**, Li L-H, Zhang W, Xue K-H, Wang C, Wang J, Miao X-S, Zeng X-C. Pt₅Se₄ monolayer: A highly efficient electrocatalyst towards hydrogen and oxygen electrode reactions, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2020, 12(12): 13896-13903. (IF 10.383, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 被引 20 次)
8. Li H-Y[#], Huang X-D[#], **Yuan J-H[#]**, Lu Y-F, Wan T-Q, Li Y, Xue K-H, He Y, Xu M, Tong H, Miao X-S.

- Controlled memory and threshold switching behaviors in a heterogeneous memristor for neuromorphic computing, *Advanced Electronic Materials*, 2020, 6, 2000309. (IF 7.633, JCR Q1, 共同第一作者, 被引 24 次)
9. Xia M[#], **Yuan J-H[#]**, Luo J, Pan W, Wu H, Chen Q, Xue K-H, Miao X, Niu G, Tang J. Two-dimensional perovskites as sensitive strain sensors, *Journal of Materials Chemistry C*, 2020, 8, 3814-3820. (IF 8.067, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 共同第一作者, 被引 15 次)
 10. **Yuan J-H**, Xue K-H, Wang J-F, Miao X-S. Gallium thiophosphate: An emerging bidirectional auxetic two-dimensional crystal with wide direct band gap, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2019, 10(15):4455–4462. (IF 6.888, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 被引 20 次)
 11. **Yuan J-H**, Cresti A, Xue K-H, Song Y-Q, Su H-L, Li L-H, Miao N-H, Sun Z-M, Miao X-S. TIP₅: an unexplored direct band gap 2D semiconductor with ultra-high carrier mobility, *Journal of Materials Chemistry C*, 2019, 7(3):639–644. (IF 8.067, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 被引 23 次)
 12. Song Y-Q[#], **Yuan J-H[#]**, Li L-H, Xu M, Wang J-F, Xue K-H, Miao X-S. KTIO: a metal shrouded 2D semiconductor with high carrier mobility and tunable magnetism, *Nanoscale*, 2019, 11(3):1131–1139. (IF 8.307, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 共同第一作者, 被引 33 次)
 13. **Yuan J-H**, Xue K-H, Chen Q, Fonseca LRC, Miao X-S. *Ab initio* simulation of Ta₂O₅: A high symmetry ground state phase with application to interface calculation, *Annalen der Physik*, 2019, 531(8):1800524. (IF 3.276, JCR Q1, 被引 5 次)
 14. **Yuan J-H**, Song Y-Q, Chen Q, Xue K-H, Miao X-S. Single-layer planar penta-X₂N₄ (X = Ni, Pd and Pt) as direct-bandgap semiconductors from first principle calculations, *Applied Surface Science*, 2019, 469:456–462. (IF 7.392, JCR Q1, Top 期刊, 被引 33 次)
 15. **Yuan J-H**, Zhang B, Song Y-Q, Wang J-F, Xue K-H, Miao X-S. Planar penta-transition metal phosphide and arsenide as narrow-gap semiconductors with ultrahigh carrier mobility, *Journal of Materials Science*, 2019, 54(9):7035–7047. (IF 4.682, JCR Q2, 被引 15 次)
 16. **Yuan J-H**, Yu N, Wang J, Xue K-H, Miao X. Design lateral heterostructure of monolayer ZrS₂ and HfS₂ from first principles calculations, *Applied Surface Science*, 2018, 436:919–926. (IF 7.392, JCR Q1, Top 期刊, 被引 31 次)
 17. **Yuan J-H**, Yu N, Xue K-H, Miao X. Stability, electronic and thermodynamic properties of aluminene from first-principles calculations, *Applied Surface Science*, 2017, 409:85–90. (IF 7.392, JCR Q1, Top 期刊, 被引 49 次)
 18. **Yuan J-H**, Y N, Xue K-H, Miao X. Surface regulated arsenene as Dirac materials: From density functional calculations, *Applied Surface Science*, 2017, 394, 625–629. (IF 7.392, JCR Q1, Top 期刊,

被引 15 次)

19. **Yuan J-H**, *et al.* Ideal strength and elastic instability in single-layer 8-*Pmmn* borophene, *RSC Advances*, 2017, 7(14):8654–8660. (IF 3.789, JCR Q2, 被引 42 次)
20. **Yuan J-H**, Chen Q, Fonseca LRC, Xu M, Xue K-H, Miao X-S. GGA-1/2 self-energy correction for accurate band structure calculations: the case of resistive switching oxides, *Journal of Physics Communications*, 2018, 2, 105005. (新刊, 被引 56 次)
21. Xue K-H, **Yuan J-H**, Fonseca LRC, Miao X-S. Improved LDA-1/2 method for band structure calculations in covalent semiconductors, *Computational Materials Science*, 2018, 153:493–505. (IF 3.572, JCR Q2, 导师第一作者, 被引 48 次)
22. Li L-H[#], **Yuan J-H**[#], Xue K-H, Xu M, Xu M, Wang J-F, Miao X-S. Synergic effect in a new electrocatalyst Ni₂SbTe₂ for oxygen reduction reaction, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2020, 124(6):3671–3680. (IF 4.177, JCR Q1, Top 期刊, 共同第一作者, 被引 7 次)
23. Fang W-Y, Li P-A, **Yuan J-H**^{*}, Xue K-H, Wang J-F. Nb₂SiTe₄ and Nb₂GeTe₄: Unexplored 2D ternary layered tellurides with high stability, narrow band gap and high electron mobility, *Journal of Electronic Materials*, 2020, 49(2):959–968. (IF 2.047, JCR Q3, 通讯作者, 被引 20 次)
24. Zhu Y-L[#], **Yuan J-H**[#], Song Y-Q, Wang S, Xue K-H, Xu M, Cheng X-M, Miao X-S. Two-dimensional silicon chalcogenides with high carrier mobility for photocatalytic water splitting, *Journal of Materials Science*, 2019, 54(17):11485–11496. (IF 4.682, JCR Q2, 共同第一作者, 被引 18 次)
25. Zhu Y-L[#], **Yuan J-H**[#], Song Y-Q, Xue K-H, Wang S, Lian C, Li Z-N, Xu M, Cheng X-M, Miao X-M. Promising photocatalysts with high carrier mobility for water splitting in monolayer Ge₂P₄S₂ and Ge₂As₄S₂, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, 44(39):21536–21545. (IF 7.139, JCR Q2, Top 期刊, 共同第一作者, 被引 8 次)
26. Tang P[#], **Yuan J-H**[#], Song Y-Q, Xu M, Xue K-H, Miao X-S. BaAs₃: a narrow gap 2D semiconductor with vacancy-induced semiconductor–metal transition from first principles, *Journal of Materials Science*, 2019, 54(19):12676–12687. (IF 4.682, JCR Q2, 共同第一作者, 被引 4 次)
27. 袁俊辉, 谢晴兴, 余念念, 王嘉赋. 单层 SbAs 和 BiSb 的表面修饰调控, *物理学报*, 2016, 65(21), 217101. (IF 1.04, 国内 A 区, JCR Q3, 被引 2 次)
28. 袁俊辉, 高博, 汪文, 王嘉赋. Y-Cu 共掺杂 ZnO 电子结构与光学性质的第一性原理计算, *物理化学学报*, 2015, 31 (7), 1302-1308. (IF 6.253, 中文核心 B 区, JCR Q2, 被引 35 次)
29. **Yuan J-H**, Mao G-Q, Xue K-H, Bai N, Wang C, Cheng Y, Lyu H, Sun H, Wang X, Miao X. Ferroelectricity in HfO₂ from a chemical perspective, *Chemistry of Materials*, major revision. (arXiv:2201.00210) (IF 10.508, JCR Q1, Top 期刊, 被引 1 次, 目前正在返修)

30. **Yuan J-H**, Xue K-H, Miao X. Two-dimensional ABC_3 (A = Sc, Y; B = Al, Ga, In; C = S, Se, Te) with intrinsic electric field for photocatalytic water splitting, *International Journal of Hydrogen Energy*, major revision. (IF 7.139, JCR Q2, Top 期刊, 目前正在返修)
31. **Yuan J-H**, Zhu Y-L, Fang W-Y, Yang S-X, Xue K-H, Bai N, Ye L, Cheng X-M, Miao X. Two-dimensional AMgB (A= Na, K; B = P, As, Sb, Bi) with high thermoelectric performances, *ACS Applied Electronic Materials*, major revision. (IF 4.494, JCR Q2, 目前正在返修)
32. Cui H, **Yuan J-H***, Xue K-H, Miao X. Tuning the electronic and mechanical properties of Kagome graphene via hydrogenation, *The Journal of Physical Chemistry C*, major revision. (IF 4.177, JCR Q1, Top 期刊, 通讯作者, 目前正在返修)
33. Mao G-Q#, **Yuan J-H**#, Yang S, Miao X. In search of $Pca2_1$ phase ferroelectrics, submitted to *Physical Review Materials*, under review. (IF 3.980, JCR Q2, 共同第一作者)

2. 部分代表性合作论文

1. Yang B, Pan W, Wu H, Niu G, **Yuan J-H**, Xue K-H, Yin L, Du X, Miao X-S, Yang X, Xie Q, Tang J. Heteroepitaxial passivation of $Cs_2AgBiBr_6$ wafers with suppressed ionic migration for X-ray imaging, *Nature Communications*, 2019, 10(1):1989. (IF 17.694, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 负责理论计算部分, 被引 163 次)
2. Luo Q, Yu J, Zhang X, Xue K-H, **Yuan J-H**, Cheng Y, Gong T, Lv H, Xu X, Yuan P, Yin J, Tai L, Long S, Liu Q, Miao X, Li J, Liu M. $Nb_{1-x}O_2$ based Universal Selector with Ultra-high Endurance ($>10^{12}$), high speed (10 ns) and Excellent Vth Stability[C]//2019 Symposium on VLSI Technology. Kyoto, Japan: IEEE, 2019: T236-T237. (微电子学领域顶级会议, 负责理论计算部分, 被引 12 次)
3. Zheng Y, Zheng Y, Gao Z, **Yuan J-H**, Cheng Y, Zhong Q, Xin T, Wang Y, Liu G, Huang Y, Huang R, Miao X, Xue K-H, Lyu H. Atomic-scale characterization of defects generation during fatigue in ferroelectric $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ films: vacancy generation and lattice dislocation[C]//2021 67th IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). San Francisco, USA: IEEE, 2021. (微电子学领域顶级会议, 负责理论计算部分, 被引 2 次)
4. Yang B, Yin L, Niu G, **Yuan J-H**, Xue K-H, Tan Z, Miao X-S, Niu M, Du X, Song H, Lifshitz E, Tang J. Lead-Free Halide Rb_2CuBr_3 as Sensitive X-Ray Scintillator, *Advanced Materials*, 2019, 31(44):1904711. (IF 25.809, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 负责理论计算部分, 被引 225 次)
5. Yu N, **Yuan J-H**, Li K, Wang J. Tunable Rashba spin splitting in two-dimensional graphene/As-I heterostructures, *Applied Surface Science*, 2018, 427:10–14. (IF 7.392, JCR Q1, Top 期刊, 负责部分理论计算, 被引 7 次)

6. Wang C, Mao G-Q, Huang M, Huang E, Zhang Z, **Yuan J-H**, Cheng W, Xue K-H, Wang X, Miao X. $\text{HfO}_x/\text{AlO}_y$ Superlattice-Like Memristive Synapse, *Advanced Science*, 2022, 9, 2201446. (IF 17.521, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 负责指导理论计算, 被引 1 次)
7. Li L-H, Xue K-H, **Yuan J-H**, Mao G-Q, Miao X. Hafnia for analog memristor: Influence of stoichiometry and crystalline structure, *Physical Review Materials*, 2022, 6, 084603. (IF 3.980, JCR Q2, 负责指导理论计算, 被引 1 次)
8. Li L-H, Xue K-H, Zou L-Q, **Yuan J-H**, Sun H, Miao X. Multilevel switching in Mg-doped HfO_x memristor through the mutual-ion effect. *Applied Physics Letters*, 2021, 119, 153505. (IF 3.971, JCR Q1, Top 期刊, 负责指导理论计算部分, 被引 6 次)
9. Zhang L, Song L, Dai H, **Yuan J-H**, Wang M, Huang X, Qiao L, Cheng H, Wang X, Ren W, Miao X, Ye L, Xue K-H, Han J-B. Substrate-modulated ferromagnetism of two-dimensional Fe_3GeTe_2 , *Applied Physics Letters*, 2020, 116(4):042402. (IF 3.971, JCR Q1, Top 期刊, 负责理论计算部分, 被引 21 次)
10. Zhao X, Niu G, Zhu J, Yang B, **Yuan J-H**, Li S, Gao W, Hu Q, Yin L, Xue K-H, Lifshitz E, Miao X, Tang J. All-Inorganic Copper Halide as a Stable and Self-Absorption-Free X-ray Scintillator, 11(5):1873–1880. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020, 11(5):1873–1880. (IF 6.888, JCR Q1, 中科院 1 区, Top 期刊, 负责理论计算部分, 被引 80 次)

3. 主持或参与的科研项目

1. 基于新型 DFT-1/2 计算方法的铪基 ($\text{Hf}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_2$) 铁电薄膜内建电场研究, 湖北省博士后创新研究岗, 2020.10-2022.09, 6 万。主持。
2. 面向材料集成设计的高通量自动流程计算算法与软件系统, 国家重点研发计划项目(项目号: 2017YFB0701701), 2017.07-2021.06, 160 万。参与, 本人在其中主要负责材料基因工程关键技术与支撑平台中的第一性原理计算和软件开发。
3. 共价半导体的高效密度泛函带隙修正, 国家自然科学基金青年项目(项目号: 11704134), 2018.01-2020.12, 24 万。主研, 本人在其中主要负责带隙修正方法在实际体系中的适用性分析。
4. 铪基铁电薄膜的内建电场研究, 国家自然科学基金面上项目(项目号: 61974049), 2020.01-2023.12, 60 万。主研, 本人在其中主要负责铁电的理论模型分析以及相应的第一性原理计算。
5. 非单斜相 (Hf , Zr) O_2 忆阻器的阻变机理研究, 华中科技大学自主创新基金(项目号: 2016YXMS212), 2016.01-2018.12, 10 万。主研, 本人在其中主要负责模型建模以及理论计算。
6. 阻变存储器电形成机理与方法研究, 武汉市科技计划项目(项目号: 2017010201010106), 2017.07-2019.12, 15 万。主研, 本人在其中主要负责基于第一性原理计算的电形成机理研究。

7. FeFET 铁电存储机制研究 SOW，华为技术有限公司研究课题，2020.01-2020.12，70 万。主研，本人在其中主要负责理论部分的建模分析以及存储机制的第一性原理计算。

三、获奖及荣誉

1. 荣获武汉理工大学优秀硕士学位论文(2017)，研究生国家奖学金(2015)，三好研究生，优秀学生干部；
2. 荣获华中科技大学三好研究生(两次)，Lam Research 论文奖三等奖(两次)，数马电子助学金(二等奖)，“光电学子”奖学金，光电学院 2021 年度优秀共产党员。

