

The physics of contact-electrification and its implication to new energy science

WANG Zhong Lin

Beijing Institute of Nanoenergy and Nanosystems, Chinese Academy of Sciences, Beijing,
China.

School of Materials Science and Engineering, Georgia Institute of Technology, Atlanta, Georgia
USA

Email: zlwang@binn.cas.cn

Contact electrification (triboelectrification) effect, the most fundamental effect for electricity, has been known for over 2600 years since ancient Greek time, but its scientific mechanism remains unclear. The study of triboelectrification is recently revived due to the invention of the triboelectric nanogenerators (TENGs) by using the coupling of triboelectrification and electrostatic induction effects, which is the most effective approach for converting tiny mechanical energy into electricity for powering small sensors. TENG is playing a vitally important role in the distributed energy and self-powered systems, with applications in internet of things, environmental/infrastructural monitoring, medical science, environmental science and security. In this talk, we first present the physical mechanism of triboelectrification for general materials. The charge transfers between a case such as a metal-dielectric was attributed to the electron transfer between the filled states up to the Fermi level as governed by the Fermi-Dirac function. For the case of dielectric-dielectric, the charge transfer was attributed to between the surface states of the two materials. For a general case that the system cannot be described by a state surface model, an electron cloud-potential well model is proposed based on the overlap of electron wave functions across two atoms, which can be generally applied to explain all types of CE in conventional materials. Secondly, the fundamental theory of the TENGs is explored based on the Maxwell equations. In the Maxwell's displacement current proposed in 1861, the term $\epsilon \partial \mathbf{E} / \partial t$ gives the birth of electromagnetic wave, which is the foundation of wireless communication, radar and later the information technology. Our study indicates that, owing to the presence of surface polarization charges present on the surfaces of the dielectric media in TENG, an additional term $\partial \mathbf{P}_s / \partial t$ should be added in the Maxwell's displacement current, which is the output electric current of the TENG. Therefore, our TENGs are the applications of Maxwell's displacement current in energy and sensors. TENGs have three major application fields: micro/nano-power source, self-powered sensors and blue energy. We will present the applications of the

TENGs for harvesting all kind mechanical energy that is available but wasted in our daily life, such as human motion, walking, vibration, mechanical triggering, rotating tire, wind, flowing water and more. Then, we will illustrate the networks based on triboelectric TENGs for harvesting ocean water wave energy, for exploring its possibility as a sustainable large-scale blue energy. Lastly, we will show that TENGs as self-powered sensors for actively detecting the static and dynamic processes arising from mechanical agitation using the voltage and current output signals.

参考文献:

1. C.Xu†, Y. Zi†, A.C. Wang†, H. Zou, Y. Dai, Xu He, P. Wang, .C. Wang, P. Feng, D. Li, Z.L. Wang* “On Electron Transfer Mechanism in Contact-Electrification Effect”, *Adv. Mater.* 30 (2018) 1706790.
2. Z.L. Wang, “On Maxwell’s displacement current for energy and sensors: the origin of nanogenerators”, *Materials Today*, 20 (2017) 74-82.
3. Z.L. Wang, L. Lin, J. Chen. S.M. Niu, Y.L. Zi “Triboelectric Nanogenerators”, Springer, 2016. <http://www.springer.com/us/book/9783319400389>
4. Z.L. Wang “Triboelectric Nanogenerators as New Energy Technology for Self-Powered Systems and as Active Mechanical and Chemical Sensors”, *ACS Nano* 7 (2013) 9533-9557.
5. Z.L. Wang, J. Chen, L. Lin “Progress in triboelectric nanogenertors as new energy technology and self-powered sensors”, *Energy & Environmental Sci*, 8 (2015) 2250-2282.

报告人简介

王中林院士，中科院北京纳米能源与系统研究所所长和首席科学家、佐治亚理工学院终身校董事讲席教授、Hightower 终身讲席教授。王教授是 2019 年爱因斯坦世界科学奖(Albert Einstein World Award of Science)、2018 年埃尼奖(ENI award – The “Nobel prize”for Energy)、2015 年汤森路透引文桂冠奖、2014 年美国物理学会 James C. McGroddy 新材料奖、和 2011 年美国材料学会奖章(MRS Medal)等国际大奖得主。他是中科院外籍院士、欧洲科学院院士、加拿大工程院外籍院士，国际纳米能源领域著名刊物 *Nano Energy*（最新 IF: 15.548）的创刊主编和现任主编。



王院士是纳米能源研究领域的奠基人。他发明了压电纳米发电机和摩擦纳米发电机，首次提出自驱动系统和蓝色能源的原创大概念，将纳米能源定义为“新时代的能源”。王中林院士开创了压电电子学和压电光电子学两大学科，他提出的原创新物理效应引领了第三代半导体纳米材料的基础研究，使氧化锌纳米结构成为与碳纳米管和硅纳米线同等重要的一类材料研究体系。根据 Google Scholar，王中林教授论文引用超 21 万次，标志影响力的 H 指数是 228，目前在全球纳米科学与纳米技术领域总引用数和 H 指数排名世界第一。

High Performance Electronics based on low dimensional materials

Yanqing Wu

Institute of Microelectronics and Key Laboratory of Microelectronic Devices and Circuits
(MOE), Peking University, Beijing 100871
Email: yqwu@pku.edu.cn

Electronic devices based on atomic layered two-dimensional materials and related heterostructures have recently attracted great research attention due to their unique electronic properties and the feasibility of hybrid integration, which provide the unprecedented opportunities for various van der Waals heterojunctions. We have studied the performance improvement based on black phosphorus and molybdenum disulfide from the carrier velocity and operating frequency. High frequency transistor and circuits operating at gigahertz range based on molybdenum disulfide are demonstrated with record high maximum oscillation frequency. High hole velocity of up to 1.5×10^7 cm/s has been demonstrated for short channel BP transistors and transport approaching ballistic limit are predicted for ultimately scaled channel length. Moreover, bandgap engineering using lateral heterojunctions has been carried out with multifunctionality for reconfigurable logic operations, showing great promise for future electronics. Ultrathin indium tin oxide has been also systematically investigated for high performance electronics with high on off rate and frequency response.

基于石墨烯及其异质结构构建的相关光电器件

许建斌、陈泽丰

香港中文大学电子工程系、中国科学院深圳先进技术研究院

Email: jbxu@ee.cuhk.edu.hk

摘要: 在二维材料系列中, 石墨烯因其出色的电学, 光学, 热学和力学性能而受人们青睐。在过去十多年里, 石墨烯及其异质结相关器件的研究受到了人们广泛的关注和深入的研究, 这为从可见光到太赫兹 (THz) 光波波段的试验应用提供了成功的希望。为了提高常规构造的石墨烯及其异质结相关光电子器件的性能, 我们研究和制备了新型光电子器件, 实现了超越原子级尺度光物质相互作用的限制。我们提出并探讨了若干高性能石墨烯相关光电子器件的新颖设计思路和制备方法。特别是通过利用石墨烯及其相关异质结构的不寻常的电子和光学性质, 制备研究了高性能可见光至近红外区域光电探测器, 以及太赫兹 (THz) 光波调制器。此外, 我们还发现类似的设计策略适用于其他二维过渡金属硫化物 (TMD) 和其相关的异质结构。

参考文献

- [1] Z. F. Chen, J. B. Xu, *et al.*, submitted (2019)
- [2] Z. F. Chen, J. B. Xu, *et al.*, *Nature Communications* **9**, Article Number 4909 (2018)
- [3] Z. F. Chen, J. B. Xu, *et al.*, *ACS Nano* **11**, 430-437 (2017)
- [4] L. Tao, Z. F. Chen, J. B. Xu, *et al.*, *npj 2D Materials and Applications* **1**, 19 (2017)
- [5] L. Ye, P. Wang, *et al.*, *Nano Energy* **37**, 53 (2017)
- [6] X. D. Liu, Z. F. Chen, J. B. Xu, *et al.*, *Advanced Optical Materials* **5**, UNSP 1600697 (2017)
- [7] Z. F. Chen, J. B. Xu, *et al.*, *Advanced Optical Materials* **3**, 1207-1214 (2015)
- [8] X. M. Wang, Z. Z. Cheng, K. Xue, H. K. Tsang, J. B. Xu, *Nature Photonics* **7**, 888-891 (2013)

个人简介

许建斌博士系香港中文大学工程学院电子工程系教授, 兼材料科学与技术研究中心主任。1983年本科毕业于南京大学, 1986年获南京大学硕士学位(师从张淑仪院士)。自1988年初至1993年中于德国康斯坦茨大学(德国精英大学)深造。受业于德国著名物理学家 Klaus Dransfeld 教授(德国科学院院士), 从事纳米科学技术研究。因扫描探针显微术和近场显微术及其在能量传递方面的研究应用, 获得德国自然科学博士学位。其后加盟香港中文大学电子工程系。2002年延聘为正教授。2009年及2011年两次获得海外及港澳学者合作研究基金(原海外杰出青年基金)。国际电气暨电子工程师学会及香港工程学会 Fellow。2014年获教育部长江学者讲座教授, 并获香港中文大学工程学院杰出学人, 以及杰出研究奖。现任香港材料学会秘书长, 《科学通报》英文版副主编, 《微电子学报》编委, 中国真空学会理事, 中国科学院深圳先进技术研究院特聘教授。迄今担任30余种国际一流科技期刊特约评审员, 其中包括《自然》物理类子刊, 《JACS》, 《先进材料》, IEEE会刊, 《Nano Letters》, 《ACS Nano》等。目前研究方向包括: (1) 钙钛矿基光电子材料与器件; (2) 石墨烯及新型二维半导体光电子材料与器件; (3) 有机固态半导体电子及光电子器件(如器件物理, 介面改性与表征, 新型器件探索); (4) 表面等离激元光子学在半导体电子及光电子器件; (5) 纳米技术在固态电子材料和器件中的应用(如扫描探针显微术和近场显微术, 纳米材料和器件构筑与表征); (6) 先进电子封装技术等。

N 型陡峭亚阈值摆幅狄拉克源碳管晶体管

肖梦梦、林艳霞、张志勇、彭练矛

北京大学电子系物理电子所, 北京 100871

Email: mmxiao@pku.edu.cn

摘要: 在传统金属-氧化物-半导体场效应晶体中, 由于源端载流子的玻尔兹曼热分布效应, 室温下晶体管的亚阈值摆幅无法低于 60 毫伏/量级的理论极限。这限制了器件驱动电压持续减小, 使得功耗问题成为制约 CMOS 晶体管技术发展的最关键问题。近期通过采用具有二维狄拉克电子特征的石墨烯作为碳纳米管晶体管的源端材料, 改变了源端载流子分布, 室温下可以同时实现亚 60 毫伏/量级亚阈值摆幅和高开态电流。¹但是目前实验上仅实现了 P 型狄拉克源晶体管。

本文构建了基于单根碳纳米管的 N 型狄拉克源晶体管, 采用 P 型石墨烯作为源端接触, 采用低功耗函数钨作为漏端接触, 调节晶体管的极性, 同时利用高效的氧化铝作为栅介质增强对沟道的 N 型掺杂效果, 实现了 N 型狄拉克源晶体管。通过在源端石墨烯上加载控制栅, 调节石墨烯的极性及掺杂浓度, 实现了从传统 N 型碳纳米管晶体管向亚 60 晶体管器件的转变过程, 最小 SS 可以达到 37mV/dec。得益于亚阈值摆幅的降低, 亚 60 狄拉克源晶体管相对于正常晶体管器件的跨导提升了 2 倍。本工作推动了未来构建基于 CMOS 碳基冷源晶体管的超低功耗电路及芯片。

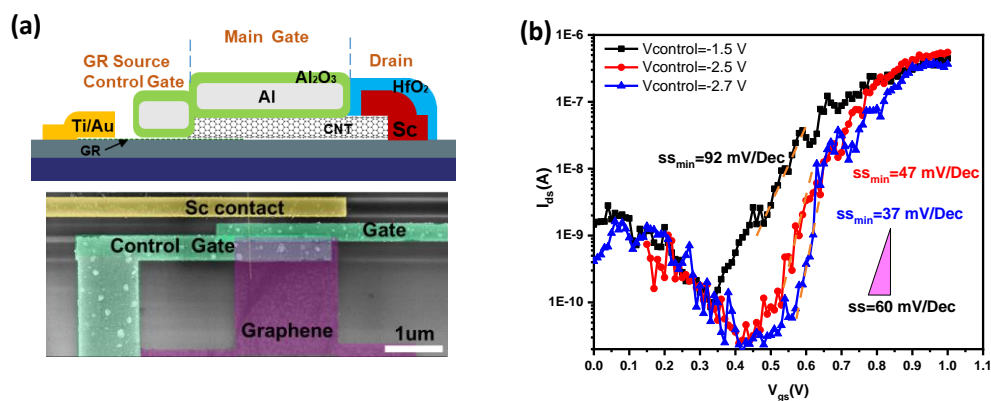


图 1 (a) N 型碳管狄拉克源晶体管结构;上图 结构示意图, 下图器件结构示意图; (b) 不同控制电压(石墨烯掺杂浓度下) 转移曲线;

关键词: 碳纳米管晶体管, 石墨烯, 亚 60 毫伏/量级, 陡峭亚阈值摆幅

参考文献

- 【1】 Qiu, C. et al, Dirac-source field-effect transistors as energy-efficient, high-performance electronic switches. *Science* **2018**, 361, 387-392.

基金项目: 国家重点研发计划 (2016YF0201901)

纳米激光的模式调控

马仁敏

北京大学物理学院, 北京, 100871

Email: renminma@pku.edu.cn

摘要: 自激光器发明以来, 其尺寸的小型化始终是一个重要的研究方向。过去几十年中, 垂直腔面发射激光器、微盘激光器、光子晶体激光器等微型激光器的快速发展为芯片上光电互联、超分辨率纳米光刻、纳米光谱学等带来了全新的机遇。近年来, 一种新型的微型激光器—等离激元纳米激光器被发展出来。等离激元纳米激光器通过受激辐射过程放大金属中自由电子振荡与光场耦合形成的表面等离激元模式实现激光激射, 可以突破光学衍射极限实现纳米尺度的相干光源。报告将讨论该类型激光器的基本特点, 特别是其模式调控特性。

参考文献:

1. Applications of Nanolasers, Ren-Min Ma & Rupert Oulton, *Nature Nanotechnology* 14, 12–22, 2019.
2. High Performance Plasmonic Nanolasers with External Quantum Efficiency Exceeding 10%, Suo Wang, Huazhou Chen, Ren-Min Ma, *Nano Letters*, 18, 7942, 2018.
3. Unusual Scaling Laws for Plasmonic Lasers beyond Diffraction Limit, Suo Wang, Xing-Yuan Wang, Bo Li, Hua-Zhou Chen, Yi-Lun Wang, Lun Dai, Rupert F. Oulton, Ren-Min Ma, *Nature Communications*, 8, 1889 (2017).
4. Imaging the dark emission of spasers. Hua-Zhou Chen, Jia-Qi Hu, Suo Wang, Bo Li, Xing-Yuan Wang, Yi-Lun Wang, Lun Dai, and Ren-Min Ma, *Science Advances*, 3, e1601962 (2017).
5. arXiv:1707.01055

关键词: 纳米激光, 等离激元, 模式调控

纳腔中的二维量子体系：从弱、中等强度到强耦合

张顺平

武汉大学物理科学与技术学院, 武汉 430072

Email: spzhang@whu.edu.cn

摘要: 借助大量自由电子的集体振荡, 金属纳米颗粒可扮演一个光学纳腔的角色, 把光束束缚在空间中很小的体积内。这个效应可被利用于在空间维度上对光的强度、偏振、相位等属性进行裁剪, 进而为调控原子、分子等量子体系与光场的相互作用提供了重要途径。二维层状过渡金属卤族化合物具有强激子效应、能谷自由度等特点而备受关注。过去几年, 我们致力于将金属纳腔与二维量子体系 (MoS_2 、 WSe_2 、 MoSe_2) 的集成, 利用两者各自的优点, 实现单一成分所不具备的特性。比如, 实现了室温下单颗粒表面等离激元与单层二硒化钨中的激子之间的强相互作用, 并原位测量了单个纳腔耦合体系的色散曲线¹; 当等离激元-激子耦合强度处于弱耦合-强耦合的边界时, 耦合体系上观测到最高亮度的发光²; 当激子与等离激元处于弱耦合时, 激子的发光强度、声子散射强度与纳腔中的光学局域态密度或电磁场强度有直接的关联, 此时二维材料成为量子探针, 用于纳腔中量子极限电磁场增强或纳腔中超快衰减速率进行检测^{3,4}。

参考文献

- 【1】 D. Zheng, S. Zhang*, et al., Manipulating coherent plasmon–exciton interaction in a single silver nanorod on monolayer WSe_2 , *Nano Lett.* 17, 3809 (2017).
- 【2】 J. Sun, H. Hu, D. Zheng, D. Zhang, Q. Deng, S. Zhang*, H. Xu*, Light-emitting plexciton: Exploiting plasmon–exciton interaction in the intermediate coupling regime. *ACS Nano* 12, 10393-10402 (2018).
- 【3】 W. Chen, S. Zhang*, et al. Probing the limits of plasmonic enhancement using a two-dimensional atomic crystal probe, *Light: Sci. Appl.* 7, 56 (2018).
- 【4】 Y. Zhang, W. Chen, T. Fu, J. Sun, D. Zhang, Y. Li, S. Zhang*, H. Xu*, Simultaneous surface-enhanced resonant Raman and fluorescence spectroscopy of monolayer MoSe_2 : Determination of ultrafast decay rates in nanometer dimension. *Nano Lett.* in revision.

这些工作受 973 项目(2015CB932400)、重点研发专项 (2017YFA0303504) 以及国家自然科学基金项目 (91850207, 11674255) 资助。

先进晶畴电池材料

尉海军

北京工业大学, 材料科学与工程学院, 新型功能材料教育部重点实验室, 北京, 100124

Email: hj-yu@bjut.edu.cn

摘要: 二次电池的研究重点是如何进一步提升其能量密度, 尤其是对正极材料的高能量化设计方面需求迫切。电极材料的晶体/电子结构与其电化学性能密切相关, 在电池材料的研究历史中, 新开发电极材料的电化学性能都有其特殊的晶体结构和电子结构。目前, 已开发了多种锂/钠/钾离子电池正极材料, 有层状结构、尖晶石结构、橄榄石结构等。如何进一步提升锂/钠/钾离子电池正极材料的能量密度, 一方面可以通过提高充电截止电压并结合掺杂元素稳定结构的方法来实现, 另一方面也可以引入微区畴结构通过“晶畴调控”改变其电化学性能。针对锂/钠离子电池正极材料, 我们前期对于晶畴设计、晶畴解析、晶畴调控、晶畴与电化学性能的构效关系、以及晶畴反应机制方面开展了长达 10 年的持续性实验与理论计算工作, 取得了一些研究成果, 对于开发新型先进电池材料具有一定的理论和实际应用指导意义。本报告将介绍晶畴电池材料在锂离子电池方面的最新工作。

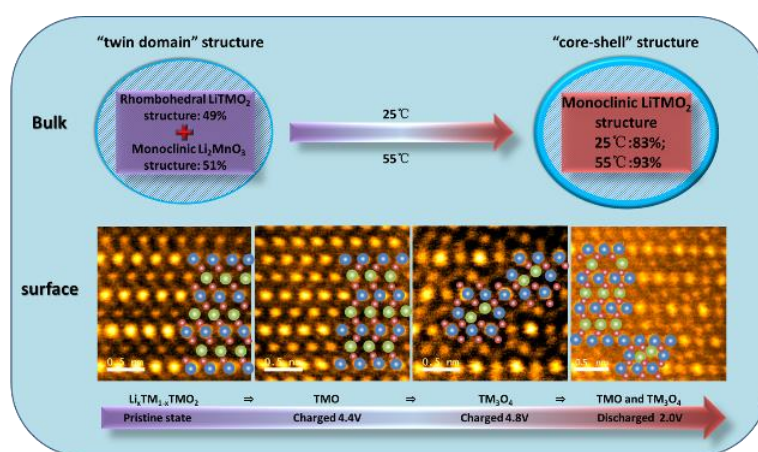


图 1 富锂锰基层状氧化物晶畴电池材料电化学过程平均与局域结构演化 (JACS. 2018, 140, 15279)

参考文献 (中文小五号宋体, 其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

- [1] Haijun Yu*, Yeong-Gi So, Yang Ren, Tianhao Wu, Gencai Guo, Ruijuan Xiao, Jun Lu, Hong Li, Yubo Yang, Haoshen Zhou, Ruzhi Wang, Khalil Amine, Yuichi Ikuhara. *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140 (45), 15279–15289
- [2] Yubo Yang, Heng Su, [Tianhao Wu](#), [Yuyuan Jiang](#), [Danmin Liu](#), [Pengfei Yan](#), [Haolai Tian](#), Haijun Yu*. *Sci. Bull.* 2019, [64\(8\)](#), 553-561
- [3] Haijun Yu, Yeong-Gi So, Akihide Kuwabara, Eita Tochigi, Haoshen Zhou, et al. *Nano Letters*, 2016, 16 (5), 2907–2915.
- [4] Haijun Yu, Yumin Qian, Minoru Otani, Daiming Tang, Shaohua Guo, Yanbei Zhu and Haoshen Zhou. *Energy Environ. Sci.*, 2014, 7, 1068-1078.
- [5] Haijun Yu, Ryo Ishikawa, Yeong-Gi So, Naoya Shibata, Tetsuichi Kudo, Haoshen Zhou, Yuichi Ikuhara. *Angew. Chem.-Int. Edit.*, 2013, 52,5969-5973.

基金项目: 本研究为国家优青 (51622202) 和国家重点研发 (2018YFB0104302) 项目资助。

新型范德华尔异质结光电探测器的构筑与性能优化

罗林保

电子科学与应用物理学院, 合肥工业大学, 包河区屯溪路 193 号, 合肥, 安徽, 中国

*邮箱: luolb@hfut.edu.cn

光电探测器是一类可以将电磁辐射转换成电型号从而进行探测的光电子器件, 它在导弹预警, 刑侦检测、电网安全监测、森林火灾告警等领域具有广阔的应用前景。与传统的光电探测器相比, 基于新型二维材料的范德华尔异质结光电探测器由于响应速度、响应度、探测率等方面的明显优势而受到人们的广泛关注。在这次报告中, 我将介绍如何利用石墨烯或者其它二维材料与多种禁带宽度的半导体材料结合, 制备结构不同的范德华尔异质结探测器, 并系统研究器件的相关参数。此外, 我们还将具有表面等离子体基元效应的金属纳米颗粒, 或者具有陷光效应的半导体微纳米结构阵列引入到光电探测器的结构中, 实现多种器件的响应速度, 高探测率的大幅提升。最后我还将介绍如何通过界面调控的方法, 来优化光电二极管型的器件结构, 实现开光比提高比三个数量级的提高, 以及响应速度接近 100 倍的提高。

参考文献:

1. [Lin-Bao Luo,* et al](#), "Controlled Synthesis of Two-dimensional Palladium Diselenide for Sensitive Photodetectors Application." *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 29, 1806878.
2. [Lin-Bao Luo,* et al](#), "Recent Progress in Solar-Blind Deep-Ultraviolet Photodetectors Based on Inorganic Ultrawide Bandgap Semiconductors", *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 29, 1806006.
3. [Lin-Bao Luo,* et al](#), "PdSe₂ Multilayer on Germanium Nanocones Array with Light Trapping Effect for Sensitive Infrared Photodetector and Image Sensing Application", *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 29, 1900849
4. [Lin-Bao Luo,* et al](#), "Graphene-Semiconductor Hybrid Structures for Optoelectronic Devices Applications", *Nano Today*, 2018,19, 41-83.
5. [Lin-Bao Luo,* et al](#), "Fast, Self-Driven, Air-Stable and Broadband Photodetector Based on Vertically Standing Layered PtSe₂/GaAs Heterojunction", *Adv. Funct. Mater.*, 2018, 28, 1705970.
6. [Lin-Bao Luo,* et al](#), "Graphene/ β -Ga₂O₃ Schottky junction for highly sensitive deep UV photodetector application", *Adv. Mater.*, 2016, 28, 10725-10731.
7. [Lin-Bao Luo,* et al](#), "A Localized Surface Plasmon Resonance and Light confinement Enhanced Near Infrared Light Photodetector," *Laser and Photonics Reviews*, 2016, 7, 534.
8. [Lin-Bao Luo,* et al](#), "Near infrared light photovoltaic detector based on GaAs nanocones array/monolayer graphene Schottky junction", *Adv. Funct. Mater.*, 2014, 24, 2794-2800.

Structure and properties of oxides at pico- and nano-scale

-----Quantitative HRTEM

C.L. Jia (贾春林)

Jia-Lab for Interface and Atomic Structure, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China
Ernst Ruska Centre for Microscopy and Spectroscopy with Electrons,
Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich, Germany
Email: c.jia@fz-juelich.de

Aberration-corrected high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM) has proven to be a powerful tool for materials research [1]. For crystalline materials quantitative HRTEM can be used for determining the position of atomic columns with precision of a few picometers and the chemical occupancy in atomic columns with precision of a few atomic percent. With quantitative evaluation of image contrast of a thin crystal, the number of atoms within the atomic columns parallel to the viewing direction can be determined [2].

In the presentation, the quantitative HRTEM is discussed and employed to characterization of structure and properties of ferroelectric $\text{Pb}(\text{ZrTi})\text{O}_3$ thin films [3,4], multiferroic BiFeO_3 single crystal [5] and $\text{SrTiO}_3/\text{PbTiO}_3$ superlattice [6]. In the studies we measure with picometer precision the positions and relative displacements of the atoms, which determine the modulus and the direction of the electric dipole moments and thus reveal the properties of domain walls and topological structures and defects. This technique is also used for obtaining atomic scale evidence for displacive disorder and atom jump in bismuth zinc niobate pyrochlore [7].

参考文献

1. C.L. Jia, M. Lentzen, K. Urban, *Science* **299**, 870 (2003).
2. C.L. Jia *et al.*, *Nat. Mater.* **13**, 1044 (2014).
3. C.L. Jia *et al.*, *Science* **331**, 1421 (2011).
4. C.L. Jia *et al.*, *Nat. Mater.* **7**, 57 (2008).
5. C.L. Jia *et al.*, *Acta Mater.* **82**, 356 (2015).
6. L. Lu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 177601 (2018).
7. C.L. Jia *et al.*, *Ultramicroscopy* **192**, 57 (2018).

报告人简介:

贾春林，德国于利希研究中心资深研究员，西安交通大学教授。长期工作在氧化物材料结构与性能，以及定量高分辨透射电子显微学研究领域。基于球差校正透射电子显微镜的球差可调性，发展了负球差成像技术，对铁电氧化物的畴界及缺陷进行了真正原子尺度的开创性研究。实现了用电子显微技术在单胞尺度上表征了铁电宏观性能。发表论文 180 余篇，多篇发表在具有重要影响力的杂志上（Science、Nature Materials、Physical Review Letters，等），2014 年荣获国际显微学联合会(IFSM) Hatsujiro Hashimoto Medal。



Dr. Chunlin Jia is currently a senior scientist in Ernst Ruska-Centre for Microscopy and Spectroscopy with Electrons, Forschungszentrum Jülich, Germany. He is also a professor in School of Electronic and Information Engineering, Xi'an Jiaotong University. Dr. Jia's research interests include microstructures and lattice defects of oxide thin films, domains and domain walls in oxide ferroelectrics, aberration-corrected transmission electron microscopy and quantitative high-resolution transmission electron microscopy. He has developed an imaging technique, negative spherical aberration imaging (NCSI) technique, based on aberration-corrected transmission electron microscope, which allows to measure with picometer precision the off-center displacements of atoms including oxygen in oxide ferroelectrics and thus map electric dipoles unit cell by unit cell. He has published over 180 peer-reviewed papers. In 2014 he won IFSM Hatsujiro Hashimoto Medal (International Federation of Societies for Microscopy).

Experimental observation of the gate-controlled reversal of the
anomalous Hall effect in the intrinsic magnetic topological insulator
MnBi₂Te₄ device

宋凤麒

南京大学物理学院, 南京 210008

Email: songfengqi@nju.edu.cn

摘要: We report on the gate-reserved anomalous Hall effect (AHE) in the 5-septuple-layers van der Waals device of the intrinsic magnetic topological insulator MnBi₂Te₄. By tuning the Fermi level using the top/bottom gate, the AHE loop gradually decreases to zero and the sign is reversed. The reverse AHE exhibits distinct coercive fields compared with the previous AHE. It reaches a maximum inside the gap of the Dirac cone. Its amplitude exhibits a linear scaling with the longitudinal conductance. Its onset is attributed to the competition of the intrinsic Berry curvature and the Dirac-gap enhanced extrinsic skew scattering. Its gate-controlled switching contributes a scheme for the topological spin field-effect transistors.

关键词: magnetic topological insulator, anomalous Hall effect, sign reversal

基金项目: National Key R&D Program of China (Grant No. 2017YFA0303203), National Natural Science Foundation of China (Grant No. U1732273, No. 91622115, No. 11522432, No. 11674165, No. 11834006 and No. 11574217),

高荧光产率铯铅卤化物钙钛矿纳米晶及光电器件

田建军

北京科技大学 北京市, 海淀区学院路 30 号, 100083

Email: tianjianjun@mater.ustb.edu.cn

摘要: 全无机铯铅卤化物钙钛矿 CsPbX_3 ($X = \text{Cl, Br, and I}$) 量子点及纳米晶拥有优异的光学和光电性质, 在新一代发光、显示和光伏领域极具发展潜力。然而, 铯铅卤化物钙钛矿纳米晶的蓝光荧光产率低和稳定性差限制了其发展和实际应用。

针对蓝光问题: 我们先设计了一种 $\text{CsPbBr}_3@$ amorphous CsPbBr_x (A- CsPbBr_x)核壳结构的纳米晶, 非晶外壳钝化了纳米晶表面缺陷, 提升了辐射复合速率和量子荧光产率 (PLQY)。蓝光 PLQY 达到当时报道最高的 84%。为了解决非晶外壳稳定性较差的问题, 利用量子限域效应, 获得蓝光发射的二维纳米片, 并通过自组装获得高蓝光 PLQY 的自组装纳米晶。这种自组装纳米晶保持了二维纳米片的蓝光发射, 并利用自组装过程愈合了纳米晶表面缺陷, 实现超低缺陷态。蓝光 PLQY 进一步提升至 91%。

针对稳定性问题: 我们掺杂二价的 Cu^{2+} 离子, 在提高 Pb-X 键能的同时, 提供辐射复合通道, 这样既可以改善晶体结构的稳定性, 还提升了 PLQY。扩展 X 射线吸收精细结构(EXAFS)显示, Cu^{2+} 替换了 Pb^{2+} 位置, 可以修正晶体畸变, 降低缺陷态。时间分辨光谱显示掺杂后纳米晶的辐射复合速率加快。在此作用下, 混合卤素离子钙钛矿纳米晶的蓝光 PLQY 由 23%提高至 80%, 并显示出优异的热稳定性, 在 200°C 下仍能保持很高的荧光性能。相比之下, 未掺杂样品随着温度上升, 荧光强度下降很快, 并消失。为了进一步提升纳米晶的稳定性, 引入一种短链配体 (AET), 替换纳米晶表面的常规油胺和油酸配体。这种纳米晶展现出优异的抗水性和抗紫外光腐蚀性, 并利用喷雾热解技术制备了高电荷传输性能的钙钛矿纳米晶薄膜。基于这种薄膜, 制备出光电转换效率超过 10%的胶体量子点太阳能电池。

关键词: 钙钛矿, 纳米晶, 量子点, 光电性能

液相界面等离子激元热点构筑及增强拉曼散射研究

刘洪林

合肥工业大学, liuhonglin@hfut.edu.cn

表面增强拉曼光谱 (SERS) 的灵敏度高度依赖等离子激元热点数量和热点效率。纳米颗粒聚集体中量子隧穿、电磁屏蔽等效应极大降低电磁增强, 严重限制 SERS 灵敏度和稳定性。虽然纳米结构纵向深度对 SERS 信号的贡献比例尚未完全明晰, 然而扩展三个空间维度上的热点结构已成为制备 SERS 基底共同追求的目标。液相界面稠密纳米阵列, 比固相表面粗糙金属结构和溶液随机颗粒聚集体, 更具可调谐性、自有序性、多相可及性等优势, 是拉曼技术快检实用化的突破方向之一, 但是液相界面拉曼测量的灵敏度和量化是亟需解决的关键科学问题^[1]。

我们集中开展了液相界面上 SERS 测量方法的研究。利用液相界面溶剂挥发的非平衡过程, 提出了“三维 SERS 热点矩阵”的构筑方法^[2-4], 模拟计算了其三维电磁场分布与增强特性, 发现溶胶蒸发过程的特定时刻每两个相邻的颗粒之间均可在三维空间产生动态热点, 产生极高的拉曼增强, 揭示了稠密纳米阵列中热点数量和热点效率的关键影响因素, 实现了超灵敏的液相界面拉曼测量。我们进一步在液相界面上构筑了界面自愈合、形状自适应、机械稳定性强的三维包覆阵列^[5-8], 阐明了容器表面浸润性决定水/油可逆包覆的力学原理。通过纳米溶胶和不相容有机相的简单混合, 即可实现稠密纳米阵列对水、油两相的可逆、可控、快速的整体包覆, 成功测量了双相中不同溶解度的目标分子。结合拉曼光纤探头, 不仅可垂直方向测量, 而且可水平 (侧壁) 方向测量, 克服了液面波动影响。建立了在常见的比色皿中进行液相界面增强拉曼光谱定量测量的新方法, 拓展了 SERS 技术的多相可及性, 为未来推动拉曼技术发展成类似光度计或酶标仪一样便捷却超灵敏、量化的液相测量方法提供了新思路。

参考文献:

1. Liu, H.; Yang, L.; Liu, J., Three-dimensional SERS hot spots for chemical sensing: Towards developing a practical analyzer. *TrAC-Trend. Anal. Chem.* **2016**, *80*, 364-372.
2. Liu, H.; Yang, Z.; Meng, L.; Sun, Y.; Wang, J.; Yang, L.; Liu, J.; Tian, Z., Three-Dimensional and Time-Ordered Surface-Enhanced Raman Scattering Hotspot Matrix. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136* (14), 5332-5341.
3. Han, Z.; Liu, H.; Wang, B.; Weng, S.; Yang, L.; Liu, J., Three-Dimensional Surface-Enhanced Raman Scattering Hotspots in Spherical Colloidal Superstructure for Identification and Detection of Drugs in Human Urine. *Anal. Chem.* **2015**, *87* (9), 4821-4828.
4. Ma, Y.; Liu, H.; Mao, M.; Meng, J.; Yang, L.; Liu, J., Surface-Enhanced Raman Spectroscopy on Liquid Interfacial Nanoparticle Arrays for Multiplex Detecting Drugs in Urine. *Anal. Chem.* **2016**, *88* (16), 8145-8151.
5. Tian, L.; Su, M.; Yu, F.; Xu, Y.; Li, X.; Li, L.; Liu, H.; Tan, W., Liquid-state quantitative SERS analyzer on self-ordered metal liquid-like plasmonic arrays. *Nature Communications* **2018**, *9* (1), 3642.
6. Yu, F. F.; Su, M. K.; Tian, L.; Wang, H. Y.; Liu, H. L., Organic Solvent as Internal Standards for Quantitative and High-Throughput Liquid Interfacial SERS Analysis in Complex Media. *Anal. Chem.* **2018**, *90* (8), 5232-5238.
7. Du, S.; Su, M.; Jiang, Y.; Yu, F.; Xu, Y.; Lou, X.; Yu, T.; Liu, H., Direct Discrimination of Edible Oil Type, Oxidation, and Adulteration by Liquid Interfacial Surface-Enhanced Raman Spectroscopy. *ACS Sensors* **2019**, *4* (7), 1798-1805.
8. Su, M.; Li, X.; Zhang, S.; Yu, F.; Tian, L.; Jiang, Y.; Liu, H., Self-Healing Plasmonic Metal Liquid as a Quantitative Surface-Enhanced Raman Scattering Analyzer in Two-Liquid-Phase Systems. *Anal. Chem.* **2019**, *91* (3), 2288-2295.

米级二维单晶材料的生长及性质调控

刘开辉

北京大学物理学院, 北京, 100871

Email: khliu@pku.edu.cn

摘要: 量子材料, 包含拓扑材料、超导材料、二维材料等, 是非常有望带来颠覆性应用的新型材料。二维材料由于其与当代硅基芯片工艺兼容而有望实现规模化应用, 成为当代跨学科交叉研究的热点材料体系。二维材料由于其原子层结构而具有极大的比表面积, 其电子态和声子态都分布在表面。因此二维材料对界面非常敏感, 跟其它物质在界面上的相互作用可以显著地改变其生长动力学和物理性质。通过设计和利用这种界面相互作用, 我们可以调控二维材料的生长和性质。在这个报告中我将介绍近期我们在二维材料界面调控方向开展的一些工作, 主要包括: 利用表面局域元素供应调控二维材料的生长速率、利用单晶金属衬底周期势调控米级二维单晶石墨烯、六方氮化硼外延生长, 利用费米能级调控石墨烯光纤波导中光与物质相互作用强度。



刘开辉博士, 北京大学物理学院研究员、课题组长、博士生导师、中组部“青年千人”、基金委“优青”、国家重点研发计划课题负责人。本科毕业于北京师范大学物理学系(2004); 博士毕业于中科院物理所(2009); 2009-2014 在美国加州大学伯克利分校物理系从事博士后研究工作; 2014 年到北京大学物理学院工作。

主要从事界面调控二维材料生长动力学和物性研究, 在二维单晶材料超快生长设计、米级单晶薄膜材料制造方法、表界面耦合光谱学研究方向开展了系列工作。发表科研论文 100 余篇, 通讯/第一作者 50 余篇包括 Nature 系列 (正刊 1 篇, 子刊 11 篇)、PNAS (2 篇)、JACS (3 篇)、Advanced Materials (7 篇); 申请专利 32 项, 授权 10 项。目前担任 Science Bulletin 副主编, Nanotechnology、低温物理学报编委, 全国材料新技术发展研究会理事。曾获中国十大科技新锐人物(2016)、北京市优秀人才青年拔尖个人(2017)、纳米之星”创新创业大赛团队第一名(2017)等奖项。

水分子及其纳米团簇在氧化物表面吸附行为的原子尺度研究

何云斌、李磊、曹瑞琦、陈陆枫

湖北大学材料科学与工程学院, 湖北武汉 430062

Email: ybhe@hubu.edu.cn

摘要: 水与金属氧化物表面的相互作用普遍存在于重要的物理化学反应中。而水是以分子态或离解态在材料表面吸附对了解各种反应过程具有重要意义。但反应中涉及的化学键、范德华力和氢键相互作用使吸附过程通常呈现出复杂的现象, 因此利用表面科技手段在原子尺度研究水的吸附过程显得尤为重要。我们在前期工作中, 利用低温 STM 结合 DFT 计算, 研究了水在无缺陷锐钛矿 $\text{TiO}_2(101)$ 单晶表面的吸附特征及其形成机理。首次在分子水平展示了覆盖度小于一个单分子层的水在该表面吸附的微观图像, 给出水以分子态吸附在该表面的直接证据。并观察到水分子沿表面 $[010]$ 方向表现出反常的互斥现象, 及由此形成局域排列有序的水分子 2×2 表面超晶格团簇结构【1】。近期, 我们对单分子层的水在非极性 $\text{ZnO}(11-20)$ 表面的吸附行为进行了研究。观测到在低覆盖度下水以分子态吸附在该表面, 但随着覆盖度的增加, 离解态将取代分子态吸附, 最后在表面形成排列有序的一半分子一半解离的 2×1 表面超晶格团簇结构; 同时发现羟基和水分子对 ZnO 表面能带结构表现出相反的作用。并提出水在该表面出现不同吸附模式的关键是基底的媒介作用: $\text{ZnO}(11-20)$ 表面独特的晶体结构使吸附在相邻原子链上的水分子相互吸引, 减小水分子与表面氧原子之间距离, 引发了解离过程。这意味着对于一些具有独特晶体结构的氧化物表面, 水有可能在其完美表面上解离, 而不必引入缺陷。

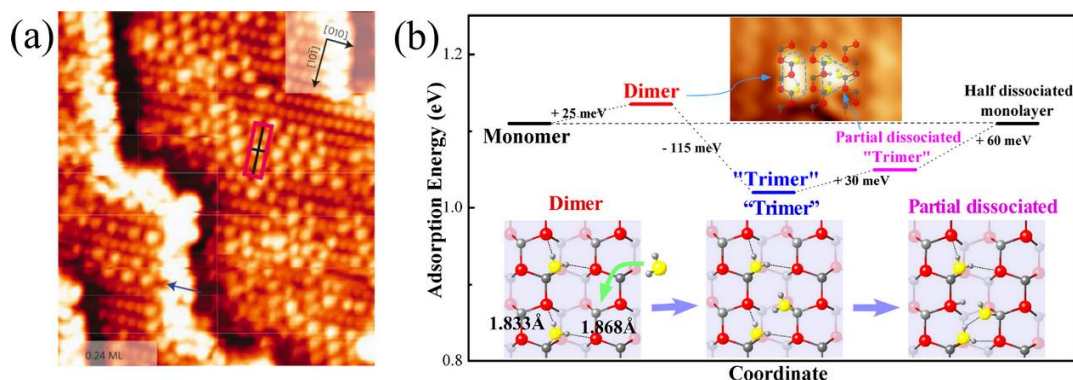


图 1 (a) 锐钛矿 $\text{TiO}_2(101)$ 表面排列有序的水分子 2×2 表面超晶格团簇结构的 STM 图像。(b) $\text{ZnO}(11-20)$ 表面上不同水分子团簇的吸附能 (DFT); 插图包含水二聚体和部分解离的“三聚体”的 STM 图像,

以及包含水二聚体、“三聚体”和部分解离的“三聚体”的球棍模型。

关键词: 水分子 氧化锌 二氧化钛 扫描隧道显微镜 原位吸附

【1】 Yunbin He et al., Local ordering and electronic signatures of submonolayer water on anatase $\text{TiO}_2(101)$, Nature Mater. 8 (2009) 585.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 51572073, 11774082) 等

Tuning Physical and Chemical Properties of Molecules on Substrate at Atomic Level

Shixuan Du

Institute of Physics & University of Chinese Academy of Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Email: sxdu@iphy.ac.cn

Controlling physical and chemical properties of a single molecule is crucial for molecular electronics or spintronics and chemical related applications. In magnetic molecular devices, the spin degree-of-freedom can be used to this end since the magnetic properties of the magnetic ion centers fundamentally impact the transport properties through the molecules. The molecular spin states can be controlled mechanically, electrically, or by magnetic field, providing a useful handle to tune the electric properties. For example, using a magnetic field, novel spin-dependent transport phenomena can be tuned at the single-molecule level such as the negative differential resistance, and highly-correlated Kondo effect. Here, I will talk about the spin state of a single transition metal phthalocyanine (MPc) molecule can be tuned by adsorption site, adsorption/desorption of hydrogen atom which have been investigated by combining density functional theory (DFT) based first principle calculations and scanning tunneling microscope. Moreover, with the help of theoretical calculations, we demonstrate that the electron pathway in a single-molecule device can be selected between two molecular orbitals by varying a magnetic field. This selectivity allows us to achieve a tunable anisotropic magnetoresistance up to 93%. The unique tunability of the electron pathways is due to the reorientation of the magnetic moment of the transition metal center, resulting in a re-hybridization of the molecular orbitals. Despite of the magnetic properties, I will discuss the excellent catalytic properties of MPc in hydrogen dissociation process. The different means of tuning the spin state and catalytic properties of single molecules provide new dimensions of controlling physical and chemical properties of single molecules.

I'd like to thank the Kai Yang, Hui Chen, L. Tao, L. Gao, Y.B. Hu, L.W. Liu, Tao Xiang, H.-J. Gao in IoP, Y.Y. Zhang at UCAS, H.G. Luo at Lanzhou U, T. Pope and Werner A. Hofer at U of Newcastle.

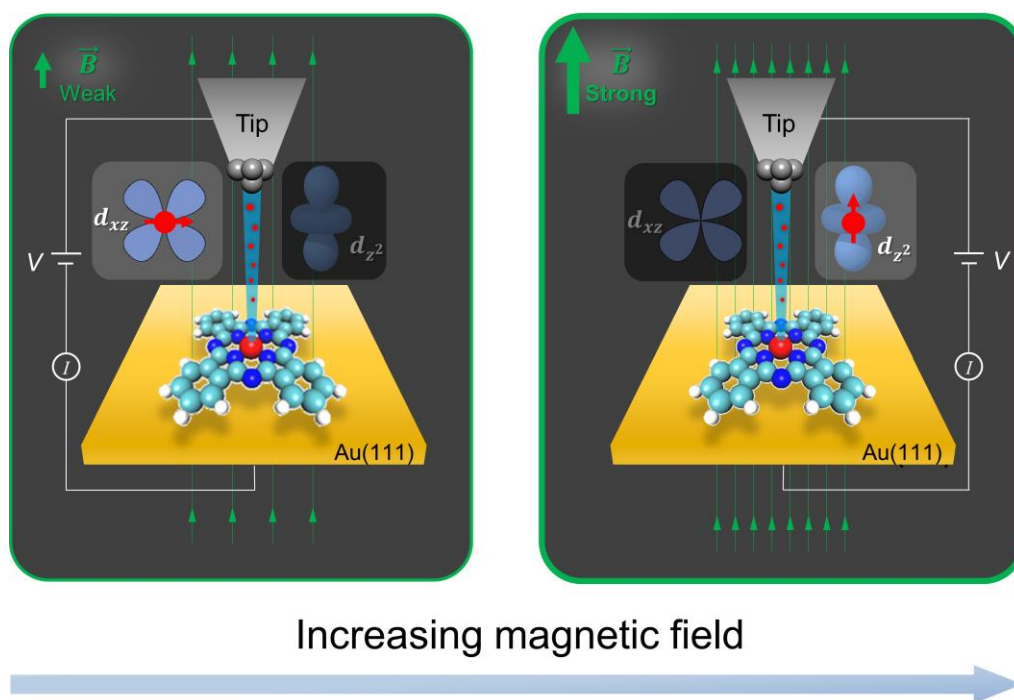


图 1 单分子尺度电子运输通道的磁场调控

关键词: Single molecular devices, Phthalocyanine, Spin state, magnetoresistance

参考文献:

- 【1】 K. Yang *et al.*, Tunable giant magnetoresistance in a singlemolecule junction, *Nat. Commun.* 2019, 10, 3599.
- 【2】 L.W. Liu *et al.*, Revealing the Atomic Site-Dependent g Factor within a Single Magnetic Molecule via the Extended Kondo Effect, *Phys. Rev. Lett.* 2015, 114, 126601.
- 【3】 L.W. Liu *et al.*, Reversible Single Spin Control of Individual Magnetic Molecule by Hydrogen Atom Adsorption, *Sci. Rep.* 2013, 3, 1210.
- 【4】 L. Gao *et al.*, Site-Specific Kondo Effect at Ambient Temperatures in Iron-Based Molecules, *Phys. Rev. Lett.* 2007, 99, 106402.

基金项目: 国家自然科学基金 (No 61888102), 科技部 (Nos: 2016YFA0202300, 2017YFA0302900) 和中国科学院 (XDB30000000) 等。

二维硫化钨的可控合成及其在光电子器件中的应用

兰长勇

电子科技大学光电科学与工程学院, 四川省成都市建设北路二段4号 610054

Email: cylansc@gmail.com

摘要: 自从石墨烯被发现以来, 二维材料引起了研究人员的广泛关注和研究。由于二维材料表面无悬挂键, 电子可以在其中相对自由的运动, 有望取代 Si, 成为新一代半导体材料。二维材料的实际应用面临诸多问题, 其中大面积可控合成高质量的二维材料依然是个挑战。化学气相沉积在合成大面积二维材料方面具有显著的优势, 且易于调控, 成为了合成大面积二维材料的首选。硫化钨是一种类石墨烯材料, 具有范德瓦尔斯层状结构, 表现出新奇的物理性质。不同于石墨烯的是, 硫化钨是一种半导体, 理论预测具有较高的电子迁移率, 且单层硫化钨能约 10% 的入射光, 在晶体管和光电探测器领域具有潜在的应用价值。

我们采用化学气相沉积方法合成了大面积的单层硫化钨薄膜, 结合生长参数和多种表征手段, 如拉曼光谱、光致发光光谱、透射电子显微镜和扫描电子显微镜等, 细致地研究单层硫化钨的生长机制; 通过制作场效应晶体管和光电探测器, 研究了单层硫化钨的载流子输运特性和光电探测特性。此外, 还制备了基于单层硫化钨的柔性光电探测器, 表现出较好的柔性性能。

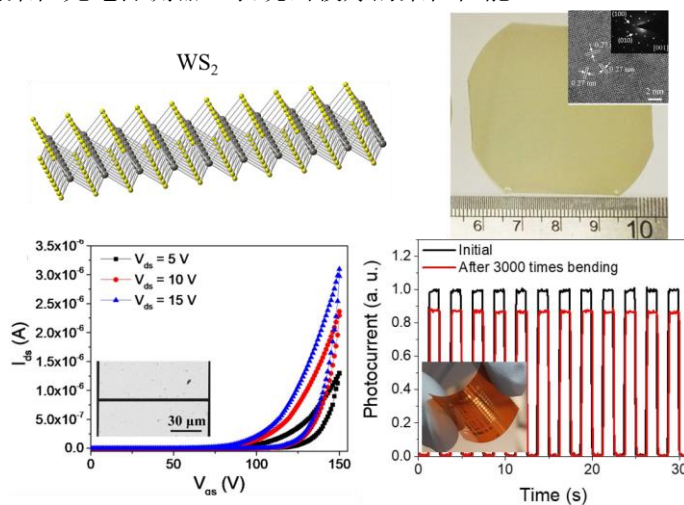


图 1 单层硫化钨的大面积合成和光电子器件应用

关键词: 二维材料、硫化钨、半导体、化学气相沉积、晶体管、光电探测器

参考文献

【1】C. Lan, *et al.*, Wafer-Scale Synthesis of Monolayer WS₂ for High-Performance Flexible Photodetectors by Enhanced Chemical Vapor Deposition, *Nano Res.* 2018, 11(6), 3371-3384.

【2】C. Lan, *et al.*, Direct Visualization of Grain Boundaries in 2D Monolayer WS₂ via Induced Growth of CdS Nanoparticles Chains, *Small Methods*, 2019, 3(2), 1800245.

基金项目: 国家自然科学基金(61605024)和中央高校业务费(ZYGX2018J056)

弹道输运石墨烯中的负数非局域电阻及反常涡流产生的数值研究

王孜博、刘海文、江华、谢心澄

中国工程物理研究院微系统与太赫兹研究中心，成都 610200

中国工程物理研究院电子工程研究所，绵阳 621999

Email: wangzibo@mtrc.ac.cn

摘要：除了非局域电阻 R_{NL} 在狄拉克点处的巨大峰值，人们还在石墨烯系统中观测到了一个反常的负数 R_{NL} ，而对于这个负数电阻的产生机理仍然不甚清楚。在我们的报告中，我们将介绍一个通过非平衡格林函数方法，在弹道输运区对 H 型无相互作用的石墨烯系统进行全数值局域电流分布的计算结果。类似于之前在粘性流体力学中的得到的结论，数值结果显示弹道输运同样可以在非局域测量端之间产生一个涡流，这个涡流可以诱导反向电流的产生并进一步导致测量端可以得到一个明显的负数电压降。具体来说，涡流越强， R_{NL} 的负数值表现的越明显。接下来，通过改变 H 型系统的边界条件以及与四角晶格的局域电流分布的对比，我们确认了边界条件及石墨烯的线性色散关系对涡流产生的贡献。此外，有趣的是，这个弹道输运系统中还可以得到一个反常的“非局域 Wiedemann-Franz law”的违背。基于上述现象以及 R_{NL} 的负数值可以通过 Rashba 自旋轨道耦合强度来调节的特性，我们最后给出了两种可以确认弹道输运区中这种奇异的涡流是否真实存在的实验判据。

关键词：弹道输运 石墨烯 非局域电阻

参考文献

- 【1】 Z. Wang *et al.*, Numerical study of the negative nonlocal resistance and the backflow current in a ballistic graphene system, *arXiv:1905.01064*

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11704348）

Van der Waals Integration to Artificial Heterostructures and High Performance Devices

Xiangfeng Duan

University of California, Los Angeles, CA 90095, USA

Email: xduan@chem.ucla.edu

The heterogeneous integration of dissimilar materials is a long pursuit of material science community and has defined the material foundation for modern electronics and optoelectronics. The typical material integration strategy such as chemical epitaxial growth usually involves strong chemical bonds and is typically limited to materials with strict structure match and processing compatibility. Alternatively, *van der Waals* integration, in which pre-formed building blocks are physically assembled together through weak *van der Waals* interactions, offers a bond-free material integration approach without lattice and processing limitations, as exemplified by the recent blossom of 2D vdW heterostructures. Here I will discuss the fundamental forces involved in *van der Waals* integration and generalize this approach for flexibly integration of radically different materials to create diverse heterostructures with minimum integration-induced damage and interfacial states, enabling high-performing devices difficult to achieve with conventional “chemical integration” approach. Recent highlights include the formation of *van der Waals* metal/semiconductor contacts free of Fermi level pinning to reach the Schottky-Mott limit; the development of *van der Waals* thin films for high performance large area electronics; and the creation of a new class of *van der Waals* 2D-molecular superlattices with highly distinct layers yet atomic precision in each layer. I will conclude with a brief prospect on exploring such artificial heterostructures as a versatile materials platform electronic structure by design to unlock new physical limits and enable devices with unprecedented performance or entirely new functions beyond the reach of the existing materials.

报告人简介:

段镶锋于 1997 年毕在中国科技大学取得学士学位，并分别于 1999 年和 2002 年在美国哈佛大学取得硕士与博士学位。基于其博士论文成果，他于 2002-2008 年参与组建 Nanosys 创业公司。2008 年加入美国加州大学洛杉矶分校，现为该校终身教授。段教授长期从事纳米材料与器件领域的研究，尤其在二维材料及其异质结的可控合成，范德华集成，以及相关新型器件等方面取得了一系列开创性成果。2010-2012 年间，段镶锋研究团队在国际上首先利用范德华力通过物理组装的方式实现了石墨烯与栅介质及栅极的无损集成，成功演示了最高速度的石墨烯三极管；此后他把此方法推广应用，实现了一系列的二维/零维、二维/一维、二维/二维及二维/三维材料范德华异质结、大面积范德华薄膜及其高性能器件的集成；他于 2018 年进一步实现了二维半导体与普通金属电极的无键、无损范德华集成，首次实现了无缺陷、无费米钉扎效应的近理想金属-半导体肖特基结，从实验上验证了 1930 年代预期的肖特基-莫特极限。同时，他的团队于 2014 年开创性的发展了二维原子晶体异质结的理性设计与合成；于 2017 年在国际上首次实现二维原子晶体平面内多重异质结及超晶格结构；并进一步于 2018 年发展了一种分子插层自组装方法，首次制备了二维原子晶体/自组装分子层超晶格，实现了对二维材料结构及其光、电性能的多重调控。此一系列相关研究超越了传统异质结中需要晶格或合成条件匹配的局限，前所未有的实现了多种材料结构或多种电子结构的精确集成，为未来材料学及新型器件的发展提供了一个全新的材料平台。此外，段镶锋团队也在三维多孔石墨烯及其复合储能材料和纳米催化方面也取得了一系列突破性成果。段镶锋教授曾多次获得国际大奖，包括美国青年科学家总统奖；国际材料学会联合会-新加坡材料学会青年研究员奖，英国皇家化学学会贝尔比奖章，和国际电化学学会田昭武能源材料奖等。



Van der Waals stacking dependent interlayer magnetic coupling

高春雷

复旦大学物理学系, 表面物理国家重点实验室,
复旦大学微纳电子器件与量子计算机研究院, 上海, 200433

Email: clgao@fudan.edu.cn

摘要: Controlling the crystal structure is a powerful approach for manipulating the fundamental properties of solids. Unique to two-dimensional (2D) van der Waals materials, the control can be achieved by modifying the stacking order through rotation and translation between the layers. Here, we report the first observation of stacking dependent interlayer magnetism in the 2D magnetic semiconductor, chromium tribromide (CrBr₃), enabled by the successful growth of its monolayer and bilayer through molecular beam epitaxy. Using in situ spin-polarized scanning tunneling microscopy and spectroscopy, we directly correlated the atomic lattice structure with observed magnetic order. We demonstrated that while individual CrBr₃ monolayer is ferromagnetic, the interlayer coupling in bilayer depends strongly on the stacking order and can be either ferromagnetic or antiferromagnetic. Our observations provide direct experimental evidence for exploring the stacking dependent layered magnetism, and pave the way for manipulating 2D magnetism with unique layer twist angle control.

Discovering the forbidden Raman modes at the edges of layered materials

Yang Chai

Department of Applied Physics, The Hong Kong Polytechnic University

Email: ychai@polyu.edu.hk

The edges of layered materials have unique properties that substantially differ from the body regions. In this work, we perform a systematic Raman study of the edges of various layered materials (MoS₂, WS₂, WSe₂, PtS₂, and black phosphorus). The Raman spectra of the edges feature newly observed forbidden Raman modes, which are originally undetectable from the body region. By selecting the edge type and the polarization directions of the incident and scattered light, all forbidden Raman modes are distinctly detected. Optical simulations show that the edges of layered materials drastically distort the electromagnetic fields of both the incident and scattered light, so that the light interacts with the edges in a distinct way, which differs from its interactions with the body regions.

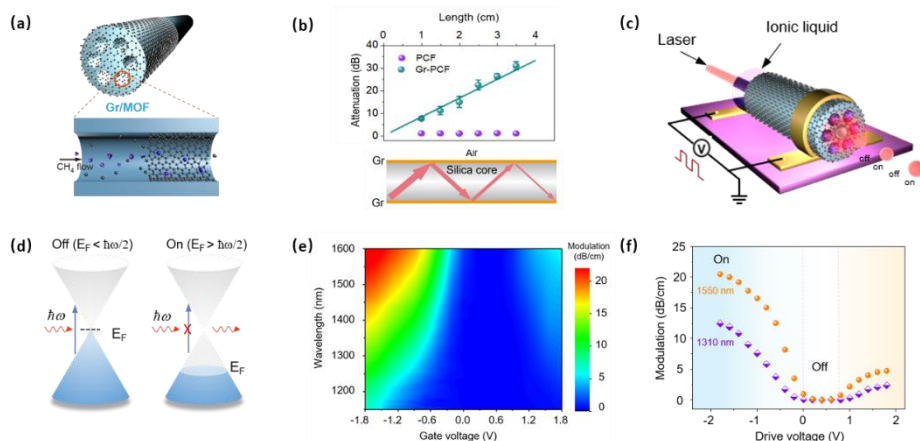
石墨烯光子晶体光纤及电光调制器研究

周旭^{1,3}、刘开辉*^{1,3}、刘忠范*^{2,3}

1. 人工微结构和介观物理国家重点实验室, 北京大学物理学院, 北京, 100871;
2. 北京市低维碳材料科学与工程研究中心, 北京分子科学国家实验室, 北京大学化学与分子工程学院, 北京, 100871;
3. 北京石墨烯研究院, 北京, 100095;
zfliu@pku.edu.cn; khliu@pku.edu.cn

光纤是现代数字通讯的基石, 而光子晶体光纤则是近 20 多年来光纤光学领域的最重要进展。光子晶体光纤包层有微小空气孔, 其排布影响着纤芯中的光传输; 此外, 空气孔内可填充各种功能型材料, 这些都极大地丰富和拓展了光纤的功能和应用范围。近十多年, 研究火热的二维石墨烯材料具有独特的光电性质, 比如宽光谱响应和电光可调等性质。所以, 石墨烯的兴起很自然地极大地激发了人们将光纤与石墨相结合的研究兴趣和热情。另一个方面, 微观上单层石墨烯虽然有很强的光与物质相互作用 (~2.3% 光吸收率), 但是宏观上 2.3% 的相互作用强度还是难以探测的和利用, 所以增强石墨烯光与物质相互作用是石墨烯实际应用的一个重要研究方向。而将石墨烯与光子晶体光纤这种高品质光波导结合可以极大的增强光与石墨烯相互作用强度。在此, 我们用化学气相沉积生长法制备出最长可达米级的石墨烯光子晶体光纤。其中, 石墨烯薄膜直接生长贴覆在光子晶体光纤的空气孔内壁, 且并不影响光纤的传输模式。石墨烯光子晶体光纤中, 石墨烯与多次全反射的光相互作用极大地增强了光与石墨相互作用强度, 光衰减系数高达~8 dB/cm。更进一步, 我们利用离子液体栅压技术将石墨烯光子晶体光纤制成全光纤型的电光调制器, 其具有宽的光谱响应范围(1150 - 1600 nm), 大的调制深度 (~20 dB/cm @ 1550 nm) 以及非常低的工作电压 (~2 V)。我们的实验结果将推动石墨烯光电子器件的工业化应用以及多功能光纤器件研究更进一步, 同时为开发各种二维材料复合光纤材料提供重要的参考方向, 也为开发新型二维材料光纤器件开辟一条新的道路。

关键词: 石墨烯, 光纤, 电光调制器



锂电池失效机理原位电镜研究

黄建宇 (Huang Jianyu)

燕山大学亚稳材料国家重点实验室清洁纳米能源中心

湘潭大学材料科学与工程学院

Email: jyhuang8@hotmail.com

摘要：锂电池在循环过程中电极材料反复嵌锂和脱锂会引起其体积反复膨胀和收缩，从而导致电极材料和固体电解质膜的疲劳断裂。在固态锂电池中，电极材料的反复膨胀和收缩会导致电极和电解质界面产生裂纹，从而阻碍锂离子传导，最终导致电池失效。此外，锂支晶刺穿固态电解质会导致电池短路而诱导火灾。以上基础力学问题是制约锂电池发展和应用的瓶颈所在，但由于实验困难，对这些基础力学问题的研究还处于初级阶段。本研究组在锂电池纳米力学研究领域做出了一些原创性工作。在国际上率先制造出在高真空度电镜中工作的锂电池，发明了原子尺度实时观察锂离子电池充放电过程的新技术，开创了原位纳米尺度电化学和纳米力学研究的新领域，为研究锂离子电池的关键性课题提供了有效的技术条件，发现了锂嵌入晶体硅的临界尺寸效应，既锂嵌入硅导致的晶体硅颗粒断裂有强烈的尺寸效应：当晶体硅的晶粒尺寸大于 150nm 时，锂嵌入晶体硅后会断裂并粉末化；但当硅晶粒尺寸小于 150nm 时，晶体硅颗粒就不会断裂或粉末化。这一现象的原因是当硅的晶粒尺寸小于临界尺寸时，锂嵌入硅产生的应力不足以在晶体硅表面产生裂纹并进一步驱动裂纹扩展。结合原位 TEM-AFM 以及环境球差矫正电镜，实现了固态锂电池锂支晶原位生长、屈服强度和杨氏模量的定量测量。这些研究结果为研发高能量密度、高功率密度、长寿命锂电池提供了坚实的科学基础。

关键词：锂电池 原位电镜 纳米力学

基金项目：国家自然科学基金项目（51772262），国家重点研发计划

（2018YFB0104300，2017YFB0702001）

氧化物纳米储能材料中的相转化与界面问题

苏东

中国科学院物理研究所, 北京 100190, 中国

Email: dongsu@iphy.ac.cn

摘要: 纳米储能材料的性能和材料本身的性质, 包括结构、界面、相转化有着直接的关系。课题组团队采用电子显微镜方法, 结合性能测试和第一性原理计算, 研究了锂离子电池电极材料中的结构和一些电化学性能的相关性。通过结合原位和非原位电镜方法, 我们研究了氧化物材料在转发反应中的反应路径和反应动力学。对于尖晶石结构负极材料 (Fe_3O_4 、 Co_3O_4), 我们发展了明场扫描透射电镜方法观察应力相关衬度, 并揭示了反应动力学和电化学曲线的关系 [1-2]。我们发现在压应力情况下, 转发反应的反应路径可以被反应自身产生的应力与外应力耦合所影响 [3]。随后, 该团队利用类似方法研究了经过外部循环后反应, Fe_3O_4 电极的微观反应过程, 并提出反应中动态产生的内部钝化层是降低电池容量的重要原因 [4]。

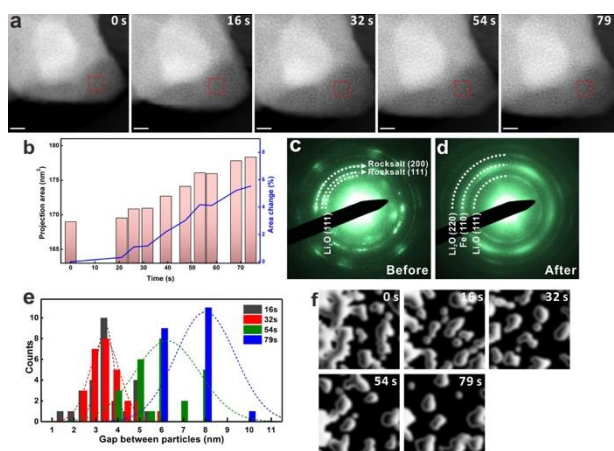


图 1 循环实验后 Fe_3O_4 电极材料的原位锂化实验

关键词: 原位电子显微镜, 锂离子电池, 纳米材料, 氧化物电极材料

参考文献:

- 【1】 K. He *et al.*, Visualizing Non-Equilibrium Lithiation of Spinel Oxide via In Situ Transmission Electron Microscopy, *Nat. Comm.* 2016, 7:11441.
- 【2】 J. Li *et al.*, Kinetic Phase Evolution of Spinel Cobalt Oxide during Lithiation, *ACS Nano.* 2016, 10, 9577.
- 【3】 S. Hwang *et al.*, Strain Coupling of Conversion-type Fe_3O_4 Thin Film for Lithium Ion Battery, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 7813.
- 【4】 J. Li *et al.*, Kinetic Phase Evolution of Spinel Cobalt Oxide during Lithiation, *Nat. Comm.* 2019, 10:2224.

基于钙钛矿的超构表面的研究

肖淑敏

哈尔滨工业大学（深圳），深圳，518055

Email: shummin.xiao@hit.edu.cn

摘要：超构表面是一种基于广义斯涅尔定律，通过控制波前相位、振幅以及偏振进行电磁/光学波束调控的新结构，其新颖的机制和灵活的结构设计展现出广阔的应用前景。传统的超构表面是利用金属天线构建的，因此具有较大的损耗，而高折射率介质材料利用 Mie resonance 的方式实现对光的有效操控，实现了对光相位、波前的改变，从而获得了低损耗的超构表面。本报告将主要介绍课题组近年来在基于钙钛矿材料实现线性和非线性超构表面的研究，并探索这些物理现象的新的应用。

关键词 超构表面，波前调控，纳米谐振腔

外延纳米结构钒酸铋单晶异质结制备和光催化性能

李国强

河南大学光伏材料省重点实验室, 物理与电子学院, 开封 475004

Email: gqli1980@henu.edu.cn

摘要: 钒酸铋(BVO)作为一种铋系层状钙钛矿材料受到研究者的广泛关注。从研究样品的种类方面看, 主要是粉末样品和多晶薄膜。粉末样品用光催化分解水悬浮体系, 多晶薄膜主要是以光电极的形式构成光电化学系统。以上两种方式主要是提高其光量子效率。限于粉末样品的形式, 其对于光电转换机理方面的研究非常有限, 甚至是多有矛盾。单晶薄膜, 特别是物理法制备的单晶薄膜, 由于其表面干净和可控性好, 非常适合做基础光物理方面的研究。本文利用脉冲激光沉积技术, 采用晶格匹配度最高的YSZ(001)单晶作为衬底, 研究了衬底温度、靶材成分、沉积时间等条件对薄膜的相组成的影响。在以上基础上, 制备了BVO/TiO₂异质结光催化材料, 研究了其物相组成, 电子转移以及光催化性能。

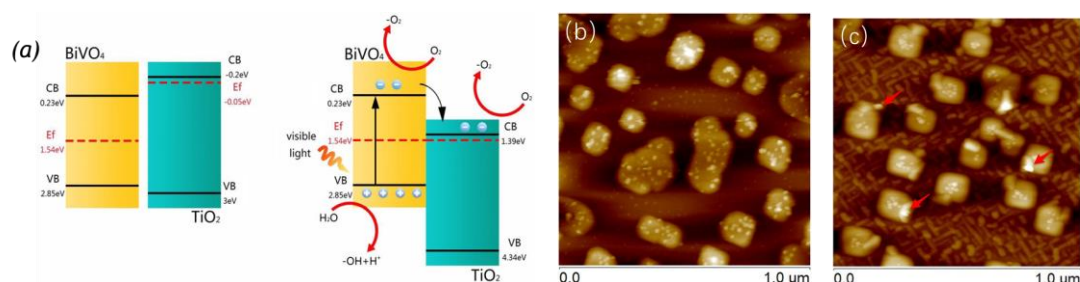


图 1 BiVO₄/TiO₂ 能带匹配关系 (a), BiVO₄ (b) 和 BiVO₄/TiO₂ (c) 光沉积银颗粒后的原子力显微照片。

关键词: 钒酸铋 光催化

参考文献

- 【1】 G. Li, *et al.*, Photocatalytic behaviors of epitaxial BiVO₄ (010) thin films, *Appl. Catal. B: Environ.*, 2019, 248, 115-119.
- 【2】 G. Li, *et al.*, Target stoichiometry and growth temperature impact on properties of BiVO₄ (010) epitaxial thin films, *CrystEngComm*, 2018, 20, 6950.
- 【3】 Q. Yu *et al.*, Enhanced Photocatalytic Activity and Charge Transfer of TiO₂/BiVO₄ nanostructured composite, *Catal. Sci. Technol.*, revised

基金项目: 河南省高校科技创新人才支持计划 (17HASTIT014)

金属催化材料的电荷本质表征

罗俊

天津理工大学材料科学与工程学院、新能源材料与低碳技术研究院、电镜中心、天津市先进多孔功能材料重点实验室, 天津 300384

Email: luojunkink@126.com

摘要: 金属催化材料是金属材料科学和催化科学的前沿, 其催化过程的本质是反应物、中间产物和金属催化材料表面之间进行动态电荷转移, 因此, 金属催化剂的表面电荷分布直接决定其催化性能。但是, 实验观察分析该类材料的表面电荷分布及其在催化过程中的动态转移仍是国内外学术界面临的难题。已有报道表明, 该类材料的表面电荷分布决定于表面原子的结构、应变和成分。鉴于此, 汇报人及其所领导的课题组成功发展催化材料表面原子的成分解析方法和电荷解析方法、以及原子分辨的工况原位方法, 并通过这些方法在原子水平上揭示多种金属催化材料的性能根源及其催化动态过程, 有望在实验上实现观察和分析金属催化材料的动态电荷本质、为定制高新金属催化剂提供一定的科学建议。

关键词: 金属催化材料 电荷本质 表征

参考文献

- 【1】 Cao et. al., Doping Strain Induced bi-Ti³⁺ Pairs for Efficient N₂ Activation and Electrocatalytic Fixation, Nature Commun., 2019, 10, 2877.
- 【2】 Lu et. al., An Isolated Zinc-Cobalt Atomic Pair for Highly Active and Durable Oxygen Reduction, Angew. Chem. Int. Ed., 2019, 58, 2622.
- 【3】 Han et. al., Atomically Dispersed Molybdenum Catalysts for Efficient Ambient Nitrogen Fixation, Angew. Chem. Int. Ed., 2019, 58, 2321.
- 【4】 Lang et. al., Non Defect-Stabilized Thermally Stable Single-Atom Catalyst, Nature Commun., 2019, 10, 234.
- 【5】 Liu et. al., Self-Powered H₂ Production with Bifunctional Hydrazine as Sole Consumable, Nature Commun., 2018, 9, 4365.
- 【6】 Ma et. al., Rechargeable Al-CO₂ Batteries for Reversible Utilization of CO₂, Adv. Mater., 2018, 30, 1801152.
- 【7】 Zhang et. al., Potential-Cycling Synthesis of Single Platinum Atoms for Efficient Hydrogen Evolution in Neutral Media, Angew. Chem. Int. Ed., 2017, 56, 13694.
- 【8】 Li et. al., Surface Evolution of a Pt-Pd-Au Electrocatalyst for Stable Oxygen Reduction, Nature Energy, 2017, 2, 17111.

基金项目: National Key R&D Program of China (2017YFA0700104); National Natural Science Foundation of China (51761165012); National Program for Thousand Young Talents of China.

二维材料-介电层界面热阻调控与热管理

徐象繁[§], 李保文

¹ 同济大学物理科学与工程学院, 声子学与热能科学中心, 上海 200092

² 同济大学物理科学与工程学院, 中欧纳米声子学联合实验室, 上海 200092

Email: [§xuxiangfan@tongji.edu.cn](mailto:xuxiangfan@tongji.edu.cn)

摘要: Interfacial thermal resistance (ITR) plays an important role in thermal dissipation across different materials and it has been widely investigated in recent years. An example is the integrated electronic circles in which heat dissipating issue has recently become the bottleneck. With further miniaturization of electronics, the accumulated waste heat has increased the operating temperature to a high value where thermal management and heat dissipation become crucial for the performance of devices ^[1]. The severe thermal management problem has prevented the operating frequency from going beyond several GHz when the dissipated waste heat exceeds 100 Wcm^{-2} . This work is separated into two parts: (a) We introduced an additional electron-phonon coupling channel in the thermal transport across graphene-dielectric interfaces and the scanning thermal microscopy technique measurement of graphene electronic devices gave direct evidence of an enhanced heat dissipation by tuning the surface carries concentration ^[2]. (b) Chemical vapor deposition (CVD) method was utilized to fabricate mono-layer transition metal dichalcogenides (TMDCs) depositing directly onto SiO_2/Si substrate; we demonstrated that the interfacial thermal conductance of TMDCs/oxide was significantly promoted by introducing a stronger combination at the interface of TMDCs/oxide ^[3-5].

关键词: 二维材料, 界面热阻, 热调控, 电声耦合通道

参考文献:

- [1] X. Xu, J. Chen, J. Zhou and B. Li, *Adv. Mat.* **30**, 1705544 (2018)
- [2] Y. Zhang *et al.* submitted to *ES Energy & Environmental*
- [3] J. Guo *et al.* *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52**, 385306 (2019).
- [4] X. Li *et al.* *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50**, 104002 (2017)
- [5] D. Liu *et al.* *Nat. Comm.* **10**, 1188 (2019)

单层过渡金属硫族化合物的缺陷与光谱研究

钱立华¹、武可¹、张顺平²

¹ 华中科技大学物理学院, 武汉 430074

² 武汉大学物理科学与技术学院, 武汉 430072

Email: lhqian@hust.edu.cn

摘要: 过渡金属硫族化合物在催化、光电探测等方面都有广泛的应用前景。其中调控缺陷态是提高性能的关键问题。本报告中, 我们采用化学气相沉积技术, 通过调节样品生长过程中注入氢气的浓度, 调控单层二硫化钼的硫缺陷浓度。硫缺陷为氧分子吸附提供位点, 导致掺杂效应和非辐射复合抑制, 从而实现荧光强度的增强。氢气浓度为 7% 时, 所得到的二硫化钼发光效率是其完美晶体的 3 倍(见图 1))。氢气浓度注入缺陷增强荧光强度的手段保持了二硫化钼结构完整, 过程温和可控。同时也制备了缺陷态的单层二硫化钨, 研究了缺陷类型与浓度对发光的影响, 发现在六边形二硫化钨中, W_{Sx} 和 S_x 缺陷浓度越高, 材料荧光强度越高。通过变温荧光光谱测试, 发现从 5K 升温至 295K 过程中, 单层二硫化钨荧光强度由缺陷发光主导向激子发光主导转变。

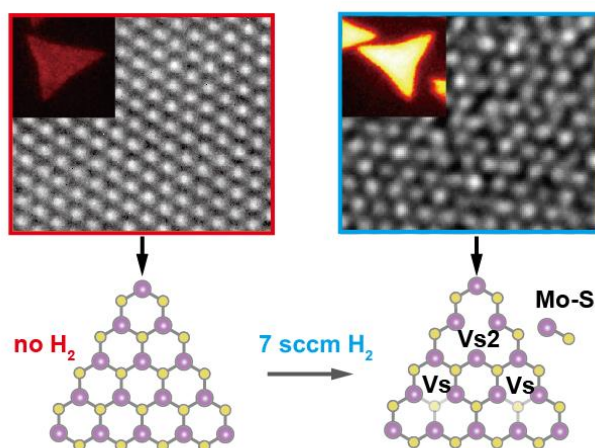


图 1. 单层 MoS₂ 的缺陷调控对光致发光性能

关键词: 过渡金属硫族化合物 激子 缺陷 荧光光谱 拉曼光谱

参考文献

- 【1】 Ke Wu, Zhe Li, Jibo Tang, Xianglong Lv, Hailing Wang, Ruichun Luo, Pan Liu, Lihua Qian, Shunping Zhang, and Songliu Yuan, Controllable defects implantation in MoS₂ grown by chemical vapor deposition for photoluminescence Enhancement, *Nano Res.* 2018, 11(8): 4123 - 4132.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 91545131, 11674255, and 51371084)

压电电子学效应调控柔性 $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ 范德华异质结

林沛

郑州大学物理工程学院, 郑州 450052

Email: linpei@zzu.edu.cn

摘要: 由于限域效应引起的一些列新特性, 对二维纳米材料的研究已成为当前凝聚态物理与材料科学领域关注的重要热点之一。从晶体学角度讲, 二维形貌体现出三维晶体结构对称性的自发破缺。以 2H-MoS_2 为例, 其块体具有 D_{6h} 点群结构; 而单层 MoS_2 属于 D_{3h} 点群, 由于中心对称性的消失从而具有本征的压电性能。因此与块体相比, 单层 MoS_2 可以实现与外部机械应变的直接耦合, 并使得通过压电光电子学效应进行范德华异质结性能的调控成为可能。

我们首先通过缺陷修复与化学钝化的方法提高了化学气相沉积制备的单层 MoS_2 结晶性, 降低载流子浓度对压电极化电荷的屏蔽, 进而改善其压电特性。其次, 利用精确转移平台在柔性 PET 衬底上构筑了高质量 $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ 范德华异质结, 并观察到明显的光伏现象。系统研究了压电电子学效应对器件光响应性能的影响, 当沿“armchair”方向对 MoS_2 施加 0.62% 压缩应变时器件光响应度提高了 86%。性能提升主要来自 MoS_2 中压电极化电荷对异质结能带结构的调控, 提高了界面处光生载流子的分离效率。与传统栅压调控范德华异质结相比, 压电电子学效应提供了一种利用应变直接调控异质结性能的新方法, 并可为新型柔性范德华电子/光电子器件结构设计提供思路。

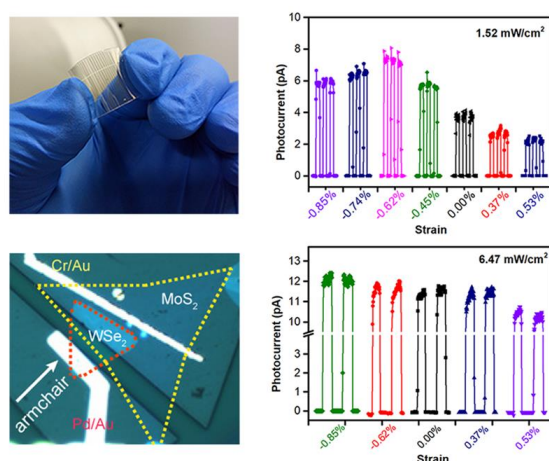


图 1 柔性 $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ 范德华光电二极管与性能的应变调控

关键词: 二维材料 范德华异质结 压电光电子学效应 柔性光伏

参考文献

- 【1】 P. Lin *et al.*, Piezo-Phototronic Effect for Enhanced Flexible $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ van der Waals Photodiodes, *Adv. Funct. Mater.* 2018, 28, 1802849.

基金项目: 国家自然科学基金项目(NO.51702017)

有机微纳单晶大面积图案阵列化及其高性能场效应器件

揭建胜

苏州大学功能纳米与软物质研究院 (FUNSOM), 苏州 215123

Email: jsjie@suda.edu.cn

摘要: 传统有机半导体的非晶或多晶薄膜受限于薄膜内部存在的大量缺陷与晶界, 载流子迁移率等关键光电性能难以提高。此外, 由于弱的范德华作用力的相互作用, 大面积的有机单晶薄膜难以获得, 因此目前有机半导体光电器件的性能仍显著低于相应的无机半导体器件。近年来, 具有优异光电性能的有机微纳单晶材料的研究取得了重大进展, 它不仅保留了有机单晶材料所具有的优异特性, 同时又兼具微纳米尺度下纳米材料的新现象、新效应, 为构筑基于有机单晶体系的高性能器件提供了希望与可能。然而, 单个有机微纳晶体通常呈现出生长位置的随机性和生长取向的无序性, 这就给其器件的规模集成造成了困难, 严重阻碍了其实际应用的发展。因此实现有机微纳单晶的有序阵列与图案化组装是突破其在高性能有机半导体光电器件中应用的关键。而面向器件应用, 有机微纳晶体的组装还必须满足几个基本要求: 首先, 大面积有机单晶材料的组装是推动其向集成器件规模应用的关键; 其次, 对于实际器件应用来说, 还必须保证器件与器件之间的高重复性、均一性, 以及器件良好的稳定性, 这就要求晶体的形貌、结构及生长取向在组装过程中保持高度的一致性; 最后, 功能器件与集成器件的构筑, 还需要建立在实现多组分、多层次组装的基础上。针对以上关键科学问题, 我们提出一种“多尺度协同组装”的新策略, 从分子聚集态(分子尺度)→晶体成核生长(微纳尺度)→图案阵列化排布(宏观尺度)这三个不同层次对有机单晶光电材料的组装行为进行调控。在分子层次调控分子间多重弱相互作用力自组装形成有机单晶, 同时采用微纳模板引导有机晶体的成核与定向生长得到有序的单晶阵列, 并进而在宏观层面结合溶液涂布技术, 实现了有机单晶大面积、高度均一、多组分多层次的图案阵列化组装。在此基础上, 我们构筑了基于微纳单晶阵列的高性能有机场效应晶体管并对其性能进行了深入研究。

关键词: 有机微纳单晶 图案阵列化 场效应晶体管 光电器件

参考文献

- 【1】 Zhibin Shao, Jiansheng Jie *et al.*, Nat. Commun. 2019, 10, 1294
- 【2】 Xiujuan Zhang, Jiansheng Jie *et al.*, Adv. Mater. 2018, 30, 1800187.
- 【3】 Wei Deng, Jiansheng Jie *et al.* Mater. Today, 2019, 24, 17.
- 【4】 Wei Deng, Jiansheng Jie *et al.*, Adv. Mater. 2015, 27, 7305.

In situ synchrotron X-ray techniques for functional nanomaterials

陈刚

物质科学与技术学院, 上海科技大学, 上海 201210

Email: gchen@shanghaitech.edu.cn

Today, nanotechnology has a broad impact on social, economic and scientific sectors. In view of their typical length scale, nanomaterials could not be easily measured by an optical microscope, but mainly through electron and atomic force microscopes. They usually require special sample treatments and test conditions, which makes an in situ measurement difficult. Synchrotron x-rays, due to their specific wavelengths, large flux, high penetration and tunable photon energy, play an important role in nanomaterial characterizations. In this talk, I will discuss our recent progresses of in situ X-ray and optical studies of plasmonic nanostructures, perovskite films and colloidal nanoparticles. The growth mechanism of gold plasmonic nanostructures and the dynamic formation and conversion processes of metal halide perovskite films are revealed through the in situ investigations. The unexpected discovery of the immersion depth variation with interparticle distances leads up to unveil the haunting mystery of the attractive interaction between like-charged interfacial particles.

参考文献: *Nano Lett.* **19**, 5237 (2019); *Adv. Funct. Mater.* **29**, 1902319 (2019); *Appl. Phys. Lett.* **114**, 141601 (2019) (Cover & Editor's Pick); *Nature Commun.* **9**, 1335 (2018); *Adv. Mater.* **30**, 1706401 (2018); *Angew. Chem. Int. Ed.* **57**, 8130 (2018); *Nano Lett.* **16**, 4166 (2016); *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, 8338 (2014).



陈刚个人简介: 2000年毕业于中国科学技术大学物理系, 获学士学位。2007年于美国普渡大学, 获物理学博士学位。2007年—2011年, 在美国加州大学圣地亚哥分校物理系从事博士后研究。2011年—2012年, 受聘于美国劳伦斯伯克利国家实验室的物理和材料部门。2012年10月, 以中科院“百人计划”引进海外杰出人才加入中科院上海应用物理研究所(研究员), 并于2013年入选中组部“青年千人计划”。2015年1月加入上海科技大学物质科学与技术学院, 任研究员。近年在 *Nature Communications*, *Physical Review Letters*, *Applied Physics Letters*, *Nano Letters*, *Advanced Materials*,

Angewandte Chemie, *ACS Nano* 等国际知名期刊以通讯作者发表多篇论文; 主持国家基金委联合基金重点项目、面上项目和上海市基础研究重点项目等课题。

纳米尺度下共价晶体(硅与金刚石)的超弹性现象及其弹性应变工程

陆洋

香港城市大学机械工程学系, 香港 九龙塘

Email: yanglu@cityu.edu.hk

摘要: 由于其优异的物理特性, 纳米尺度宽禁带半导体的变形研究在近几十年内引起了广泛的关注。然而, 能否将这些功能性器件里纳米构件的全部潜能开发出来则取决于其在相应尺度下机械性能以及稳定性的了解。在该报告中, 我们将会对其在单个硅纳米线和金刚石纳米针等间接带隙半导体纳米结构的纳米力学方面的研究进行报告。基于自主开发的原位纳米力学测试技术, 我们发现采用“自下而上”气液固方法生长的直径在一百纳米左右的单晶硅纳米线可以在室温下被循环拉伸至 10% 以上的弹性应变 (Sci. Adv. 2016)。个别样品的弹性应变甚至达到了 16%, 接近了硅的理论弹性变形极限。通过对应的第一性原理计算模拟发现, 在此超大弹性应变下硅的带隙结构可以从间接带隙转变为直接带隙, 甚至实现金属化转变 (JPCC, 2018; JAP 2019)。我们进一步对具有更宽带隙的金刚石纳米针样品进行了变形研究, 发现单晶金刚石纳米针可以承受超大弹性弯曲变形, 局部拉伸应变达到了 9% (Science 2018), 对应局部强度为 89-98GPa。在如此巨大的弹性应变条件下, 半导体晶体内部严重的晶格畸变会引起材料的电子结构发生变化, 并进一步改变其电学、光学以及磁学特性。实验结果除了对宽带隙半导体晶体在“柔性电子器件”应用有着重要启发意义外, 超大弹性所引发的晶体带隙结构的调控也为其在“弹性应变工程”领域内的应用提供可能。

关键词: 纳米力学 硅纳米线 金刚石 超大弹性 应变调控 能带工程

参考文献

- 【1】 Zhang, H., Tersoff, J., Xu, S., Chen, H., Zhang, Q., Zhang, K., Yang, Y., Lee, C.-S., Tu, K.-N., Li, J., Lu, Y. "Approaching the ideal elastic strain limit in silicon nanowires" *Science Advances* 2 (8) e1501382, 2016
- 【2】 Li, S., Chou, J-P., Zhang, H., Lu, Y., Hu, A. "A study of strain-induced indirect-direct bandgap transition for silicon nanowire applications" *Journal of Applied Physics* 125, 082516, 2019
- 【3】 Li, S., Zhang, H., Chou, J-P, Wei, J., Lu, Y., Hu, A. "Deep Ultra-Strength"-Induced Band Structure Evolution in Silicon Nanowires" *The Journal of Physical Chemistry C* 122, 15780–15785, 2018
- 【4】 Banerjee, A.*, Bernoulli, D.*, Zhang, H.*, Yuen, M.F., Liu, J., Dong, J., Ding, F., Lu, J., Dao, M., Zhang, W., Lu, Y., Suresh, S. "Ultralarge elastic deformation of nanoscale diamond" *Science* 360, 300–302, 2018

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No. 51301147); 香港研究资助局 GRF No. CityU11216515 以及 No. CityU11207416

基于二维 PdSe₂ 异质结的高偏振灵敏、宽波段、自驱动光电探测器

吴翟¹、揭建胜²

¹ 郑州大学物理学院, 郑州 450002

² 苏州大学功能纳米与软物质研究院, 苏州 215123

Email: wudi1205@zzu.edu.cn

摘要: 近年来, 随着军事和民用领域对高精度宽波段光电探测器的重大需求, 因此研发高偏振敏感的宽光谱响应的光电探测器显得尤为迫切。然而, 目前具有偏振响应的二维材料存在着空气稳定性差, 响应波段窄等缺点, 严重限制了其进一步应用。该研究发展了一种制备晶圆级大面积的具有优异化学稳定性、宽波段敏感的二维材料二硒化铂 (PdSe₂)。此种材料具有带褶皱的五边形排列的晶体结构, 这种强不对称的晶体结构使其具备了良好的各向异性光响应特性, 从而具备了探测偏振光信号的能力。通过创新性的构建 Graphene/PdSe₂/Ge 混合维度范德华异质结构, 实现了从深紫外到中红外 (200-3043 nm) 的宽光谱响应, 在零偏压下其响应度高达 691.5 mA/W, 比探测率为 1.73×10^{13} Jones, 响应速度为 6.4/92.5 微秒, 并且具备了响应纳秒级脉冲光信号的能力。此外其偏振响应灵敏度高达 112.2, 是目前报道的最高值。同时, 该器件展示了良好的偏振及中红外成像能力。这项工作为设计构建高性能具有偏振敏感的宽光谱光电探测器提供了良好的借鉴, 并为其进一步应用奠定了基础。

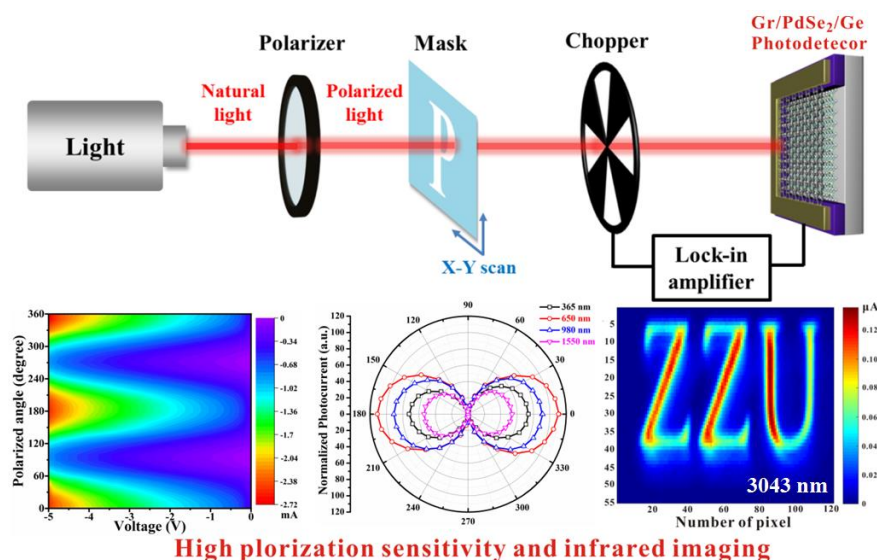


图 1 Graphene/PdSe₂/Ge 宽波段偏振响应及中红外成像应用

关键词: PdSe₂ 二维材料 异质结 偏振响应 红外成像

参考文献:

[1] Di Wu *et al.*, Highly Polarization-Sensitive, Broadband, Self-Powered Photodetector Based on Graphene/PdSe₂/Germanium Heterojunction, *ACS Nano*. 2019, DOI: 10.1021/acsnano.9b03994.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (Nos. 51821002, 91833303, 61605174, 61774136, 11604302)

Tunable Dirac points and zero-energy modes in periodic curved graphene superlattices

Jianli Luan¹, Shangyang Li¹, **Tianxing Ma**^{1,2}, Li-Gang Wang³ and Hai-Qing Lin²

1, Department of Physics, Beijing Normal University, 100875 China

2, Beijing Computational Science Research Center, Beijing 100193, China

3, Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China

We combined periodic ripples and electrostatic potentials to form curved graphene superlattices and studied effects of space-dependent Fermi velocity induced from curvature on their electronic properties. With the equal periods and symmetric potentials, Dirac points would not move but their locations will shift under asymmetric ones. This shift can be tuned by curvature and potentials. Tunable extra gaps in band structures can appear with unequal periods. The existence of new Dirac points is discussed and these new Dirac points can appear under smaller potentials with curvature, and their locations can be changed even under fixed potential by adjusting curvature. Our results suggest that curvature provides a new possible dimension to tune the electronic properties in graphene superlattices and a platform to study physics near new Dirac points more easily.

Plasmonic metal-organic frameworks for surface-enhanced Raman scattering

郑广超^{1*}, Jorge Perez-Juste², 洪梅³, Sara Bals⁴, Luis M. Liz-Marzán⁵,

¹ 物理工程学院, 郑州大学, 郑州 450001, 中国

² CINBIO, Campus Universitario Lagoas- Marcosende, 36310 Vigo, Pontevedra, España

³ 化学生物学与生物技术学院, 北京大学深圳研究生院, 深圳, 518000, 中国

⁴ EMAT-University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, Antwerp, Belgium.

⁵ CIC biomaGUNE, Bionanoplasmonics Laboratory, San Sebastián, 20014, Spain.

*Email: gczheng@zzu.edu.cn; Phone/fax : 17620453396

摘要: 金属-有机骨架化合物 (metal-organic frameworks, MOFs) 由于其比表面积大、孔径均一等优点, 在催化、光学、电学等领域引起了广泛的关注。最近, 基于 MOFs 的形貌控制研究其性能的形貌依赖性是一个热点。众所周知, 表面活性剂能够很好的控制晶体纳米颗粒的形貌。在这里, 我们设计了一种利用双表面活性剂, 十六烷基三甲基溴化铵 (cetyltrimethylammonium bromide, CTAB) 和三羟甲基氨基甲烷 (tris(hydroxymethyl)aminomethane, TRIS), 来有效的控制 MOFs 的形貌[1]。另外, 单一的金属纳米颗粒包覆在 MOFs 当中形成的核-壳结构能够有效的提高该等离子体 MOFs 在催化过程中的稳定性和选择性。我们发展了一种不依赖于金属纳米颗粒形貌、组分、尺寸的等离子体 MOFs 的制备方法。同时, 由于等离子体纳米颗粒的局域表面等离子体共振效应, 等离子体 MOFs 还可以通过利用表面增强拉曼散射 (surface-enhanced Raman scattering, SERS) 研究了 MOFs 孔径的灵活性[2]。

关键词: 等离子体 MOFs; 孔径灵活性; 表面增强拉曼散射

[1] Zheng GC; de Marchi S.; Lopez-Puente V.; Sentosun, K. *et al.*, *Small*, 2016, **12**, 3935-3943.

[2] Zheng GC; Chen Z.; Sentosun K.; Perez-Juste I., *et al.*, *Nanoscale*, 2017, **9**, 16645-16651.

边缘钝化对锯齿型和扶手型磷烯纳米带运输性质的影响

师韩丽，宋梦茹，任月红，江兆潭

北京理工大学物理学院，北京 100081

Email: 3120181440@bit.edu.cn

摘要：磷烯作为一种新型的二维单原子层层状半导体材料，因其各向异性、带隙可调等自身性能特点和潜在的应用价值而受到人们的广泛关注。为开发和设计各种可使用的磷烯纳米器件，首先需要开展对磷烯纳米受限结构如磷烯纳米带或磷烯量子点等的研究。另外，磷烯纳米结构的稳定性将是在磷烯实用化道路上必须要克服的关键问题。本工作将基于第一性原理，利用密度泛函理论和非平衡格林函数的方法，开展对磷烯纳米带边缘钝化的研究，进一步针对用不同原子边缘钝化的锯齿状等磷烯纳米带，研究钝化对运输特性的影响。磷烯纳米带根据其边缘结构的形状，可分为多种类型的磷烯纳米带，其中最受关注的有：扶手椅型纳米带和锯齿型纳米带。原始锯齿型纳米带表现出金属行为，而扶手椅型纳米带是具有间接带隙的半导体。本文用不同元素（H、F、Cl、S等）钝化磷烯纳米带，结果表明：扶手椅型黑磷用这些元素钝化的体系均为半导体结构，而对于锯齿形黑磷纳米带而言，由于边缘修饰原子的不同，体系可能出现半导体或金属特性。因此，不同的边缘钝化对ZPNRs的运输性能有明显的影晌。本工作对设计稳定的磷烯纳米带器件具有重要的参考意义。

关键词：磷烯、边缘钝化、运输性质

基于不同边缘的新型磷烯纳米带器件的输运特性

宋梦茹，师韩丽，任月红，江兆潭

北京理工大学物理学院，北京 100081

Email: 1459853074@qq.com

摘要：以石墨烯为代表的二维材料的研究引起了人们对各种二维材料的广泛关注。在众多的二维材料中，磷烯因为其能带带隙可调、各向异性、对应力敏感等，有望在场效应晶体管、光电子器件、自旋电子学、气体传感器及太阳能电池等方面有广阔的应用前景。为此有必要深入开展各种磷烯结构如纳米带、量子点等的性质研究。作为一种典型低维受限结构，磷烯纳米带的研究引起了人们的关注。常见的磷烯纳米带主要有四种类型：armchair 磷烯纳米带、zigzag 磷烯纳米带、skewed armchair 磷烯纳米带和 skewed zigzag 磷烯纳米带。根据前人和我们的研究可知，armchair 磷烯纳米带和 skewed zigzag 磷烯纳米带呈现半导体性，zigzag 磷烯纳米带和 skewed armchair 磷烯纳米带呈现金属性。在本工作中，我们将基于第一性原理，利用密度泛函理论与非平衡态格林函数相结合的方法，研究基于不同边缘的新型磷烯纳米带器件的输运特性。从方向上来说，新型磷烯纳米带器件在输运方向上有了新的突破，从输运性质上看，根据 IV 曲线，我们发现，新的磷烯纳米带器件构成之后并没有完全呈现出金属性质，在某些宽度上则是呈现出半导体特性，这表明了磷烯纳米带边界的耦合与纳米带的宽度有关，当磷烯纳米带器件的宽度较窄时，器件呈现出半导体性质，当宽度逐渐增加并到达一个临界值时，纳米带器件开始呈现出金属特性。本研究将加深和丰富人们对磷烯纳米带性质的认识，为开发磷烯纳米带逻辑器件和光电器件提供有意义的参考。

关键词：磷烯纳米带、器件、输运性质

CoP@MoS₂ 复合材料的制备及电催化性能研究

周亮、徐克欣、夏田雨、郭海中

郑州大学物理工程学院, 郑州 450002

Email: zhouliang@gs.zzu.edu.cn

摘要:

氢能作为一种无毒、热值高、来源充足的新型清洁能源, 是解决能源危机、环境污染的最佳选择之一。电解水制氢是获取氢能的重要手段, 但传统的 Pt 基催化剂由于其储量有限、价格高昂等问题无法得到广泛应用。近年来, 二维过渡金属二硫族化合物 (TMDs) 的发展, 为制备出廉价、高效的电催化剂提供了可能。其中, 二硫化钼 (MoS₂) 作为一种典型的二维 TMDs 层状材料具有比表面积大、成本低廉和催化活性高等优点, 但其催化性能受到了自身的导电性及基面催化惰性的限制。因此, 调控二硫化钼结构、提高导电性、激活催化活性位点, 使其成为高效电催化剂的理想材料之一, 成为了近年来的研究热点。

本课题组通过在 ZIF-67 衍生的多孔六面体 CoP 衬底上, 采用水热法复合 MoS₂, 得到了高催化活性的中空 CoP@MoS₂ 复合材料。在电流密度达到 -10 mA cm⁻¹ 时, CoP@MoS₂-75 的过电势为 -119 mV, 远低于纯 MoS₂ 的过电势 (-323 mV), Tafel 斜率达到了 49 mV dec⁻¹, 接近商业 40% Pt/C 催化剂 (32 mV dec⁻¹), 表明 CoP@MoS₂-75 具有优秀的催化活性及析氢反应动力学性能。随后, 通过对复合材料的 XPS 数据分析发现, 材料中的 CoP 和 MoS₂ 组分之间发生了电子转移, 进而激活了 MoS₂ 的位点活性, 显著提高了材料的催化性能。

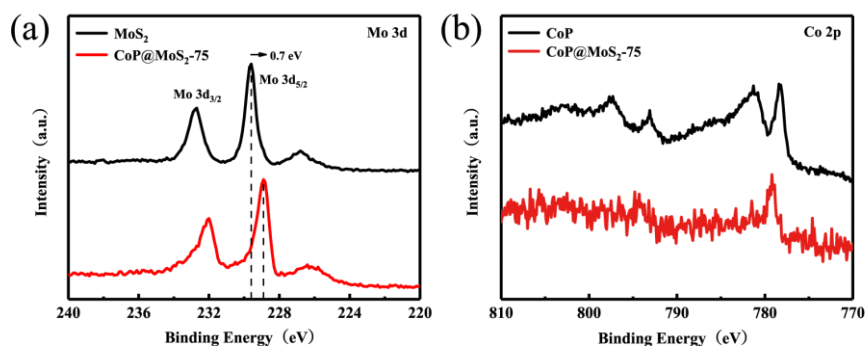


图1. XPS对比分析: (a) Mo 3d; (b) Co 2p。

关键词: CoP@MoS₂、析氢反应、电子转移

参考文献

【1】 Lei X, Yu K, Li H, et al. A functional design and synthesis for electrocatalytic hydrogen evolution material on MoS₂/Co₃S₄ hybrid hollow nanostructure[J]. *Electrochimica Acta*, 2018, 269: 262.

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金项目 (NO. 51801188)

3D 超细分级 PtNi 纳米链的制备与催化应用研究

徐克欣、周亮、夏田雨、郭海中

郑州大学物理工程学院, 郑州 450002

Email: xkxyffs@gs.zzu.edu.cn

摘要:

由于能源消耗量的不断增加和化石燃料储量的限制, 发展新型能源成为目前的研究热点, 其中燃料电池技术是最有前景的方向之一。燃料电池是把燃料中的化学能连续、高效、环保地转变为电能的装置。在新型能源转换系统中, 绿色的质子交换膜燃料电池发挥了及其重要的作用。然而, 燃料电池自身的过电位严重影响其工作效率, 科学家们发现贵金属Pt可以作为催化燃料电池阴极和阳极反应的最有效催化剂。近年来, 高活性的Pt基燃料电池催化剂有很多研究进展, 但仍有许多问题亟待解决, 尤其是由于纳米颗粒在燃料电池工作环境下的严重不稳定性, 使得高稳定性和高活性的材料设计问题日益突出。

本课题组采用一步简单溶剂热法合成了具有高指数、富Pt表面的 3D超细分级PtNi纳米链。这些结构特点使催化剂对甲醇氧化反应有着非常低的过电位, 较高催化活性以及较高的稳定性。在与商业Pt/C催化剂和传统方法制备得到的一维PtNi纳米线做性质对比时发现, 样品的质量活性和比活性分别是前者的6.9倍和7.6倍, 是后者的3.2倍和2.7倍。这项作为高活性高稳定性的同时具有1D 和 3D 特征的 Pt 基纳米催化剂的制备和应用提供了一种可能。

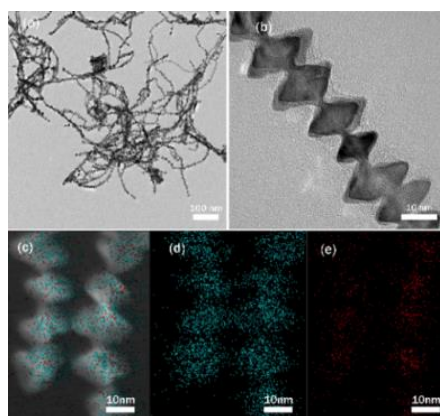


图1 (a, b)不同放大倍数下3D超细分级PtNi纳米链的TEM 图像以及(c-e)元素分布图, 其中(d)和(e)分别为Pt和Ni的元素分布

关键词: 质子交换膜燃料电池、 3D超细分级PtNi纳米链、 甲醇氧化反应

【1】 L. Z. Bu *et al.*, Surface engineering of hierarchical platinum-cobalt nanowires for efficient electrocatalysis, *Nature Communications*. 2016,7,11850.

【2】 J. Wang *et al.*, Ultra-stable Electrochemical Sensor for Detection of Caffeic Acid Based on Platinum and Nickel Jagged-Like Nanowires, *Nanoscale Research Letters*. 2019,14(1),11.

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金项目 (NO. 51801188)

新型模板法制备具有增强宽带微波吸收的 Al-doped CNTs

华安^{a,b}, 李勇^{a,b}, 潘德胜^{a,b}, 冯阳^a, 栾健^a, 王煜^c, 何峻^c, 耿殿禹^a,
刘伟^a, 马嵩^a, 张志东^a

^a中国科学院金属研究所, 沈阳 110016

^b中国科学技术大学材料科学与工程学院, 沈阳 110016

^c钢铁研究总院功能所, 北京 100081

Email: songma@imr.ac.cn

摘要: 近年来, 随着电子技术的出现和发展, 电子设备的大量使用对电磁干扰、信息泄漏和电磁污染等电磁环境产生了重大影响。解决上述问题的需求促使人们研究和开发吸收能力强、带宽宽、厚度薄、密度低的高效微波吸收器, 因为它们具有将微波能量转化为热能的良好能力。考虑到这一点, 多组分复合材料的制备方法和微波有效衰减的纳米结构吸收材料的设计经常被用作改善微波吸收材料阻抗匹配的策略。其中, 碳基材料引起人们极大的关注。通过对 Al@C 纳米线 (Al@C NWS) 进行化学去合金化, 成功地制备了铝掺杂缺陷碳纳米管 (Al-doped CNTs)。与 Al@C NWS 前驱体相比, Al-doped CNTs 由于电偶极子的增加和掺铝引起的无序多壁诱导的多次反射增强, 以及 Al-doped CNTs 独特的空心结构, 可以实现增强的宽带微波吸收。结果表明, 在 2~18GHz 范围内, 铝掺杂碳纳米管的复介电性能和微波吸收性能得到了明显的优化。在石蜡中填充 50 wt% Al-doped CNTs 的复合材料在 15.7 GHz 下的最小反射损耗 (RL) 为 -47.1 dB, 厚度为 1.9 mm, 这表明 Al-doped CNTs 是通过其他方法制备的最具竞争力的碳基吸收材料之一。本研究通过模板法制备 Al-doped CNTs, 为改善其微波性能提供了一条有效途径。

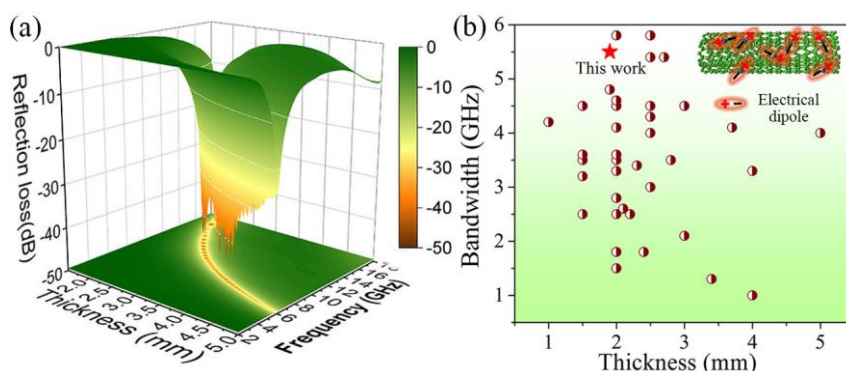


图1 Al-doped CNTs的反射损耗图

关键词: 铝掺杂, 碳纳米管, 电弧法, 微波吸收

参考文献

【1】 H. Wang, Y. Y. Dai, W. J. Gong, D. Y. Geng, S. Ma, D. Li, W. Liu, Z. D. Zhang, Appl. Phys. Lett. 102 (2013) 223113.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No.51871219, 51571195和51590883)

中国科学院金属研究所创新基金项目 (No.2017-ZD04)

无角度依赖金黄色 Ag@AAO 复合薄膜制备及生长机理研究

徐芹

河北工业大学理学院, 天津 300401

Email: xuqinzi@126.com

摘要: 低维纳米材料因具有小尺寸效应、表面效应、宏观量子隧道效应和量子尺寸效应等奇异特性, 使其在材料改性、光电子器件、光电转换等领域具有广泛应用。目前, 基于多孔氧化铝 (AAO) 模板制备低维纳米材料的方法主要有: 电化学沉积、化学气相沉积、溶胶凝胶和磁控溅射等方法。其中, 磁控溅射方法对材料生长具有可控性好、重复性高、成膜均匀等优点而备受关注。我们以 AAO 模板为基底, 采用超高真空磁控溅射设备成功制备出表面呈现金黄色的 Ag@AAO 复合薄膜, 并通过物理机械剥离方法成功将 Ag 纳米孔洞薄膜从 AAO 模板分离。微结构测试结果表明分离获得的 Ag 纳米孔洞薄膜具有与 AAO 模板类似的有序六角密排结构。反射光谱测试结果表明随着 Ag 溅射时间增加到 $t=500$ s, 样品在可见光区 390 nm 和 690nm 出现最大反射波峰, 我们推测样品呈现金黄色且颜色不随角度改变主要是由于 Ag 颗粒对光的散射作用引起的。进一步研究表明 Ag 原子在 AAO 模板上沉积时首先在六角顶点处优选生长, 然后沿着孔洞顶端呈岛状 (Volver-Weber) 生长模式, 随着沉积时间的增长逐渐形成上宽下窄的 Ag 纳米孔洞薄膜。该纳米薄膜可广泛应用于显示、装饰、防伪等领域。

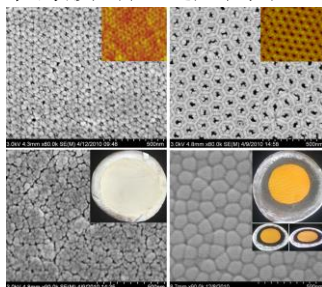


图1 Ag@AAO复合薄膜表面形貌图

关键词: 多孔材料; 磁控溅射; Ag薄膜; 生长机理

参考文献:

[1] H. Robotjazi, S.M. Bahauddin, L.H. Macfarlan, S. Fu, I. Thomann. Ultrathin AAO membrane as a generic template for sub-100 nm nanostructure fabrication. *Chem. Mater.*, 2016, 28, 4546-4553.

[2] L.J. Sherry, S. Chang, G.C. Schatz, R.P.V. Duyne, B.J. Wiley, Y. Xia. Localized surface plasmon resonance spectroscopy of single silver nanocubes. *Nano Lett.*, 2005, 5(10), 2034-2038.

基金项目: This work is supported by the National Natural Sciences Foundation of China (Grant No. 51702083), the Youth Talent Support Program of Hebei Province, the Natural Science Foundation of Hebei Province (Grant Nos. A2015202343 and A2019202190), the Research Project of Hebei Science and Technology Department (Grant No. 15211043), and Student's Platform for Innovation and Entrepreneurship Training Program of Hebei Province (Grant No. 201710080288).

**Dendrite free Li metal plating/stripping onto three-dimensional porous Cu
host**

Ye Wang

*Key Laboratory of Material Physics of Ministry of Education, School of Physics and
Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, China*

Lithium metal is deemed as an ideal anode material for next generation lithium ion batteries (LIBs) due to its high specific capacity and lowest redox potential. However, uncontrolled lithium dendrite formation during plating/stripping process leads to a low Coulombic efficiency even serious safety issues, dragging metallic lithium anodes out of practical application. Three-dimensional (3D) Li host with admirable conductivity is an effective strategy to suppress the dendrite formation due to the induced current density by the large surface area. Herein, a porous 3D Cu synthesized by a simple electrodeposition method is adopted as the Li metal host. The 3D Cu anode exhibits a dendrite free morphology after long cycle and exhibits superior electrochemical performance than that of planar copper current collector. It delivers a low voltage hysteresis of 76 mV at a high current density of 2 mA cm⁻², a Coulombic efficiency of 97% over 50 cycles. Our results indicate that this porous 3D Cu host has a great potential for next generation Li metal batteries.

钇掺杂对镁钇合金机械性能影响的分子动力学研究

高峰¹、蒋刚¹、杜际广²¹四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065²四川大学物理学院, 成都 610065Email: gjiang@scu.edu.cn

摘要: 利用分子动力学(MD)方法, 研究了金属元素钇(Y)添加而导致的多晶镁(Mg)基合金机械性能的变化。在镁基合金模拟研究中, 使用第二邻近镶嵌式原子势函数(2NN-MEAM)。分析了在 312 K 温度和 1 标准大气压下, $1.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 到 $1.0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 的形变速率对单轴形变载荷的机械响应的影响。考虑钇原子在镁基合金中掺杂比例的影响, 在低掺杂的情况下根据 McLean 理论等[1], 有浓度为 0.4at%-3.2at% 的钇原子固溶取代多晶镁晶界上的镁原子。比较镁钇合金应力应变曲线可以发现: 掺杂后的合金模型极限强度(应力峰值)有所降低, 在弹性阶段后的应变硬化阶段整体延长, 并且曲线下降减缓, 出现类似屈服平台的应变区间, 这表示掺杂模型在塑性变形阶段的塑性和延展性的增强。随着钇掺杂比例上升, 杨氏模量呈现出震荡趋势, 掺杂比为 0.4% 的时候杨氏模量最大。应变硬化阶段, 近屈服点与极限强度对应的应变区间值为, 钇在掺杂比为 2.4% 的时候值最大, 说明此时表现出类屈服平台效应且应变最大, 合金塑性、延展性最优。以上的研究讨论可以对镁钇合金复合材料的设计与使用提供有效的参考。

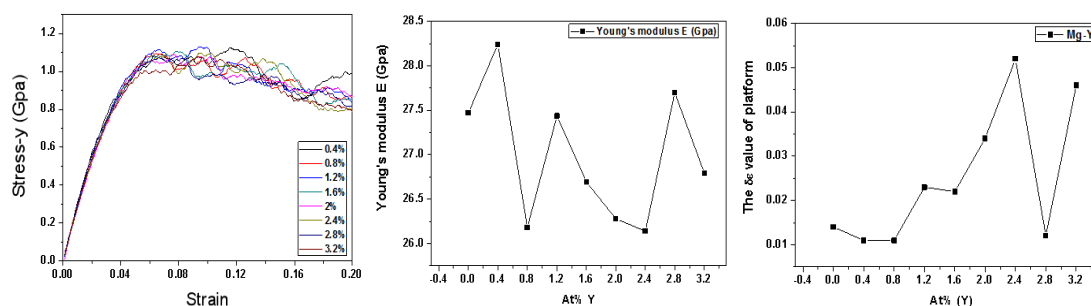


图1. (a) 应力应变曲线; (b) 杨氏模量; (c) 应变区间变化图。

关键词: 分子动力学(MD), 多晶镁(Mg)基合金, 单轴形变, 机械性能, 掺杂比例

参考文献

[1] Zhou, Yanguang, and M. Hu. Mechanical behaviors of nanocrystalline Cu/SiC composites: An atomistic investigation. *Computational Materials Science* 129 (2017):129-136.

基金项目: National Key P&D program of china (NO. 2017YFB0702501).

高效碳纳米管薄膜表征技术

赵杰¹、黄奇¹、刘芳¹、沈丽君²、梁学磊¹、彭练矛¹

北京大学纳米器件物理与化学教育部重点实验室, 北京 100871

中国科学院自动化研究所, 北京 100190

Email: liangxl@pku.edu.cn

摘要: 碳纳米管薄膜晶体管在平板显示驱动和柔性电子学领域具有广泛的应用前景。碳纳米管薄膜晶体管的性能主要取决于沟道内的碳纳米管薄膜的质量, 而目前仍缺少一种广泛接受的碳纳米管薄膜质量的表征方法。本文提出利用扫描电子显微成像技术和自行开发的纳米材料密度测量软件作为辅助工具提取碳纳米管密度, 通过对薄膜的密度均一性和各向异性进行表征, 进而高效精确的评估碳纳米管薄膜质量的方法。利用该表征方法, 我们对不同成膜工艺 (沉积法和浸涂提拉法) 得到的碳纳米管薄膜质量进行了表征。基于这两种碳纳米管薄膜, 我们采用完全相同的实验工艺制备了薄膜晶体管器件。统计结果表明, 薄膜质量与器件性能的涨落对应一致。沉积法得到的碳纳米管薄膜密度高 ($41/\mu\text{m}$), 均一性差 (标准差 $11.5/\mu\text{m}$), 其中的纳米管呈现局域定向性, 制备出的器件性能离散程度高达 30%, 浸涂提拉法得到的碳纳米管薄膜密度相对较低 ($32/\mu\text{m}$), 均一性好 (标准差 $2.8/\mu\text{m}$), 碳纳米管呈现各个方向的随机取向, 制备的薄膜晶体管器件性能离散程度接近 15%。本文提出的表征方法不仅能够有效评估碳纳米管薄膜的质量, 同时对薄膜的制备工艺改进和器件性能的提高也具有指导意义。

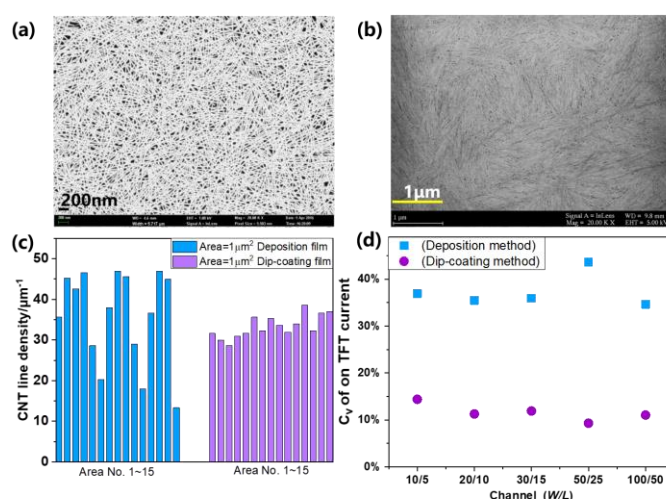


图 1 (a)浸涂提拉法 (b)沉积法 SEM 图 (c)薄膜密度和均一性对比 (d)器件性能离散程度对比
关键词: 碳纳米管, 薄膜晶体管, 表征技术, 均一性

参考文献

- 【1】 DONG G, et al. Large-area and highly uniform carbon nanotube film for high-performance thin film transistors. *Nano Res*, 2018, 11(8): 4356–4367.

基金项目: 国家自然科学基金项目(NO. 61621061), 国家重点研发计划课题(2016YFA0201902)

自模板法制备六边形 CdS 纳米环

王立卫、李若平、黄明举

河南大学物理与电子学院, 河南省光电信息材料与器件重点实验室,

开封 475004

Email: hmingju@163.com

摘要: 材料的尺寸、形貌和组分往往会影响其物理和化学性质, 合成形貌和尺寸可控的纳米粒子是一项挑战。CdS, 一种重要的半导体材料, 因其具有匹配太阳光可见光区的窄带隙 (2.4eV) 而受到学者们的青睐。为了提高它的物理化学性质, CdS 被制成各种各样的结构, 如棒状、枝状、四足体、纳米线等。用作光催化材料, CdS 纳米晶体需要具有大的比表面积、短的电荷传输距离、有效的电子-空穴对分离等特点, 合理设计和合成具有特殊形貌的 CdS 纳米晶体有助于提高其光催化性能。

中空结构纳米晶体因其独特的结构和形貌在光催化和能量存储方面具有潜在的应用价值。离子交换法是一种常用的改变材料成分和形貌的方法, 改变形貌的原因在于各种物质的溶度积 K_{sp} 不同和离子迁移速率不同 [1, 2]。在这里, 我们使用阴离子置换法将六边形的 $\text{Cd}(\text{OH})_2$ 纳米片转化成 CdS 纳米环。它保留了六边形 $\text{Cd}(\text{OH})_2$ 纳米片的尺寸和外形。在碱性环境下硫脲分解生成的 S^{2-} , 用来硫化 $\text{Cd}(\text{OH})_2$ 纳米片合成介孔的 CdS 纳米环。合成的介孔 CdS 纳米环在可见光下具有很高的光催化活性, 这主要源自于带孔 CdS 纳米环能有效地增强光吸收能力, 并提供更多的活性位点, 这些有助于提高其光催化性能。这种带孔纳米环的制备方法可以拓展到其它硫化物或氧化物纳米材料的合成。

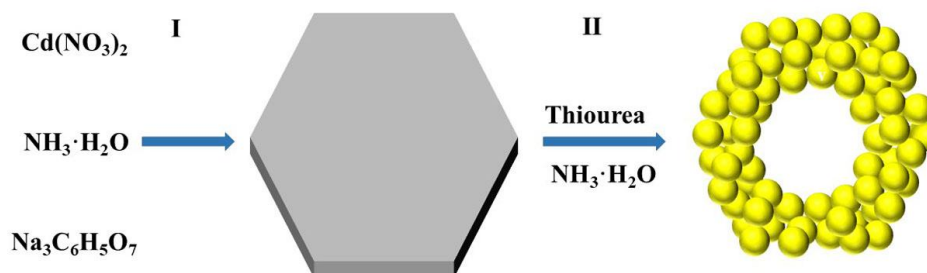


图 1 CdS 纳米环的合成示意图

关键词: 硫化镉 六边形纳米环 自模板法

【1】 Fenton et al., Tunable intraparticle frameworks for creating complex heterostructured nanoparticle libraries, *Science* (2018) 360, 513–517.

【2】 S. L. Xiong and H. C. Zeng, Serial Ionic Exchange for the Synthesis of Multishelled Copper Sulfide Hollow Spheres, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 51, 949–952.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 61805069, 51502077) 等

石墨烯光子晶体光纤及电光调制器研究

周旭^{1, 3}、刘开辉*^{1, 3}、刘忠范*^{2, 3}

1. 人工微结构和介观物理国家重点实验室, 北京大学物理学院, 北京, 100871;
 2. 北京市低维碳材料科学与工程研究中心, 北京分子科学国家实验室, 北京大学化学与分子工程学院, 北京, 100871;
 3. 北京石墨烯研究院, 北京, 100095;
- Email: zfliu@pku.edu.cn; khliu@pku.edu.cn

光纤是现代数字通讯的基石, 而光子晶体光纤则是近 20 多年来光纤光学领域的最重要进展。光子晶体光纤包层有微小空气孔, 其排布影响着纤芯中的光传输; 此外, 空气孔内可填充各种功能型材料, 这些都极大地丰富和拓展了光纤的功能和应用范围。近十多年, 研究火热的二维石墨烯材料具有独特的光电性质, 比如宽光谱响应和电光可调等性质。所以, 石墨烯的兴起很自然地极大地激发了人们将光纤与石墨相结合的研究兴趣和热情。另一个方面, 微观上单层石墨烯虽然有很强的光与物质相互作用 (~2.3% 光吸收率), 但是宏观上 2.3% 的相互作用强度还是难以探测的和利用, 所以增强石墨烯光与物质相互作用是石墨烯实际应用的一个重要研究方向。而将石墨烯与光子晶体光纤这种高品质光波导结合可以极大的增强光与石墨烯相互作用强度。在此, 我们用化学气相沉积生长法制备出最长可达米级的石墨烯光子晶体光纤。其中, 石墨烯薄膜直接生长贴覆在光子晶体光纤的空气孔内壁, 且并不影响光纤的传输模式。石墨烯光子晶体光纤中, 石墨烯与多次全反射的光相互作用极大地增强了光与石墨相互作用强度, 光衰减系数高达~8 dB/cm。更进一步, 我们利用离子液体栅压技术将石墨烯光子晶体光纤制成全光纤型的电光调制器, 其具有宽的光谱响应范围(1150 - 1600 nm), 大的调制深度 (~20 dB/cm @1550 nm) 以及非常低的工作电压 (~2 V)。我们的实验结果将推动石墨烯光电子器件的工业化应用以及多功能光纤器件研究更进一步, 同时为开发各种二维材料复合光纤材料提供重要的参考方向, 也为开发新型二维材料光纤器件开辟一条新的道路。

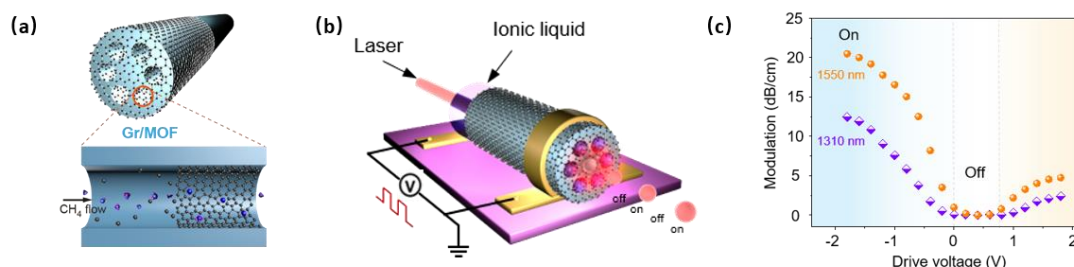


图 1 石墨烯光子晶体光纤制备与光纤电光调制器

关键词: 石墨烯, 光纤, 电光调制器

参考文献:

- 【1】 K. Chen, X. Zhou, X. Cheng *et al.*, Graphene photonic crystal fibre with strong and tunable light-matter interaction, *Nat. Photon.* 2019, 1-6.

局域元素供应法调控石墨烯生长动力学

刘灿

北京大学物理学院, 北京 100871

Email: canliu@pku.edu.cn

摘要: 二维材料与当代硅基芯片工艺兼容而有望实现规模化应用, 目前已成为当代跨学科交叉研究的热点材料体系。由于二维材料原子层结构具有极大的比表面积, 其电子态和声子态都分布在表面, 因此, 二维材料对界面非常敏感, 跟其它材料在界面上的相互作用可以显著地改变其生长动力学和物理性质。为实现对二维材料的界面调控作用, 我们利用局域元素供应法将元素周期表中电负性最强、具备极高反应活性的氟元素引入到石墨烯生长体系。与氧元素调控机制不同^[1], 氟元素不仅能够将石墨烯的生长动力学势垒降低, 同时有效地将石墨烯生长过程从吸热反应转变为放热反应, 导致石墨烯生长速率达到了全新纪录 $\sim 200 \mu\text{m/s}$ ^[2]。该方法对于其他类型的二维材料, 例如半导体过渡金属硫族化合物、绝缘体六方氮化硼生长同样具备促进作用, 为控制合成二维材料开辟了全新思路。

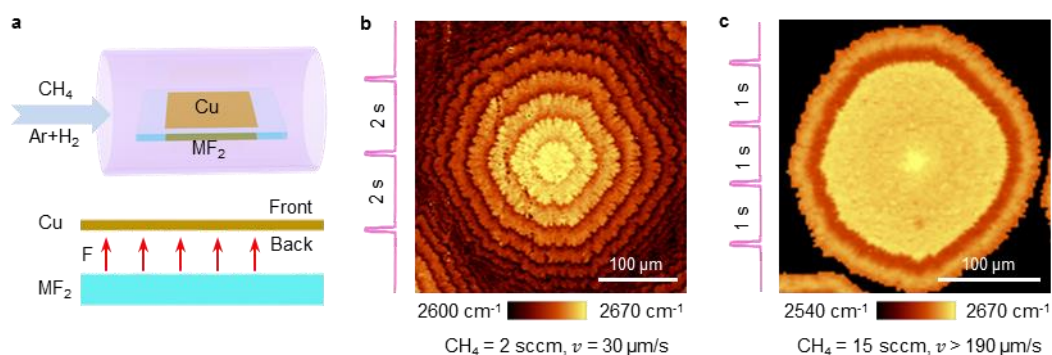


图 1 局域氟元素供应法辅助石墨烯超快生长

关键词: 局域元素, 石墨烯, 二维材料, 生长动力学

[1] Ultrafast growth of single-crystal graphene assisted by a continuous oxygen supply, *Nature Nanotechnology* 2016, 11, 930.

[2] Kinetic modulation of graphene growth by fluorine through spatially confined decomposition of metal fluorides, *Nature Chemistry*, 2019, 11, 730.

基金项目: 国家重点研发计划 (2016YFA0300903, 2016YFA0300804, 2015CB358600) 等

具有高偏振灵敏、宽波段、自驱动的二维 PdSe₂ 异质结光电探测器

郭佳文、吴翟*

郑州大学物理学院, 郑州 450002

Email: wudi1205@zzu.edu.cn

摘要: 近年来, 随着军事和民用领域对高精度宽波段光电探测器的重大需求, 因此研发高偏振敏感的宽光谱响应的光电探测器显得尤为迫切。然而, 目前具有偏振响应的二维材料存在着空气稳定性差, 响应波段窄等缺点, 严重限制了其进一步应用。该研究发展了一种制备晶圆级大面积的具有优异化学稳定性、宽波段敏感的二维材料二硒化铂 (PdSe₂)。此种材料具有带褶皱的五边形排列的晶体结构, 这种强不对称的晶体结构使其具备了良好的各向异性光响应特性, 从而具备了探测偏振光信号的能力。通过创新性的构建 Graphene/PdSe₂/Ge 混合维度范德华异质结构, 实现了从深紫外到中红外 (200-3043 nm) 的宽光谱响应, 在零偏压下其响应度高达 691.5 mA/W, 比探测率为 1.73×10^{13} Jones, 响应速度为 6.4/92.5 微秒, 并且具备了响应纳秒级脉冲光信号的能力。此外其偏振响应灵敏度高达 112.2, 是目前报道的最高值。同时, 该器件展示了良好的偏振及中红外成像能力。这项作为设计构建高性能具有偏振敏感的宽光谱光电探测器提供了良好的借鉴, 并为其进一步应用奠定了基础。

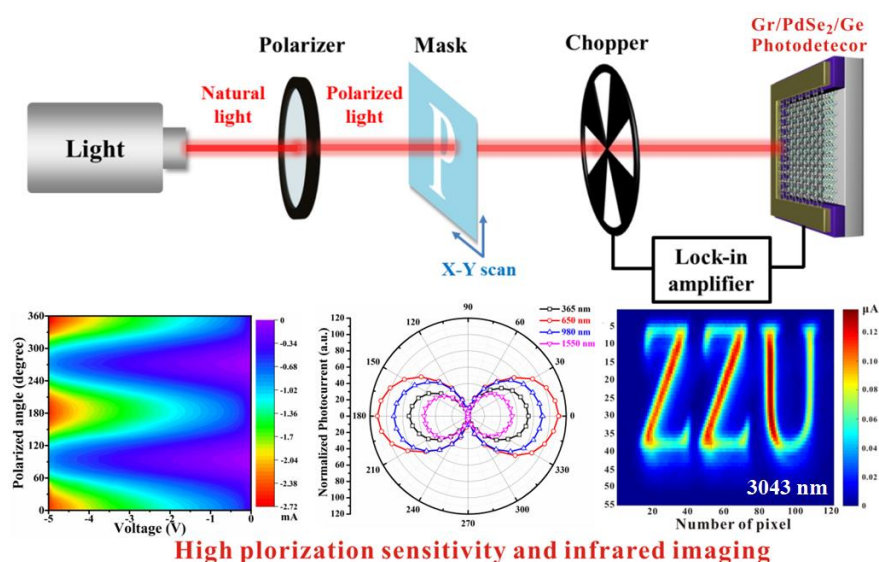


图 1 Graphene/PdSe₂/Ge 宽波段偏振响应及中红外成像应用

关键词: PdSe₂ 二维材料 异质结 偏振响应 红外成像

参考文献:

[1] Di Wu *et al.*, Highly Polarization-Sensitive, Broadband, Self-Powered Photodetector Based on Graphene/PdSe₂/Germanium Heterojunction, *ACS Nano*. 2019, DOI: 10.1021/acsnano.9b03994.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (Nos. 51821002, 91833303, 61605174, 61774136, 11604302)

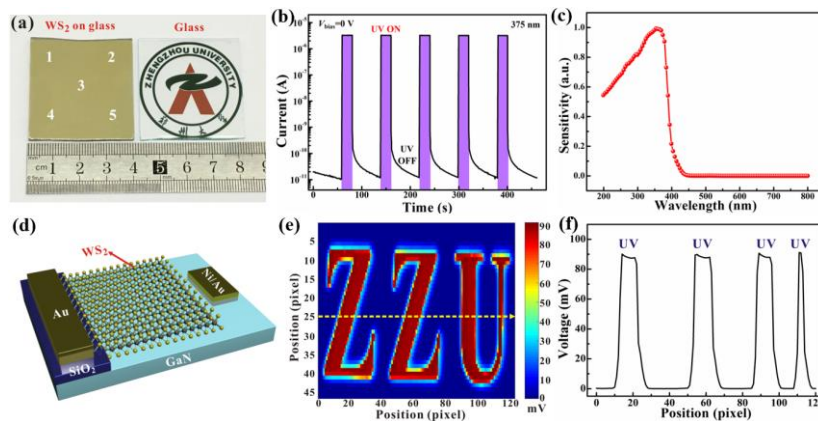
合成大面积二维 WS_2 薄膜及其在紫外光电探测和成像领域的应用

赵智慧、吴翟*

郑州大学物理工程学院, 郑州 450001

E-mail: wudi1205@zzu.edu.cn

摘要: 高性能紫外 (UV) 光电探测器因其在军事和民用领域具有重要的应用而备受人们关注。近年来, 二维 (2D) 材料由于具有原子级厚度, 带隙可调, 表面无化学悬空键和高载流子迁移率, 优异的化学稳定性等特点, 为制备高性能紫外光电探测器提供了一个理想平台。但原子级厚度的 2D 材料对入射光的吸收较少从而影响光电探测器的性能。因此与单独的 2D 材料基器件相比, 构建混合尺寸的 2D / 3D 异质结可以提供更大的光学吸收和更高的光生载流子分离效率进而提高二维光电探测器的性能。在此项工作中, 通过磁控溅射钨 (W) 膜并在管式炉中硫化合成了大面积的 2D WS_2 薄膜, 制备了 WS_2/GaN 混合维度异质结紫外光电探测器。该器件具有自供电光响应特性并对紫外信号表现出较高的灵敏度, 在 0V 偏压下具有 226 mA/W 的响应度, 4×10^{14} Jones 的超高比探测率, 以及较快的响应速度。此外, 使用制备的光电探测器作为成像器件, 获得了高对比度, 高分辨率的紫外成像结果。此项工作的结果表明, WS_2/GaN 异质结器件在高性能 UV 探测和成像应用中具有巨大潜力。

图 1 WS_2/GaN 异质结器件的紫外光电探测及成像应用关键词: WS_2 二维材料 异质结 GaN 紫外光电探测器 成像

参考文献:

[1] Ranran Zhuo *et al.*, In-situ fabrication of PtSe₂/GaN heterojunction for self-powered deep ultraviolet photodetector with ultrahigh current on/off ratio and detectivity, *Nano Research*. 2018, 12(1), 183

基金项目: 国家自然科学基金项目 (Nos. 61605174, 61774136)

高稳定性、发光可调的无铅钙钛矿纳米晶制备及应用

马壮壮、史志锋*

郑州大学物理学院, 郑州 450002

Email: shizf@zzu.edu.cn

摘要: 全无机铅卤钙钛矿纳米晶具有高荧光量子产率、高缺陷容忍度、光谱可调谐范围广及制备工艺简单等优点, 是具有广阔的应用前景的新一代发光材料。然而, 铅卤钙钛矿纳米晶存在稳定性差, 暴露在水/氧、高温、光照等外界条件下极容易在短时间内分解^[1]。另外, 有毒的重金属铅的存在进一步制约了钙钛矿发光器件的大规模商业应用^[2]。基于此, 我们开展了无铅铋基、铋基钙钛矿纳米晶材料的优化生长研究, 针对其荧光量子产率、光谱可调性、稳定性等重要参数进行系统优化, 并在白光 LED 中得到应用。实验中, 通过改变卤素成分, $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{X}_9$ 纳米晶的发光光谱可以由 393 nm 调至 590 nm, $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{X}_9$ 纳米晶的发光光谱可以由 385 nm 调至 640 nm。典型 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 和 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{Br}_9$ 纳米晶的荧光量子产率超过了 40%。采用上述纳米晶作为荧光粉, 我们制备出了多彩的光致 LED 和白光 LED, 器件在空气环境下连续工作 11 h 后性能保持基本稳定, 此外, 基于无铅 $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{Br}_9$ 纳米晶, 首次实现了电驱动蓝紫光 LED。这些结果表明无铅铋基、铋基钙钛矿纳米晶展现出良好的应用前景。

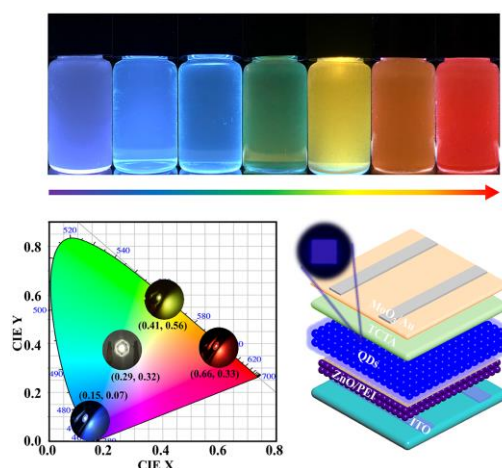


图 1. $\text{Cs}_3\text{Sb}_2\text{Br}_9$ 纳米晶光学图像及 LED 应用

关键词: 钙钛矿, 无铅, 纳米晶, LED

[1] Y. Wei, Z. Cheng, J. Lin, An Overview on Enhancing the Stability of Lead Halide Perovskite Quantum Dots and Their Applications in Phosphor-converted LEDs, *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 310.

[2] M. G. Ju, M. Chen, Y. Y. Zhou, J. Dai, L. Ma, N. P. Padture, X. C. Zeng, Toward Eco-friendly and Stable Perovskite Materials for Photovoltaics, *Joule* **2018**, *2*, 1231.

基金项目: 项目支持: 国家自然科学基金项目 (No. 11774318, 11604302)

Thermal conductivity of suspended few-layer MoS₂

阿地力·艾依提^{1,2}, 王启浪^{1,2}, 徐象繁^{1,2,§}

¹ 同济大学物理科学与工程学院, 声子学与热能科学中心, 上海 200092

² 同济大学物理科学与工程学院, 中欧纳米声子学联合实验室, 上海 200092

Email: §xuxiangfan@tongji.edu.cn

Abstract: Modifying phonon thermal conductivity in nanomaterials is important not only for fundamental research but also for practical applications. However, the experiments on tailoring thermal conductivity in nanoscale, especially in two-dimensional materials, are rare due to technical challenges. In this work, we demonstrate the in situ thermal conduction measurement of MoS₂ and find that its thermal conductivity can be continuously tuned to a required value from crystalline to amorphous limits. As shown in Fig.1, with the increase of the plasma time, the percentage of defect increases and the thermal conductivity reduces gradually. The reduction of thermal conductivity is understood from phonon-defect scattering that decreases the phonon transmission coefficient. Beyond a threshold, a sharp drop in thermal conductivity is observed, which is believed to be due to a crystalline–amorphous transition. Fig.2 and Fig.3 show that the thermal conductivity of MoS₂ before plasma treatment is more than one order of magnitude larger than that after plasma treatment. Our method and results provide guidance for potential applications in thermoelectrics, photoelectronics, and energy harvesting where thermal management is critical with further integration and miniaturization.

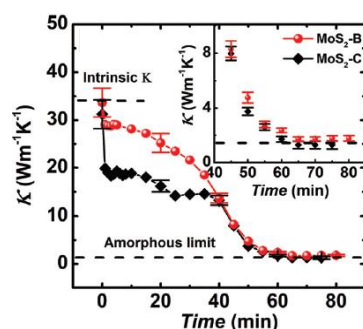


Fig.1 The measured thermal conductivity versus controlled plasma exposure time.

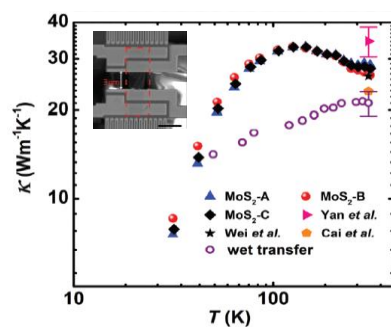


Fig.2 The thermal conductivity of MoS₂ before plasma treatment

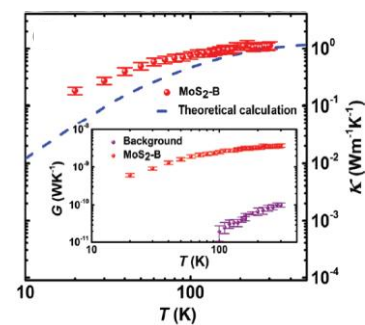


Fig.3 The thermal conductivity of MoS₂ after plasma treatment

Key Words: MoS₂, thermal conductivity, thermal conductance, plasma

Reference

- [1] Aiyiti A et al. Thermal conductivity of suspended few-layer MoS₂. *Nanoscale* 2018, 10(6): 2727-2734.
- [2] Aiyiti A et al. Measuring the thermal conductivity and interfacial thermal resistance of suspended MoS₂ using electron beam self-heating technique. *Science Bulletin*, 2018, 63(7): 452-458.

基于水热合成生长的五氧化二钒纳米线的热导率研究

宋羿辉^{1,2}, 王启浪^{1,2}, 徐象繁^{1,2,§}

¹ 同济大学物理科学与工程学院, 声子学与热能科学中心, 上海 200092

² 同济大学物理科学与工程学院, 中欧纳米声子学联合实验室, 上海 200092

Email: §xuxiangfan@tongji.edu.cn

摘要: 五氧化二钒 (V_2O_5) 基复合材料作为锂离子电池的正极材料, 以其比容量大、合成简单、性能安全等优点受到广泛的关注。为了使锂电池的放电效率保持在 80% 以上, 其工作温度应该处于 18-45°C 之间。当温度过高, 锂电池的性能会降低, 甚至有短路和爆炸的危险。因此探究基于五氧化二钒纳米线电极材料的传热性能, 就变成非常重要。本文中我们采用水热合成的方法生长出了五氧化二钒纳米线(图一), 并用纳米机械手将纳米线转移到图二所示的微米尺度悬空器件上。采用热桥法对 V_2O_5 纳米线的导热系数进行了实验测量。图三为所测量的纳米线随温度变化的关系, 在 $T = 300K$ 时, V_2O_5 纳米线的导热系数为 $\sim 3.84 \pm 0.04 \text{ W/(m K)}$ 。

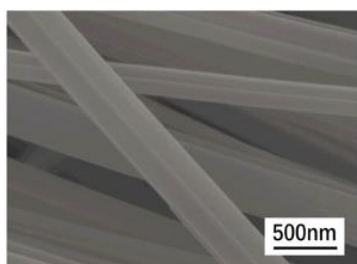


Fig 1. The SEM image of V_2O_5 nanowires

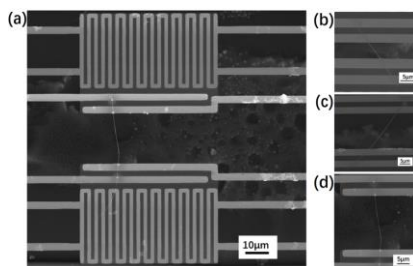


Fig 2. The SEM image of V_2O_5 -A, V_2O_5 -B and V_2O_5 -C nanowires on the microdevice

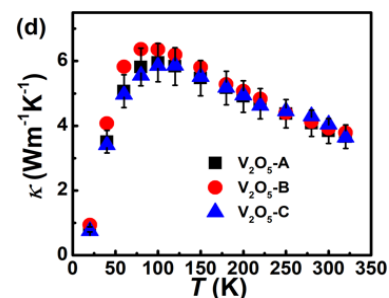


Fig 3. The thermal conductivity of V_2O_5 nanowire as a function of temperature

关键词: 五氧化二钒, 纳米线, 热导率

参考文献:

- [1]. A. Aiyiti, S. Hu, C. Wang, Q. Xi, Z. Cheng, M. Xia, Y. Ma, J. Wu, J. Guo, Q. Wang, J. Zhou, J. Chen, X. Xu and B. Li, *Nanoscale* **10** (6), 2727-2734 (2018).
- [2]. L. Dong, Q. Xi, D. Chen, J. Guo, T. Nakayama, Y. Li, Z. Liang, J. Zhou, X. Xu and B. Li, *National Science Review* **5** (4), 500-506 (2018)

Na⁺掺杂增强 CsPbBr₃ 钙钛矿纳米晶荧光发射和稳定性

李森、史志锋*、李新建

郑州大学物理学院, 郑州 450002

Email: shizf@zzu.edu.cn

摘要: 近年来, 新型卤化铅钙钛矿纳米晶由于其在低成本光源和显示领域的巨大应用潜力而日益受到人们的关注。然而, 材料稳定性差是其大规模生产和商业化的主要障碍。将杂原子引入目标晶格, 对钙钛矿纳米晶进行掺杂处理, 在调节半导体材料特性方面具更大的应用前景。到目前为止, 许多金属离子 (包括 Bi³⁺、Al³⁺、Cu²⁺、Mn²⁺、Sn²⁺、Cd²⁺、Zn²⁺) 和稀土离子 (如 Eu³⁺、Ce³⁺、Yb³⁺、Tb³⁺) 被引入卤化物钙钛矿中, 以取代 Pb²⁺ 或 Cs⁺ 离子, 从而降低缺陷状态密度、钝化晶界, 改善 PLQY 或增强钙钛矿材料的稳定性。最近, 大量的工作研究了掺杂碱金属阳离子对钙钛矿薄膜晶格的影响。然而, 在大多数研究中, 碱金属阳离子通常被认为是在目标晶体中形成间隙掺杂, 但是这只是考虑到碱金属阳离子的离子尺寸远小于 Cs⁺ 离子, 并没有经过严格的论证。此外, 据我们所知, 目前尚未有工作对 CsPbBr₃ 纳米晶进行钠离子掺杂以调节其光学性质和材料稳定性的研究工作。

我们发现, Na⁺ 离子掺杂除了增强 CsPbBr₃ 纳米晶的 PLQY 外, 还可以提高 CsPbBr₃ 纳米晶的色纯度, 并且导致其荧光发射峰的蓝移。与未掺杂的 CsPbBr₃ 纳米晶相比, 材料的抗紫外线光、热冲击和氧气/水分稳定性得到了显著提高。此外, 所制备的钠掺杂 CsPbBr₃ 纳米晶被用作固态荧光粉来制备白光 LED, 得到了 6652 K 的色温 (CCT)、75.2 的显色指数 (CRI) 和 67.3 lm/w 光效率。此外, 在连续电流模式下, 器件即使在空气环境中工作也具有显著的长期稳定性, 在运行 500 小时后其发光强度仅出现了约 15% 的衰减, 这大大优于以未掺杂的 CsPbBr₃ 纳米晶为荧光粉的参考器件。

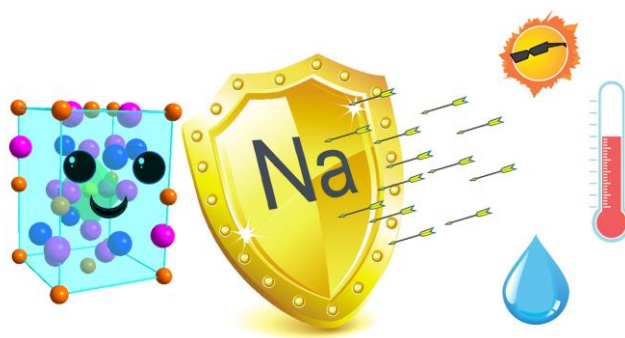


图 1 Na⁺掺杂提高 CsPbBr₃ 钙钛矿纳米晶的稳定性

关键词: 钙钛矿 稳定性 钠掺杂

参考文献

【1】 Y. Liu et al. Considerably enhanced exciton emission of CsPbCl₃ perovskite quantum dots by the introduction of potassium and lanthanide ions, *Nanoscale*, 2018, 10 (29), 14067-14072.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11774318) 等

MIM 波导中的反对称模式研究

陈召、肖林

中国空间技术研究院, 钱学森空间技术实验室, 北京, 100094

Email: chenzhao@qxslab.cn

摘要:

金属-介质-金属(MIM)波导具有超强的场局域效应, 其在很多方面都有重要的应用。MIM 波导中具有对称和反对称模式。一般而言, 反对称模式不容易激发, 且传播距离有限, 因此其应用也受到了限制^[1]。本文在原来工作的基础上, 提出了一种新型的 MIM 波导结构来激发反对称模式。在研究过程中, 我们主要以数值仿真为主, 计算结果如图 1 所示。图 1(a)插图所示为所要研究的结构, 此时系统反对称模式激发($\lambda=865$ nm), 对称模式被抑制, 这个在之前的报道中是没有出现过的。在结构对称性进一步遭到破坏的情况下(图 1(b)插图), 原来的反对称模式依然存在, 而系统又出现新的角模式。从图 1(c)(d)场分布可以看出, 反对称模式下, 场能量集中在方形腔的四个角中, 新的角模式对应的场能量集中在联接输入输出端口的角中。因此, 通过增加输出端口, 我们可以将对称模式和反对称模式分开。这些都大大增加了系统的实用性。更进一步, 继续打破结构对称性, 会有更多的模式被激发, 更加丰富了系统的传输特性。这些在未来高度集成的纳米光子器件中会有重要的应用。

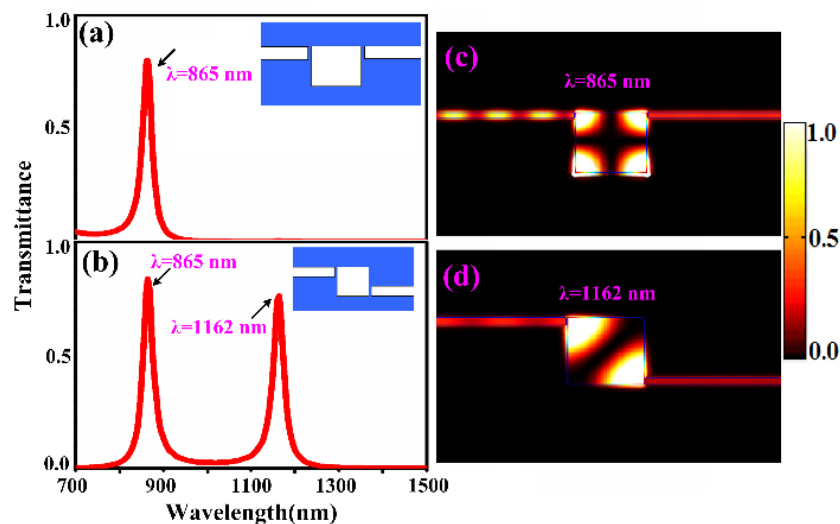


图 1 系统的透射谱和响应的场分布: 插图表示基本结构。

关键词: 表面等离子激元, MIM 波导, 对称模式, 反对称模式。

参考文献

1. Chen et al, Sharp trapped resonances by exciting the anti-symmetric waveguide mode in a metal-insulator-metal resonator. *Plasmonics*, 2014, 10(1), 131-137

利用金属/二氧化钒复合纳米结构动态转换光的偏振态

王铮、贾智勇、束方洲、王嘉楠、朱毅、范仁浩、彭茹雯*、王牧

南京大学固体微结构物理国家重点实验室和物理学院, 南京 210093

*Email: rwpeng@nju.edu.cn

Abstract: There have been great endeavors devoted to manipulating the polarization state of light by plasmonic nanostructures in recent decades. However, the topic of active polarizers has attracted much less attention. In this work [1], we present a composite plasmonic nanostructure consisting of vanadium dioxide that can dynamically modulate the polarization state of the reflected light through a thermally induced phase transition of vanadium dioxide. We design a system consisting of anisotropic plasmonic nanostructures with vanadium dioxide that exhibits distinct reflections subjected to different linearly polarized incidence at room temperature and in the heated state. Under a particular linearly polarized incidence, the polarization state of the reflected light changes at room temperature, and reverts to its original polarization state above the phase-transition temperature. The composite structure can also be used to realize a dynamically switchable infrared image, wherein a pattern can be visualized at room temperature while it disappears above the phase-transition temperature. The composite structure could be potentially used for versatile optical modulators, molecular detection, and polarimetric imaging.

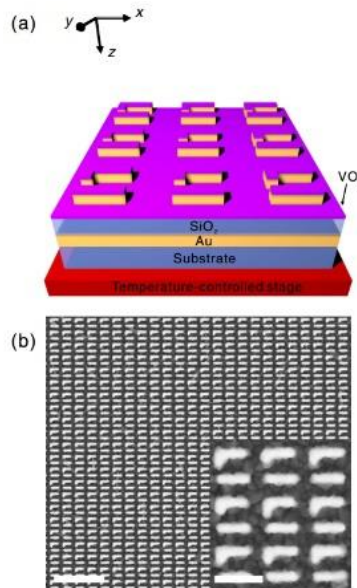


Fig.1 (a) Schematic of the dynamically switchable polarizer. (b) SEM image of the sample after covering it with VO₂; the scale bar is 1600 nm. (Inset) High-magnification SEM image; the scale bar is 400 nm.

Keywords: Dynamically Switching Polarization State of Light Vanadium Dioxide Phase Transition

Reference

- 【1】 Z. Y. Jia *et al.*, Dynamically Switching the Polarization State of Light Based on the Phase Transition of Vanadium Dioxide, *Phys. Rev. Applied*, 2018, 9,034009.

基于二氧化钒相变动态调控纳米系统中等离激元结构色

江越、东方洲、王嘉楠、熊波、陈超为、范仁浩、彭茹雯*、王牧

南京大学固体微结构物理国家重点实验室和物理学院, 南京 210093

*Email: rwpeng@nju.edu.cn

Abstract: Color filtering and color printing are essential technologies in digital displays, optical data storage, and imaging sensors. Traditionally, color generation uses pigments that absorb light at certain wavelengths to produce complementary colors. However, the spatial resolution of pigment-based color printing and display is limited to the level of 10 μm . Furthermore, it is difficult to find various pigments to reproduce all colors in the visible spectrum. Recently, plasmonic color filtering and color printing demonstrate promising possibilities. Surface plasmons are the collective electron oscillations at a metal–dielectric interface, which include propagating surface plasmon (PSP) and localized surface plasmon (LSP), respectively. Physically, surface plasmons enable localization and enhancement of the light field on nanoscale. Various polarization-dependent or -independent color-related devices have been designed via hole-type or pillar-type metallic nanostructures. Plasmonic nanostructures can normally generate all the colors covering the visible spectrum by applying different structural parameters. In addition to color filtering and color printing, plasmonics can also be harnessed for sensors, photovoltaics, and nanoimaging.

In this work [1], we demonstrate the integration of plasmonic nanostructures and VO_2 in generating various colors dynamically. Periodic silver-nanodisk arrays are fabricated on VO_2 film in order to generate different colors, where LSP, PSP, and Wood's anomaly (WA) are excited. By designing spatial periodicity of the array and diameter of the silver nanodisks, various colors can be generated over the whole visible spectrum. Furthermore, by taking advantages of the insulator–metal transition of VO_2 , we can dynamically tune the colors by changing temperature. After demonstrating physical features, we construct a pattern made of different silver-nanodisk arrays on VO_2 film to show the capability of color reconfiguration by varying the temperature.

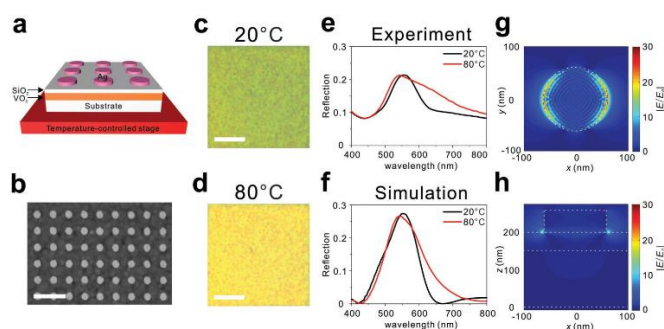


Fig.1 Optical properties of VO_2 film comprising periodic silver-nanodisk array

Keywords: Dynamic Plasmonic Color Generation Vanadium Dioxide Phase Transition

Reference

- 【1】 F. Z. Shu *et al.*, Dynamic plasmonic color generation based on phase transition of vanadium dioxide, *Adv. Optical Mater.* 2018, 6, 1700939

无序纳米结构中等离激元的安德森局域化

王铮、史文博、朱瑛莺、景灏、熊波、范仁浩、彭茹雯*、王牧

南京大学固体微结构物理国家重点实验室和物理学院, 南京 210093

*Email: rwpeng@nju.edu.cn

Abstract: The localization of waves in disordered systems is an important effect in condensed matter physics, which was initially investigated by Anderson in 1958. The absence of electron propagation was predicted because of Anderson localization in disordered systems, eventually causing conductive materials to be insulating. Since it originates from the interference of coherent waves, Anderson localization can be extended from an electron to other waves, such as electromagnetic waves, acoustic waves, and matter waves. In this work [1], we experimentally demonstrate Anderson strong localization of surface plasmon polaritons (SPPs) at visible regime in metallic nanogratings with short-range correlated disorder. By increasing the degree of disorder, the confinement of SPPs is significantly enhanced, and the effective SPP propagation length dramatically shrinks. Strong localization of SPPs eventually emerges at visible regime, which is verified by the exponentially decayed fields and the vanishing autocorrelation function of the SPPs. Physically, the short-range correlated disorder induces strong interference among multiple scattered SPPs and provides an adequate fluctuation to effective permittivity, which leads to the localization effect. Our study demonstrates a unique opportunity for disorder engineering to manipulate light on nanoscale and may achieve various applications in random nanolasing, solar energy, and strong light-matter interactions.

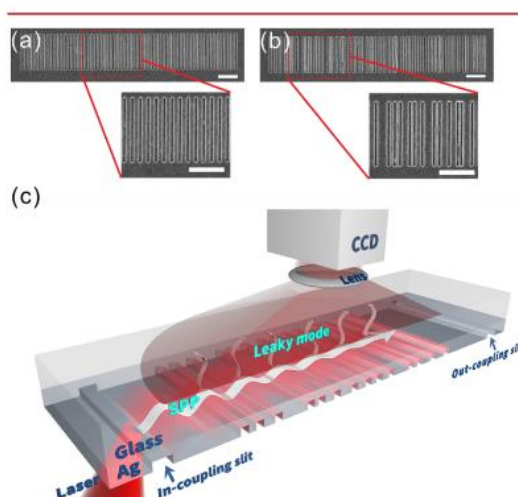


Fig.1 SEM images of the nanogratings and schematic of the experimental setup.

Keywords: Strong localization of surface plasmon polaritons Short-range correlated disorder
Anderson localization Random nanolasing

Reference

- 【1】 W. B. Shi *et al.*, Strong localization of surface plasmon polaritons with engineered disorder, *Nano Lett.* 2018, 18, 1896–1902

COS-SS-CMC NPs的pH诱导电荷反转与还原性能研究

崔兰、刘文涛、刘浩、黄淼铭、何素芹、朱诚身*

郑州大学材料科学与工程学院, 郑州 450002

Email: wtlou@zzu.edu.cn

摘要: 体内复杂的生理屏障仍然制约着纳米载体在临床中的应用, 目前亟需解决的问题有: 药物在血液循环中稳定性差、肿瘤部位渗透性低、细胞内吞作用弱及细胞内释放缓慢等。研究发现载体可以利用其表面电荷、亲疏水性、粒径和形貌等性能提高药物的体内运输效率。因此, 理想的载体应同时满足多种刺激响应, 以有效避免药物泄露, 增强肿瘤部位的药物摄取。为充分挖掘壳寡糖(COS)的特性, 本文利用肿瘤微环境特征, 设计了具有pH-电荷反转-氧化还原多响应性的壳寡糖纳米载体(COS-SS-CMC NPs), 通过逐级诱导电荷快速反转和二硫键断裂, 实现靶向药物释放; 并考察了载体对盐酸阿霉素(DOX)的负载及释放机理、对癌细胞的选择特异性、体内分布、生物安全性和在肿瘤部位的渗透及富集效果。结果表明, 在pH 7.4到6.5时, COS-SS-CMC NPs的表面电荷由负值(-18 mV)反转为正值(12 mV), 且在pH 5.5时, 载体发生海绵质子化作用, 其电荷提高到20 mV, 这将有利于延长DOX的血液循环时间, 并促进DOX从溶酶体逃逸而向癌细胞核渗透。COS-SS-CMC NPs在谷胱甘肽(GSH)环境中实现5 h内快速“解交联”, 其在pH 5.5及10 mM GSH时的DOX释放率(78%)约为pH 7.4时的8倍。DOX@COS-SS-CMC在Hela细胞内的摄取、细胞凋亡及毒性显著提高, 具有显著的时间依赖性(48 h后的荧光强度约为游离DOX的2.3倍, 细胞凋亡率提高到25%, 晚期凋亡率占18%)。DOX@COS-SS-CMC组的裸鼠体重无明显变化, 各器官几乎未见病理损伤, 有效克服了DOX引起的心脏和肝脏毒性。COS通过电荷反转和还原敏感的协同靶向作用表现出更高的抑瘤效率, 为宫颈癌治疗的特异性、有效性和安全性提供了平台。

关键词: 电荷反转 氧化还原响应 pH 响应 壳寡糖 抗肿瘤

参考文献:

【1】Xie J, Gong L, Zhu S, et al. Emerging Strategies of Nanomaterial - Mediated Tumor Radiosensitization[J]. *Advanced Materials*, 2018, 18:2244-2249.

【2】Cui, L, Liu, W, Liu, H, et al. PH-Triggered Charge-Reversal Mesoporous Silica Nanoparticles Stabilized by Chitosan Oligosaccharide/Carboxymethyl Chitosan Hybrids for Effective Intracellular Delivery of Doxorubicin[J]. *ACS Applied Bio Materials*, 2019,2(5):1907-1919.

基金项目: 自然科学基金: U1504527、51703207 和 21803060

基于 $\text{CoS}_2/\text{CNFs}@ \text{MoS}_2$ 复合薄膜的室温 NO 柔性气体传感器的研究

侯思羽、王新昌、上媛媛*

郑州大学物理学院, 郑州 450002

Email: yuanyuanshang@zzu.edu.cn

摘要: 过渡金属硫化物在气体传感器中具有高响应和快速响应/恢复等优异性能, 但其工作温度较高, 功耗较大, 严重阻碍了气体传感器在日常生活的发展和商业化的应用。而碳纳米纤维薄膜具有大的比表面积, 使其表面能够吸收更多的 O_2^- 离子, 在室温下即可对 NO 做出快速响应, 并且因其良好的机械性能而被制备成柔性薄膜传感器, 但其恢复性差。因此, 将过渡金属硫化物与碳纳米纤维薄膜结合, 可以构建出具有增强传感能力的混合结构。

本报告采用静电纺丝技术制备出网状结构的 ZIF-67/PAN 纳米纤维薄膜, 对其进行热处理合成 Co/CNFs 纳米纤维薄膜基底。在此基础上, 利用水热法在纳米纤维上负载 MoS_2 纳米片, 同时将 Co 硫化形成 CoS_2 纳米颗粒, 成功制备了 $\text{CoS}_2/\text{CNFs}@ \text{MoS}_2$ 纳米纤维复合薄膜。 $\text{CoS}_2/\text{CNFs}@ \text{MoS}_2$ 纳米纤维复合薄膜在室温下对 NO 具有良好的响应, 暴露在 10 ppm、20 ppm、50 ppm 和 100 ppm NO 下的响应值分别为-4.3%、-7.6%、-19%、-32%。与碳纳米纤维 (CNFs) 薄膜相比, 具有良好的可恢复性。与 $\text{CNFs}@ \text{MoS}_2$ 纳米纤维复合薄膜相比, 室温中对 NO 的响应有所提高 (响应值从-6%提高到-19%)。并且 $\text{CoS}_2/\text{CNFs}@ \text{MoS}_2$ 纳米纤维复合薄膜在伸直-90°弯曲-180°弯曲-伸直的过程中, 响应基本不变, 说明变形对其几乎没有影响。因此, $\text{CoS}_2/\text{CNFs}@ \text{MoS}_2$ 纳米纤维复合薄膜可用于制备在室温条件下工作的 NO 柔性气体传感器, 在柔性可穿戴气体传感中具有广阔的应用前景。

关键词: 静电纺丝技术 水热法 $\text{CoS}_2/\text{CNFs}@ \text{MoS}_2$ 纳米纤维复合薄膜 NO 柔性气体传感器

参考文献

【1】 M. Meyyappan, Carbon Nanotube-Based Chemical Sensors, *Small*. 2016, 12 (16), 2118.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NSFC 51502267、51872267); 中国博士后科学基金 (2017T100537)

用于锂容量存储的 FeS/Fe₂O₃/CNTs 复合薄膜

张亚玲、张森、上媛媛*

郑州大学物理学院, 郑州 450002

Email: yuanyuanshang@zzu.edu.cn

摘要: 尽管过渡金属氧化物和硫化物具有理论容量高、资源丰富和环境友好等优势,但在锂化/脱锂过程中由于大体积膨胀和差的电子传导性引起的充/放电性能差仍然是不可避免的。与常用的泡沫镍和碳布相比,碳纳米管薄膜具有轻质性。另外,碳纳米管能为电子提供传输通道,并作为导电基底或基本骨架,目前碳纳米管已广泛应用于多孔导电电极,例如超级电容器和锂离子电池。

本报告采用一种简单有效的方法制备出 FeS/Fe₂O₃/CNTs 复合薄膜可作为锂离子电池高性能的阳极。首先,通过水热法制备多孔的 FeS 颗粒,并通过部分氧化 FeS 颗粒来获得花状的 FeS/Fe₂O₃ 复合材料,而后以 FeS/Fe₂O₃ 颗粒为溶质,去离子水为溶剂,配制成一系列浓度的溶液并与碳纳米管复合得到 FeS/Fe₂O₃/CNTs 复合薄膜,并将其用作锂离子电池的电极材料。该电极材料具有优异的比容量以及良好的循环稳定性,当溶液浓度为 2 mg/mL 时,能实现 960 mAh g⁻¹ (电流密度为 200 mA g⁻¹) 以及 440 mAh g⁻¹ 的放电比容量 (电流密度为 2 A g⁻¹)。所得到的复合薄膜具有优异的比容量和循环稳定性,在作为锂离子电池和其他类型电池的高性能阳极材料时具有潜在的应用价值。

关键词: 碳纳米管 锂离子电池 FeS/Fe₂O₃/CNTs 复合薄膜

参考文献

【1】Y. Chen et al., *Densification by Compaction as an Effective Low-Cost Method to Attain a High Areal Lithium Storage Capacity in a CNT@ Co₃O₄ Sponge*. *Adv. Energy Mater.* 2018, 8(19), 1702981.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NSFC 51502267、51872267); 中国博士后科学基金 (2017T100537)

铜纳米管阵列的研制及其光吸收性能研究

沈娟、毛敏、周睿、代波、任勇

西南科技大学, 环境友好能源材料国家重点实验室, 绵阳 621010

Email: rengyong@swust.edu.cn

摘要: 光吸收是光(电磁辐射)在通过材料的时候,与材料发生相互作用,电磁辐射能量被部分转化为其它能量形式的物理过程。光热转换就是被吸收的光以能量的形式被释放出来,产生热的过程,没有被吸收的能量被物体反射、散射或透射。材料的光学性能是指材料对电磁波辐射、特别是对可见光的反应,主要是用材料对电磁波的吸收,反射和透射特性来衡量。光吸收材料应用研究比较热门的方面就是太阳能电池;还在光热疗法方面有广泛的应用;并且在光学检测方面也有很广泛的应用。同时纳米光吸收材料由于具有较高的吸收频率,在很多方面有着宽泛的应用,如雷达隐身材料、光电探测仪、红外吸收材料、天体研究等。一般材料吸收光是针对特定的波长,而对于较长波长范围的光吸收逐渐成为研究热点。

本研究主要研究不同种类的纳米线、纳米管薄膜的光吸收性能,本课题采用物理生长的方法制备了结构排布规则的铜纳米管阵列。用紫外-可见-近红外分光光度计对所制备的铜纳米管阵列进行测试,发现样品在较宽的波长范围内的光吸收性能很好,光吸收性能超过 90%。此方法制备的铜膜具有工艺简单,重复性高,无毒无害等优点。

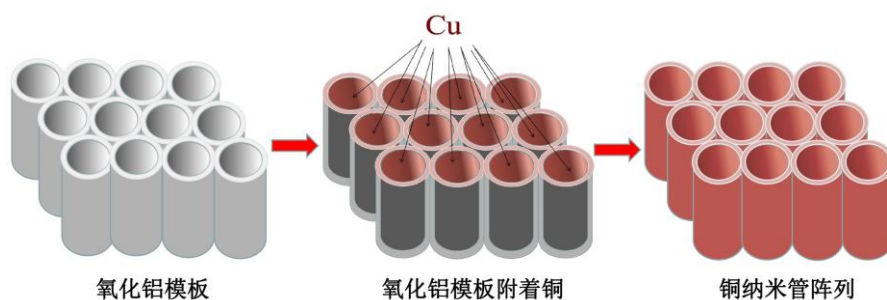


图 1 形成铜纳米管阵列立体模型流程图

关键词: 光吸收 铜纳米管阵列 薄膜

参考文献

【1】 Khan S A, Shahid S, Nazir M, et al. Efficient template based synthesis of Ni nanorods by etching porous alumina for their enhanced photocatalytic activities against Methyl Red and Methyl Orange dyes[J]. Journal of Molecular Structure, 2019, 1184: 316-323.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11775181)

普鲁士蓝类负热膨胀化合物调控及机理研究

高其龙^{1,2} 梁二军¹ 陈骏² 邢献然²

1. 郑州大学物理学院, 郑州 450002 2. 北京科技大学物理学院, 北京, 100083

Email: qilonggao@zzu.edu.cn

摘要: 普鲁士蓝是已发现历史最早的分子钙钛矿化合物, 拥有很多奇异性能^[1-2]。但对于其热膨胀 (Negative Thermal Expansion, NTE) 的研究却很少, 本文主要研究普鲁士蓝类型 NTE 化合物制备、热膨胀调控及机理。普鲁士蓝类基化合物的化学通式为 $AM'M''(CN)_6 \cdot xH_2O$, 其中 A 为一价离子, M' 和 M'' 分别为金属离子。普鲁士蓝类似物为 $M'N_6$ 和 $M''C_6$ 八面体顶角相连而成的框架式化合物, 其晶体结构可简化为 $AM(CN)_3$, 与钙钛矿 (ABO_3) 类似。当 M' 为过渡族金属时, 其 NTE 表现出新颖的各向同性; 当 M' 为稀土族金属时, 表现为各向异性。本文采用变温同步辐射 EXAFS、PDF、NPD 及第一原理计算等方法研究了 $YFe(CN)_6$ 基化合物晶体结构、局域结构及 NTE 机理。 $YFe(CN)_6$ 的 NTE 性质来自于 N 和 C 原子沿垂直于 $Y-N \equiv C-Fe$ 原子链方向的强烈横向摆动, 通过客体分子 (H_2O) 或离子 (K^+) 嵌入来抑制或减弱振动, 实现热膨胀由负膨胀到巨大正膨的转换^[2-5]。

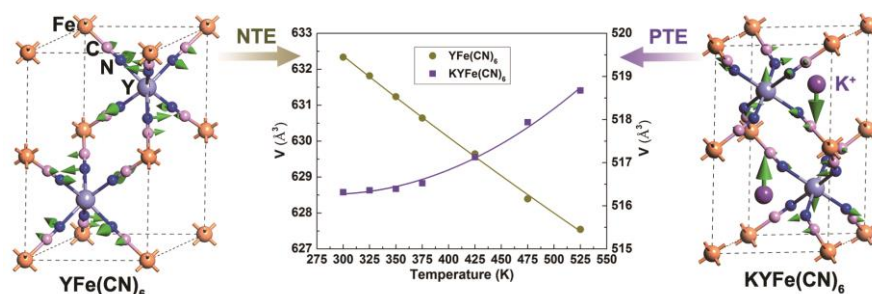


图 1 $YFe(CN)_6$ 基化合物 K 离子脱嵌调控热膨胀

关键词: 普鲁士蓝、框架结构、负热膨胀、局域结构

参考文献

- 【1】 Q. L. Gao *et al.*, Switching Between Giant Positive and Negative Thermal Expansions of a $YFe(CN)_6$ -based Prussian Blue Analogue Induced by Guest Species, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 9023.
- 【2】 J. Chen, Q. L. Gao *et al.*, Tunable Thermal Expansion in Framework Materials through Redox Intercalation, *Nat. Commun.* **2017**, 8, 14441.
- 【3】 Q. L. Gao *et al.*, Structure and Excellent Visible Light Catalysis of Prussian Blue Analogues $BiFe(CN)_6 \cdot 4H_2O$, *Inorg. Chem. Front.* **2018**, 5, 438.
- 【4】 Q. L. Gao *et al.*, Low-Frequency Phonon Driven Negative Thermal Expansion in Cubic $GaFe(CN)_6$ Prussian Blue Analogues, *Inorg. Chem.*, 2018, 57, 10918–10924.
- 【5】 Q. L. Gao *et al.*, unable Thermal Expansion from Negative, Zero, to Positive in Cubic Prussian Blue Analogues of $GaFe(CN)_6$, *Inorg. Chem.* 2018, 57, 14027–14030.

基金项目: 博士后面基金 (No. 2019M652558) 资助项目

脉冲信号对阳极氧化铝薄膜微结构的影响

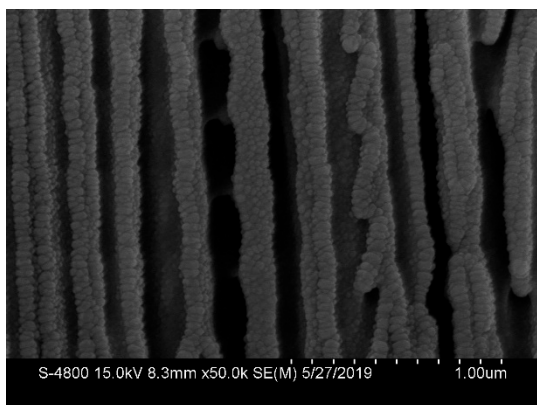
兰天

河北工业大学理学院, 天津 300401

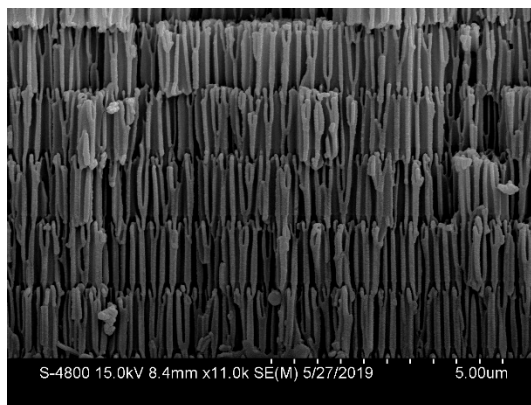
Email: 1091115106@qq.com

摘要: 铝箔经阳极氧化过程后形成的阳极氧化薄膜有两种不同的形态, 即无孔阻挡型氧化膜和多孔型氧化膜。脉冲阳极氧化, 结合了 MA 和 HA 过程的优点, 施加由低电位脉冲和高电位脉冲组成的周期脉冲分别实现 MA 和 HA 条件, 使用对称脉冲信号得到对称的孔径结构, 非对称脉冲信号得到不对称的孔结构。使用通过设计的脉冲序列, 调控电流波形及其参数, 可以控制阳极氧化铝膜的组成和结构, 用于制造调制孔隙几何形状的氧化铝薄膜, 得到不同形状的调制孔径。

课题组团队采用两次阳极氧化的方法, 在 0.6 M 磷酸中制备了“Y”形氧化铝薄膜以及具有调制孔径的氧化铝薄膜。图一, 第一次阳极氧化在 40 V 恒压条件下磷酸中氧化 8 h, 之后使用三角波电流信号的脉冲阳极氧化, 图二中脉冲阳极氧化采用的是非对称性电流信号。图一最大电流为 40 mA, 图二最大电流为 80 mA。纳米多孔阳极氧化铝薄膜因其制备简单等特点, 已被用于制备各种功能性的新薄膜材料, 课题组此工作为更好的研究薄膜材料打下了基础。



图一



图二

关键词: 脉冲阳极氧化 调制孔径

参考文献

- 【1】 Lee W , Kim J C. Spontaneous Current Oscillations during Hard Anodization of Aluminum under Potentiostatic Conditions[J]. *Advanced Functional Materials*, 2010, 20(1):21-27.
- 【2】 Wang B , Fei G T , Wang M , et al. Preparation of photonic crystals made of air pores in anodic alumina[J]. *Nanotechnology*, 2007, 18(36):365601.

在磷酸溶液中制备大孔径阳极氧化铝模板

彭琪

河北工业大学理学院, 天津 300401

Email: 547112868@qq.com

摘要: 阳极氧化铝模板因具有规则的纳米阵列结构及孔径可调等优点, 且制备方法简单、成本较低, 被广泛应用于制备各种纳米材料。在酸溶液中加入合适的电压即可制备出有序的氧化铝模板 (AAO 模板), 铝片在硫酸溶液中可加的氧化电压范围是 15~40 V, 在草酸溶液中可加的氧化电压范围是 20~60 V, 在磷酸中可加的氧化电压范围是 60~195 V, 当磷酸溶液中的氧化电压为 195 V 时, 可获得孔径为 300 nm 的 AAO 模板。

课题组团队先后在草酸溶液和磷酸溶液中进行两次阳极氧化, 制备出了大孔径的阳极氧化铝模板。在 0.3 M 的草酸溶液中进行第一次阳极氧化—脉冲阳极氧化, 制备出层状光子晶体, 随后在 0.3 M 的磷酸溶液中将阳极氧化电压提高到 250 V 以上进行第二次阳极氧化, 氧化时间为 60 S。通过该方法制备的阳极氧化铝模板分为光子晶体层和大孔径层, 光子晶体层的厚度为 8.8 μm , 大孔径层的厚度为 12 μm 。大孔径层生成的纳米管的孔径为 470 nm, 孔间距为 490 nm。相较于 300 nm 的 AAO 模板, 490 nm 的 AAO 模板在能量存储、光催化、生物传感器以及制备纳米线等方面有着更广泛的应用前景。

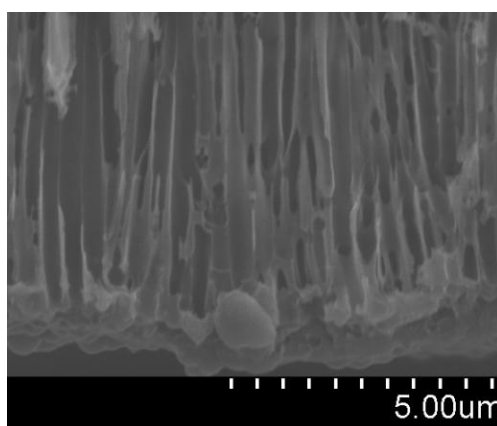


图 1 大孔径阳极氧化铝模板的 SEM 图

关键词: 大孔径阳极氧化铝模板 脉冲阳极氧化 恒压阳极氧化

参考文献

- 【1】 Wang, W *et al.*, Three-dimensional Ni/TiO₂ Nanowire Network for High Areal Capacity Lithium Ion Microbattery Applications, *Nano Lett.*, 2011, 12(6), 655–660.

- 【2】 Losic. D., Preparation of Porous Anodic Alumina with Periodically Perforated Pores, *Langmuir*, 2009, 25(12), 5426–5431.
- 【3】 Ye. W *et al.*, Facile Synthesis of Optical Microcavities by A Rationally Designed Anodization Approach: Tailoring Photonic Signals by Nanopore Structure, *ACS App Mater & Inter*, 2015, 7(18), 9879-9888.

Symmetry breakdown of 4,4''-diamino-p-terphenyl on a Cu(111) surface by lattice mismatch

Qigang Zhong¹, Daniel Ebeling², Jalmar Tschakert², Yixuan Gao³,

Deliang Bao³, Shixuan Du³, Chen Li⁴, Lifeng Chi¹ & André Schirmeisen²

¹ Institute of Functional Nano & Soft Materials (FUNSOM), Jiangsu Key Laboratory for Carbon-Based Functional Materials and Devices, Soochow University, Suzhou 215123, P. R. China.

² Institute of Applied Physics, Justus-Liebig University, Heinrich-Buff-Ring 16, 35392 Giessen, Germany.

³ Institute of Physics & University of Chinese Academy of Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

⁴ School of Environment and Civil Engineering, Dongguan University of Technology, Dongguan 523808, P. R. China.

Email: daniel.ebeling@ap.physik.uni-giessen.de; sxdu@iphy.ac.cn; chilf@suda.edu.cn

Site-selective functionalization of only one of two identical chemical groups within one molecule is highly challenging, which hinders the production of complex organic macromolecules. Here we demonstrate that adsorption of 4,4''-diamino-p-terphenyl on a metal surface leads to a dissymmetric binding affinity. With low temperature atomic force microscopy, using CO-tip functionalization, we reveal the asymmetric adsorption geometries of 4,4''-diamino-p-terphenyl on Cu(111), while on Au(111) the symmetry is retained. This symmetry breaking on Cu(111) is caused by a lattice mismatch and interactions with the subsurface atomic layer. The dissymmetry results in a change of the binding affinity of one of the amine groups, leading to a non-stationary behavior under the influence of the scanning tip. Finally, we exploit this dissymmetric binding affinity for on-surface self-assembly with 4,4''-diamino-p-terphenyl for side-preferential attachment of 2-triphenylencarbaldehyde. Our findings provide a new route towards surface-induced dissymmetric activation of a symmetric compound.

Keywords: molecules on surfaces, local reactivity, adsorption geometry, dissymmetric activation

References:

【1】 Zhong Q, Ebeling D, Tschakert J, et al. Symmetry breakdown of 4,4''-diamino-p-terphenyl on a Cu (111) surface by lattice mismatch[J]. *Nature communications*, 2018, 9(1), 3277.

基金项目: Project supported by the National Science Foundation of China (21790053), Ministry of Science and Technology of China (2017YFA0205002) and Chinese Academy of Sciences (XDPB0601)

Barrierless On-Surface Metal Incorporation in Phthalocyanine-Based Molecules

De-Liang Bao ^{a,b}, Yu-Yang Zhang ^{a,b}, Shixuan Du ^a,
Sokrates T. Pantelides ^{a,b}, and Hong-Jun Gao ^a

^a Institute of Physics, & University of Chinese Academy of Sciences, Chinese
Academy of Sciences Beijing, China 100190

^b Department of Physics and Astronomy and Department of Electrical Engineering
and Computer Science, Vanderbilt University, Nashville, USA
Email: sxdu@iphy.ac.cn

Abstract: On-surface metalation of metal-free phthalocyanine derivatives is a simple and solvent-free way to fabricate MPc compounds. Using phthalocyanine (H₂Pc) molecules on Ag(111) as an example, we investigated the atomic-scale mechanisms of on-surface metalation processes using first-principles calculations based on density functional theory. When the molecules are deposited on a substrate first, we find that transition-metal atoms, except for Zn, drop directly from the vacuum into the molecule's cavity without an energy barrier and bond with the inner four nitrogen atoms, with the two pyrrolic H atoms still in place. Subsequently, the two H atoms transfer to the substrate by overcoming small energy barriers and diffuse away. The substrate participates in the reaction by hybridization. In the alternative process, when metal atoms are adsorbed first on the surface and the H₂Pc molecules are then added, the metal atoms diffuse into the cavity of the molecule via the molecule–surface interface by overcoming finite energy barriers. The above results provide insights into the on-surface metalation that can guide the control of the reaction pathway and products at the atomic level.

关键词 : On-surface metalation; first-principles calculations

参考文献

- 【1】** D. L. Bao *et al.*, Barrierless On-Surface Metal Incorporation in Phthalocyanine-Based Molecules, *J. Phys. Chem. C*, 2018, 122 (12), 6678.

基金项目 : Project supported by the National Basic Research Program of China

(2013CBA01600), the National Natural Science Foundation of China (Nos. 61390501, 61471337, 61622116, and 51325204), National Key Scientific Instrument and Equipment Development Project of China (No. 2013YQ1203451), the CAS Pioneer Hundred Talents Program, and the Transregional Collaborative Research Center TRR 61 (21661132006).

三维垂直石墨烯@碳布宿主无枝晶 Li 金属沉积/剥离

闫聪聪、王烨*、许婷婷

郑州大学物理学院，郑州 450002

Email: wangye@zzu.edu.cn

摘要: 通过研究发现具有优异导电性和大比表面积的三维结构材料作为锂金属电池的负极材料可以有效抑制高容量锂金属电池在电化学沉积期间常见的锂枝晶问题，从而有效提高库伦效率和安全性。课题组团队采用等离子体化学气相沉积技术制备合成了基于导电金属的碳基 VG/CC 3D 多孔结构并用作锂金属负极材料。具有大比表面积的三维 VG/CC 宿主可以提供丰富的活性成核位点并有效地降低电流密度，在循环过程中导致均匀的 Li 沉积以克服枝晶问题，在长时间循环后表现出无枝晶形态以及良好的循环可逆性。我们设计的 Li@VG/CC 具有出色的循环稳定性，稳定的高库仑效率和相对较小的电压滞后。它在 10 mA cm^{-2} 的高电流密度下提供 90.9 mV 的小电压滞后，在 2 mA cm^{-2} 下 100 次循环时库仑效率为 99%。重要的是，由 Li@VG/CC 作为负极和 LCO 作为正极组成的全电池在 0.2 C 时具有 133 mAh g^{-1} 的高容量。这种特殊设计的 Li@VG/CC 为高容量锂金属负极提供了一种新方法。

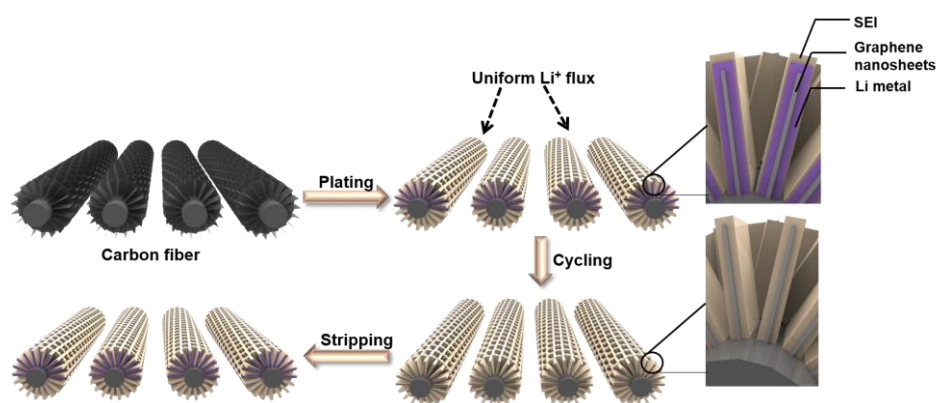


图 1 在 VG/CC 上的 Li 沉积/剥离过程的示意图

关键词： 锂金属负极 三维 VG/CC 无枝晶 优异的电化学性能 长循环稳定性

参考文献

- 【1】** G. Huang et al., Lithiophilic 3D nanoporous nitrogen-doped graphene for dendrite-free and ultrahigh-rate lithium-metal anodes. *Adv. Mater.* 2019, 31 (2), 1805334.
- 【2】** F. Liu et al., Regulating lithium nucleation via CNTs modifying carbon cloth film for stable Li metal anode. *Small* 2019, 15 (5), 1803734.

基金项目： 国家自然科学基金 (NO. 21603192 51802288 , U1804132)

Fabrication of Millimeter-Scale, Single-Crystal One-Third-Hydrogenated Graphene with Anisotropic Electronic Properties

Hui Chen, De-Liang Bao, Dongfei Wang, Yande Que, Wende Xiao,

Guojian Qian, Hui Guo, Jiatao Sun, Yu-Yang Zhang, Shixuan Du,*

Sokrates T. Pantelides, and Hong-Jun Gao*

Institute of Physics and School of Physical Sciences and CAS Center for Excellence in Topological Quantum Computation, University of Chinese Academy of Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Department of Physics and Astronomy and Department of Electrical Engineering and Computer Science, Vanderbilt University, Nashville, TN 37235, USA

E-mail: sxdu@iphy.ac.cn; hjgao@iphy.ac.cn

Abstract: Periodically hydrogenated graphene is predicted to form new kinds of crystalline 2D materials such as graphane, graphone, and 2D C_xH_y , which exhibit unique electronic properties. Controlled synthesis of periodically hydrogenated graphene is needed for fundamental research and possible electronic applications. Only small patches of such materials have been grown so far, while the experimental fabrication of large-scale, periodically hydrogenated graphene has remained challenging. In the present work, large-scale, periodically hydrogenated graphene is fabricated on Ru(0001). The as-fabricated hydrogenated graphene is highly ordered, with a $\sqrt{3} \times \sqrt{3}/R30^\circ$ period relative to the pristine graphene. As the ratio of hydrogen and carbon is 1:3, the periodically hydrogenated graphene is named “one-third-hydrogenated graphene”(OTHG). The area of OTHG is up to 16 mm². Density functional theory calculations demonstrate that the OTHG has two deformed Dirac cones along one high-symmetry direction and a finite energy gap along the other directions at the Fermi energy, indicating strong anisotropic electrical properties. An efficient method is thus provided to produce large-scale crystalline functionalized graphene with specially desired properties.

Keywords: anisotropy, hydrogenated graphene, millimeter-scale, single crystals

【1】 H. Chen *et al.*, Fabrication of Millimeter-Scale, Single-Crystal One-Third-Hydrogenated Graphene with Anisotropic Electronic Properties, *Adv. Mater.* 2018, 30, 1801838.

基金项目: the National Natural Science Foundation of China (Nos. 61390501 and 51761135130), National “973” projects of China (2013CBA01600), National Key Research and Development Projects of China (2016YFA0202300 and 2016YFA0300904), Strategic Priority Research Program of the Chinese Academy of Sciences (CAS) (Nos. XDPB0601, XDB07030100, and XDPB08-1), the CAS Pioneer Hundred Talents Program, and Beijing Nova Program (No.Z181100006218023), the U.S. Department of Energy under Grant No. DE-FG02-09ER46554, the McMinn Endowment.

单层六角蜂窝状硒化铜中的二维狄拉克节线费米子

董文翰、高蕾

中国科学院物理研究所，北京 100190

Email: whdong@iphy.ac.cn

摘要：二维过渡金属二硫化物（TMDs）由于其体相层状堆积的特性而易被制备，但二维过渡金属一硫化物却很难获得。实验上最早在铜（111）表面生长出了具有本征三角孔洞图案的单原子厚度硒化铜（CuSe），但第一性原理计算显示独立（free-standing）的单层孔洞硒化铜是不稳定的，相反没有孔洞的六角蜂窝状硒化铜是最稳定的。这样的六角蜂窝结构硒化铜中具有由镜面对称性保护的狄拉克节线费米子（DNLF），并且在自旋轨道耦合打开的能隙中存在拓扑非平庸的边界态。

受到第一性原理计算无孔洞硒化铜结构的启发，通过高质量的分子束外延生长（MBE）制备和扫描隧道显微镜（STM）表征，物理研究所 N04 组确实在铜（111）表面上得到单层的硒化铜样品并通过低能电子衍射（LEED）验证了其六角蜂窝状的晶格结构。进一步地，样品角分辨光电子能谱（ARPES）的测量结果与电子能带的第一性原理计算结果符合得很好。这些结果让我们有理由相信六角蜂窝的过渡金属一硫化物可以为研究二维狄拉克节线费米子提供新的平台。

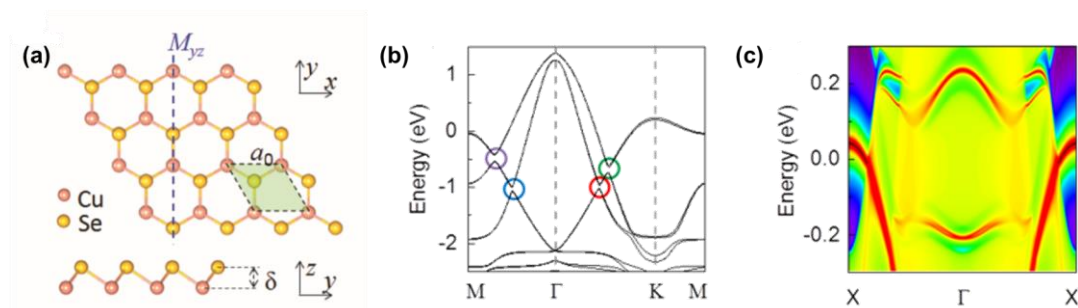


图 1 单层 free-standing 硒化铜的原子和电子能带结构。(a) 有 z 方向位错的六角蜂窝状晶格结构；(b) 考虑自旋轨道耦合的电子能带，标注处为打开的能隙；(c) 以硒终结的 zigzag 边界中的非平庸边界态。

关键词：二维狄拉克线费米子 第一性原理计算 单层硒化铜

参考文献

- 【1】 Gao L, Sun J T, Lu J C, et al. Epitaxial growth of honeycomb monolayer CuSe with dirac nodal line fermions[J]. *Advanced Materials*, 2018, 30(16): 1707055.

基金项目：国家重点研发计划(2016YFA0202300)、国家重点基础研究发展计划(2013CBA01600)

等

Band engineering of B₂H₂ nanoribbons

Bao Lei, Yu-Yang Zhang, and Shi-Xuan Du

¹Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences (CAS), Beijing 100190, China

²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

³CAS Center for Excellence in Topological Quantum Computation, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Email: sxdu@iphy.ac.cn

Freestanding honeycomb borophene is unstable due to the electron-deficiency of boron atoms. B₂H₂ monolayer, a typical borophene hydride, has been predicted to be structurally stable and attracts great attention. Here, we investigate the electronic structures of B₂H₂ nanoribbons. Based on first-principles calculations, we have found that all narrow armchair nanoribbons with and without mirror symmetry (ANR-s and ANR-as, respectively) are semiconducting. The energy gap has a relation with the width of the ribbon. When the ribbon is getting wider, the gap disappears. The zigzag ribbons without mirror symmetry (ZNR-as) have the same trend. But the zigzag ribbons with mirror symmetry (ZNR-s) are always metallic. We have also found that the metallic ANR-as and ZNR-s can be switched to semiconducting by applying a tensile strain along the nanoribbon. A gap of 1.10 eV is opened under 16% strain for the 11.0-Å ANR-as. Structural stability under such a large strain has also been confirmed. The flexible band tunability of B₂H₂ nanoribbon increases its possibility of potential applications in nanodevices.

Keywords: borophene hydride nanoribbons, band engineering, first-principles calculations, strain

References:

- 【1】 Lei B, Zhang Y Y, Du S X. Band engineering of B₂H₂ nanoribbons[J]. Chinese Physics B, 2019, 28(4),046803.

基金项目 : Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61888102, 61390501, and 51872284), the CAS Pioneer Hundred Talents Program, the Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences (Grant Nos. XDB30000000 and XDB28000000), the Beijing Nova Program, China (Grant No. Z181100006218023), and the University of Chinese Academy of Sciences.

F-P038

专题代号: F

Ferromagnetic Sublattices and Topological Charge Density Distribution of
Antiferromagnetic Skyrmionic Lattices Probed with Quantum Computational
Methods

LIU Zhaosen

liuzhsnj@126.com

College of Physics and Electronic Engineering,
Hengyang Normal University, Henghua Road 16, Hengyang 421002, China

Ferromagnetic (FM) skyrmions are considered as promising candidates for spintronic racetrack memory. However, the Magnus force, which acts on FM skyrmions perpendicularly to the applied electric current direction, eventually pushes the FM skyrmions over the edge of nanotrack, seriously limiting the use of FM skyrmions as racetrack nano-devices. In contrast, that Magnus force experienced by the two sublattices of an antiferromagnetic (AFM) skyrmion can be canceled completely, so that they are expected to move straightly along the applied electric current with greatly enhanced velocity. But, Monte Carlo simulations done by previous authors show that in two-dimensional (2D) systems where both AFM Heisenberg exchange and Dzyaloshinsky-Moriya (DM) interactions are present, AFM skyrmionic crystals (SkLs) can only be formed in 2D triangle lattices, or in a very tiny square lattice at elevated temperatures. In this work we perform simulations for both square and triangular 2D AFM lattices by means of two quantum computational methods which we develop in recent years. In our quantum models, spins appearing in Hamiltonians are quantum operators instead of classical vectors. We find from our simulated results that both Bloch- and Néel-types AFM-SkLs can be induced by strong external magnetic field exerted normal to the 2D monolayers; each of these AFM-SkLs can be decomposed into two or three FM SkLs, respectively; the topological-charge- density distribution forms periodical and symmetric lattices as well though the computational model is quantized and discrete. Our findings suggests that quantum theory is really indispensable in order to accurately describe the magnetic systems when the AFM Heisenberg exchange and Dzyaloshinsky-Moriya interactions are all involved.

Supported by National Natural Science Foundation of China under grant No. 11274177. The executable files can be provided after a few months upon reasonable request.

Recovery of the Dirac states of graphene by intercalating two-dimensional traditional semiconductors

Yixuan Gao, Yu-Yang Zhang, and Shixuan Du

¹Institute of Physics and University of Chinese Academy of Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, People's Republic of China

²CAS Center for Excellence in Topological Quantum Computation, Beijing 100190, People's Republic of China

E-mail: zhangyuyang@ucas.ac.cn and sxdu@iphy.ac.cn

The epitaxial growth of graphene on transition-metal substrates has proved to be an efficient method to synthesize high-quality large-area graphene. However, due to the interaction between graphene and the transition-metal substrate, the electronic structure of the as-fabricated graphene is distorted. Here, using density functional theory calculations, we investigated the effect of intercalating two-dimensional (2D) silicon and III–V materials, such as double-layer honeycomb AlAs, into the graphene-metal interface. We found that the intercalation of these 2D materials significantly reduces the interaction between graphene and the transition-metal substrate. The Dirac state is largely restored. The doping level of graphene induced by 2D intercalated material and the metal substrate is proportional to the work function difference between graphene and 2D materials/metal. This work provides a way for the formation of freestanding graphene and further fabrication of graphene-based devices.

Keywords: semiconducting materials intercalation, graphene, first-principles calculations

【1】 Gao Y, Zhang Y Y, Du S. Recovery of the Dirac states of graphene by intercalating two-dimensional traditional semiconductors[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2019, 31(19): 194001.

基金项目 : This work is supported by National Key Research & Development Projects of China (Nos. 2016YFA0202300, 2018YFA0305800), National Natural Science Foundation of China (Grants No.61390501, 51872284), the CAS Pioneer Hundred Talents Program, the Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences (No. XDB30000000), and Beijing Nova Program (No. Z181100006218023). A portion of the research was performed in CAS Key Laboratory of Vacuum Physics. Computational resources were provided by the National Supercomputing Center in Tianjin.

Band engineering of double-wall Mo-based hybrid nanotubes

陶蕾^{1,2}, 张余洋^{1,2,3}, 孙家涛^{1,2}, 杜世萱^{1,2,3}, 高鸿钧^{1,2,3}

中国科学院物理研究所, 北京 100190

Email: sxdu@iphy.ac.cn

ABSTRACT : Hybrid transition-metal dichalcogenides (TMDs) with different chalcogens on each side (X-TM-Y) have attracted attention because of their unique properties. Nanotubes based on hybrid TMD materials have advantages in flexibility over conventional TMD nanotubes. Here we predict the wide band gap tunability of hybrid TMD double-wall nanotubes (DWNTs) from metal to semiconductor. Using density function theory (DFT) with HSE06 hybrid functional, we find that the electronic property of X-Mo-Y DWNTs (X = O and S, inside a tube; Y = S and Se, outside a tube) depends both on electronegativity difference and diameter difference. If there is no difference in electron negativity between inner atoms (X) of outer tube and outer atoms (Y) of inner tube, the band gap of DWNTs is the same as that of the inner one. If there is a significant electronegativity difference, the electronic property of the DWNTs ranges from metallic to semiconducting, depending on the diameter differences. Our results provide alternative ways for the band gap engineering of TMD nanotubes.

Keywords: band engineering, nanotube, hybrid transition metal dichalcogenides, first-principle calculations.

References:

【1】 Lei Tao *et al.*, Band engineering of double-wall Mo-based hybrid nanotubes, *Chinese Phys. B.* 2018, **27**, 076104.

基金项目 : Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2016YFA0202300), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61390501), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2013CBA01600), Strategic Priority Research Program (B) of Chinese Academy of Sciences (Grant Nos. XDPB0601 and XDPB08-1), the CAS Pioneer Hundred Talents Program, and Beijing Nova Program, China (Grant No.Z181100006218023).

NVPOF/还原氧化石墨烯用于高性能钠离子电池正极

麻彩云、许婷婷*、闫聪聪、王焱

郑州大学物理学院，郑州 450002

Email: xutt@zzu.edu.cn

摘要：化石燃料的消耗导致能源需求的快速增长和日益严重的环境污染问题。急需高性能、低成本的可充电储能装置来满足社会和工业要求。近几年，钠离子电池（SIBs）逐渐开始受到广泛关注，并且由于钠是地球上低成本和高度丰富的资源被认为是锂离子电池（LIBs）的一种有前途的替代品。在研究最广泛的几类正极材料中，聚阴离子基材料显示出良好的热稳定性和优异的电化学性能。其中 $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{O}_2\text{F}$ （NVPOF）由于其高工作电压（ $\sim 3.8\text{ V vs. Na}^+/\text{Na}$ ）和大的理论容量（ $\sim 130\text{ mA h g}^{-1}$ ）成为钠离子电池（SIBs）有希望的正极材料。然而，电化学性能受其固有的较低电子导电性的严重影响。

在这项工作中，我们通过简单的正负电荷吸引方法将 NVPOF 纳米棒均匀地附在氧化石墨烯纳米片上，然后进行热处理，最终设计了一种混合纳米复合材料。制备的 NVPOF@5mg rGO 复合材料在电流密度为 650 mA g^{-1} 时具有 74 mA h g^{-1} 的高比容量。此外，它表现出长期循环稳定性，在 1000 次循环后仍然保持 79.7% 的容量，这种优异的电化学性能归因于 rGO 纳米片与 NVPOF 纳米棒之间的协同效应，增强了电子导电性以及改善了电动力学行为。

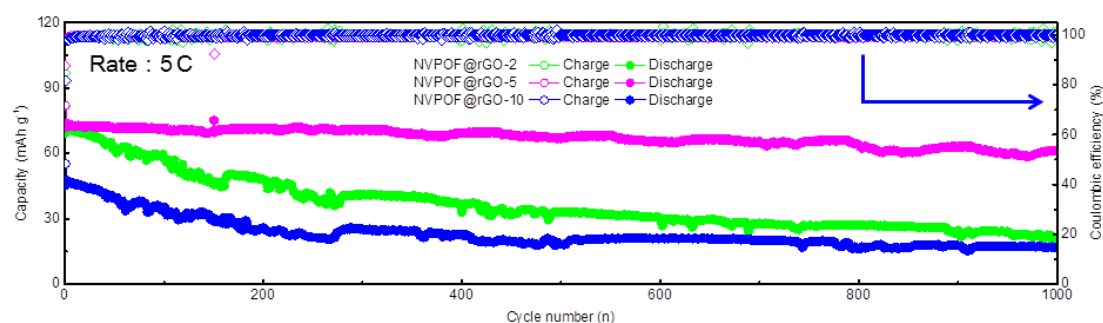


图 1 NVPOF@rGO 复合材料在倍率为 5C 下的长循环和库伦效率图

关键词：钠离子电池 NVPOF 正极

参考文献

- 【1】 C. B. Zhu *et al.*, A High Power–High Energy $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}_3$ Sodium Cathode: Investigation of Transport Parameters, Rational Design and Realization, *Chem. Mater.* 2017, 29 (12), 5207.
- 【2】 J. Z. Guo *et al.*, High-Energy/Power and Low-Temperature Cathode for Sodium-Ion Batteries: In Situ XRD Study and Superior Full-Cell Performance, *Adv. Mater.* 2017, 29 (33), 1701968.
- 【3】 M. W. Xu *et al.*, $\text{Na}_3\text{V}_2\text{O}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}$ /graphene sandwich structure for high-performance cathode of a sodium-ion battery, *Phys.Chem. Chem. Phys.* 2013, 15, 13032

基金项目：国家自然科学基金 (NO. 21603192 51802288 , U1804132)

准确测量摩擦纳米发电机的开路电压

张文科、顾广钦、程纲*

河南大学, 材料学院, 特种功能材料教育部重点实验室, 开封, 475002.

Email: chenggang@henu.edu.cn

开路电压 (V_{oc}) 是摩擦纳米发电机 (TENG) 的一项重要输出指标, 在传统的测量方法中, TENG 的开路电压大多是用两种方法测量, 即用系统静电计 (Keithley, model 6514) 测量, 或者在电路中串联一个电阻, 通过测量电流来计算开路电压。但是, 传统测量 TENG 开路电压的方法所得到的开路电压均小于真实的开路电压值。这是因为四种基本工作模式的 TENG 中除了单电极模式, 其他三种模式的 TENG 在传统的测量方式中都存在单电极模式的电荷传输。对于垂直接触-分离模式、水平滑动模式、独立层模式的 TENG 都有两个电极, 按照传统的测量方法, 系统静电计测试黑表笔相当于接地, 在 TENG 工作过程中, 始终有电荷转移到大地, 这就是单电极模式的电荷传输。对于单电极模式 TENG, 由于一个电极始终与大地相连, 无论怎么测量始终都有电荷转移到大地。因此除了单电极模式 TENG, 对于其他三种基本模式的 TENG, 按照传统的测量方法始终存在单电极模式的电荷传输, 这就造成了测量得到的 V_{oc} 要小于其真实值, 这将会影响 TENG 的输出功率、输出能量和能量转换效率的计算。

基于以上讨论, 在测量中阻断单电极模式的电荷传输, 是准确测量开路电压的关键。因此, 我们设计了一种新的开路电压测量方法 (如下图所示), 通过阻断单电极模式的电荷传输, 解决传统测量方法中存在的问题, 进而得到真实的开路电压。这种方法计算开路电压的公式为: $V_{oc}=I \times 2R$ (两个开关同时闭合; R 为无穷大时)。本文提供的测试方法为 TENG 的理论计算和实际应用提供了可靠的开路电压测量方法和真实的开路电压数据, 对 TENG 的实际应用具有重要意义。

关键词: 摩擦纳米发电机, 开路电压, 工作模式, 能量采集

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 61522405), 中原科技创新领军人才项目

(194200510004), 中国高校长江学者和创新团队研究计划 (PCS IRT_15R18)。

Lateral and Vertical MoSe₂-MoS₂ Heterostructures via Epitaxial Growth: Triggered by High Temperature Annealing and Precursor Concentration

郝国林 , 湘潭大学物理与光电工程学院

Atomically thin transition-metal dichalcogenide (TMDC) heterostructures have attracted increasing attention due to their unprecedented opportunities in the fields of electronics and optoelectronics. However, selective growth of either lateral or vertical TMDC heterostructure remains challenging. Here, we report that lateral and vertical MoS₂/MoSe₂ epitaxial heterostructures can be successfully fabricated via one-step growth strategy, which are triggered by the concentration of sulfur precursor vapor and high temperature annealing process. Vertically stacked MoS₂/MoSe₂ heterostructures can be synthesized via control of the nucleation and growth kinetics, which is induced by high sulfur vapor concentration. High temperature annealing process results in the formation of fractured MoSe₂ and in situ epitaxial growth of lateral MoSe₂-MoS₂ heterostructures. This study has unveiled the importance of sulfur vapor concentration and high temperature annealing process on the controllable growth of MoSe₂-MoS₂ heterostructures, which paves a new route for fabricating two-dimensional TMDC heterostructures.

The anisotropic magnetoresistance effect in a candidate ferromagnetic nodal line semimetal

张敏昊¹、宋凤麒¹、王学锋²

¹南京大学物理学院, 南京 210093

²南京大学电子科学与工程学院, 南京 210023

Email: zhangminhao@nju.edu.cn

Abstract: The anisotropic magnetoresistance (AMR) effect, in which the electrical resistivity depends on the relative angle between the magnetization direction and the electric current direction, is one of the most fundamental characteristics involving magnetic and transport properties.¹ In our previous work, we show that the in-plane negative MR is induced due to the topological phase transition enhanced intersurface coupling near the topological critical point.² Here we observed an anomalous temperature-dependent AMR effect in a candidate ferromagnetic (FM) nodal line semimetal (Figure 1). These results demonstrate that FM topological semimetals hold significant potential for spin- and orbital-dependent electronic functionalities.

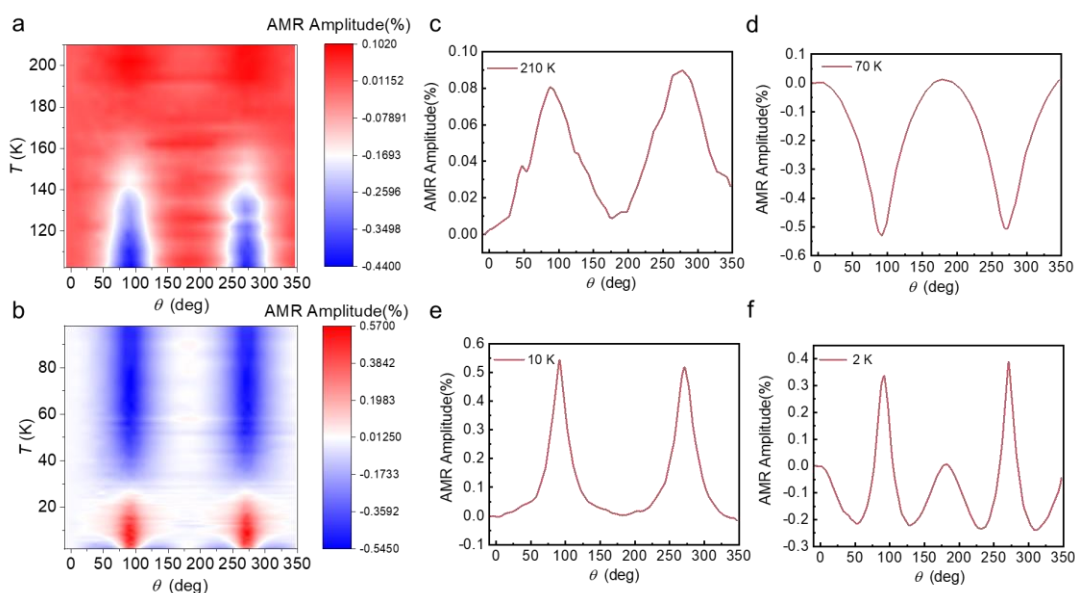


Figure 1. (a,b) The AMR amplitude plotted against temperature T and angle θ . (c-d) The AMR amplitude plotted at 2 K, 10 K, 70 K and 210 K, respectively.

Keywords: The AMR effect; FM topological semimetals

REF: 1. Kokado S, et al. Journal of the Physical Society of Japan, 2012, 81(2): 024705.

2. Zhang M, et al. ACS nano, 2018, 12(2): 1537-1543.

通过氟化退氟调节二维原子级氮化碳的半导体性质研究

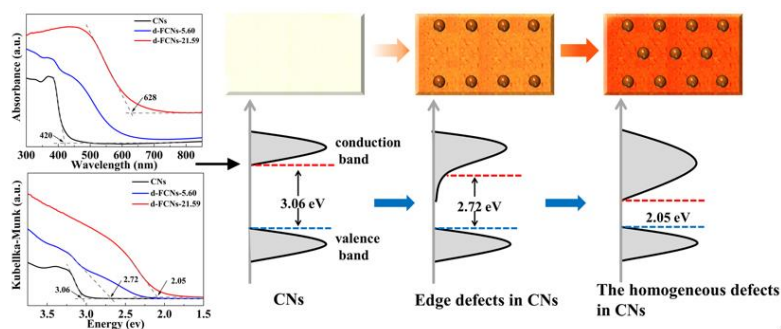
汤怒江, 王勇, 都有为

南京大学物理学院, 江苏南京 21003

Email: tangnujiang@nju.edu.cn

摘要: 二维原子级氮化碳由于其独特的物理和化学性质, 被广泛用于太阳能转换。但是, 二维原子级氮化碳的禁带宽度约为 3.06 eV, 仅可吸收太阳光谱中波长小于 420 nm 的紫外光, 无法有效利用占太阳光谱约 43% 的可见光。因此, 有必要通过引入电子结构修饰剂 (异质原子或缺陷) 来拓展其可见光吸收, 从而更加充分地利用太阳光, 尤其是如何通过控制修饰剂的空间分布来实现光吸收边的带对带红移变得非常关键。但由于在其层内周期性连接单元存在大量由 NH/NH₂ 形成的氢键, 而氢键维持的长程有序具有很弱的热稳定性, 因而实现强的可见光吸收带仍是一个挑战。

最近我们小组首创了轻质元素超掺杂技术【1, 2】, 即首先对低维碳材料进行氟化, 然后进行退氟处理, 再进行相关轻质元素的原位掺杂。借助于该氟化退氟工艺, 我们最终在二维原子级氮化碳中实现了光吸收边的带对带红移。实验表征结合理论计算的结果表明: 缺陷的边缘分布使得光吸收形状类似于肩膀状吸收, 原因是在导带底附近形成了局域态。而缺陷的均相分布成功地实现了光吸收边的带对带红移, 其原因是氟化退氟过程形成了高密度的缺陷态使得导带底向下移动。可见光光催化产氢测试结果表明: 氟化退氟后样品的产氢性能从 262.43 提升到 3809.6 mol h⁻¹g⁻¹, 实现了卓越的光催化性质【3】。对于均相改性的样品我们进行了光电催化测试【4】。结果表明, 改性后的红色样品与氧化钛纳米棒构成的异质结在可见光照射下表现出优异的光电转换效率。



关键词: 二维原子级氮化碳, 氟化热退氟, 均相改性

资助项目: 国家自然科学基金 (51572122), 科技部重点研发计划 (2017YFA0206304)

参考文献

- 【1】Liu Y.; **Tang N. J.***; Du Y. W.; Cheng H. M.*; et al. Elemental superdoping of graphene and carbon nanotubes. *Nat. Commun.* **2016**, 7, 10921.
- 【2】Zhang W. L.; **Tang N. J.***; Du Y. W.; Cheng H. M.; Ren W. C. *; et al. Nitrogen-superdoped 3D graphene networks for high-performance supercapacitors. *Adv. Mater.* **2017**, 29, 1701677.
- 【3】Wang Y.; **Tang N. J.***; Du Y. W.; Liu G.*; et al. Increasing solar absorption of atomically thin 2D carbon nitride sheets for enhanced visible-light photocatalysis. *Adv. Mater.* **2019** (revised).

一维碳链：下一个碳的同素异形体

石磊

中山大学，材料科学与工程学院，510275 广东

shilei26@mail.sysu.edu.cn

关键词：碳链；碳纳米管；拉曼光谱

摘要：碳单质拥有多种同素异形体，结构从三维、二维到一维；导电性能则从导体、半导体到绝缘体。目前对于碳的同素异形体的研究主要集中在二维的石墨烯和准一维的碳纳米管，对于完全一维的碳链研究还处于起步阶段。理论和实验表明一维碳链具有许多优异的性能，如强于石墨烯的力学、热学性能；其直接带隙随着长度可调。然而，由于其结构极不稳定，相互之间容易发生交联反应，因此合成碳链极其困难，尤其是越长的碳链越难以合成。以往的合成研究主要是利用有机化学合成的方法，使用各种化学基团连接在碳链的两端，从而稳定碳链。近年来，我们使用双壁碳纳米管为模板，直接生长一维碳链，合成的碳链受到碳纳米管的保护，因此结构稳定，可在大气环境中保存数年。在此报告中，作者将简介一维碳链的研究历史，讨论近期我们在碳链研究中取得的研究成果，如：世界最长一维碳链的合成【1】；利用拉曼光谱研究其直接带隙和长度以及特征峰位置的关系【2】；研究碳链和碳纳米管之间的相互作用【3】；可控合成不同长度碳链从而调整其带隙大小【4】；原位控制碳链的生长【5】等内容。

参考文献：

- 【1】 L. Shi, et al. *Nature Mater.* 15, 634-639 (2016)
- 【2】 L. Shi, et al. *Physical Review Materials* 1, 075601 (2017)
- 【3】 L. Shi, et al. *ACS Nano* 12, 8477-8484 (2018)
- 【4】 L. Shi, et al. Submitted (2019)
- 【5】 L. Shi, et al. In revision (2019)

Strain-induced Electric Effects in Condensed Matters

Yuanjie Huang*

**Institute of Fluid Physics, Chinese Academy of Engineering Physics, Mianyang, 621900, China*

*Corresponding author's E-mail: hyj201207@163.com

Abstract: In this work, we investigate shock polarization [1-4], electric properties of dislocations [5-10] and mechanical-electric coupling in condensed matters. By means of research, we found a new law for condensed matters and it is it was formally named as *Yuheng Zhang equation*. Utilizing this law, it is found that 1) under non-uniform strain, materials may behave as a p-n junction, exhibiting current-rectifying properties; 2) pure semiconductors with strain gradient may be utilized as a solar cell; 3) thermoelectric power or Seebeck coefficient of materials may be dominated by this law and thermal expansion (contraction); 4) this law gives a new mechanism of electron-phonon interaction; 5) an electric field always accompanies defects in materials, such as dislocations, Abrikosov vortices and so on, and their electric field and related electrical potential are given; 6) strain gradient can cause an electric polarization in dielectric materials; 7) the gravity induced electric field persists within planets including the earth; 8) this law may be the microscopic physical origin of flexoelectric effect and the flexoelectric coefficients can be derived by means of this equation; 9) microscopic theory of shock polarization, another long-standing problem in the world, may be clarified in terms of this law. In all, the newly found law may offer people new understanding of electric properties of strained materials, and may find various applications in multi-areas.

keywords: mechanical-electric coupling, dislocation, shock polarization, flexoelectric effect

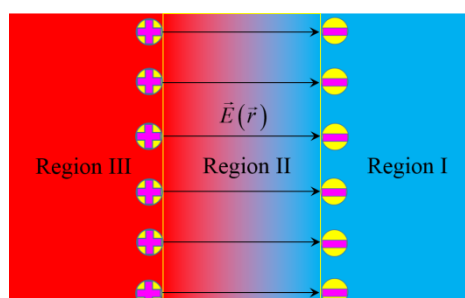


Figure 1. Schematic diagram of an electric field caused by *Yuheng Zhang equation* in materials: blue zones (Region I) and red zones (Region III) denote the unstrained regions and strained regions, respectively, and color gradient zone is strain gradient regions (Region II); stuffed circles with negative sign and stuffed circles with positive sign present electrons and ions; arrows in Region II give the electric field.

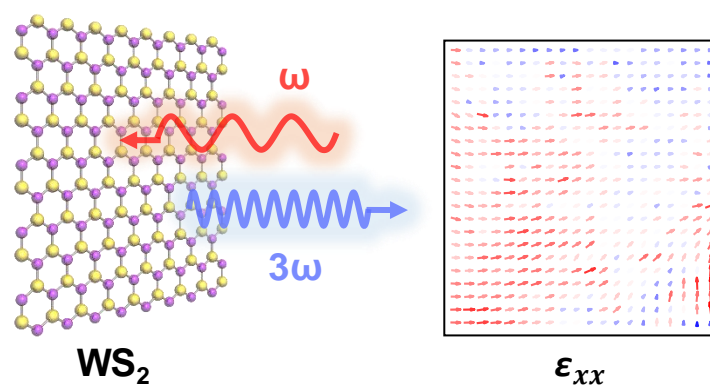
Reference:

- [1] A. W. Stepanow, Über den mechanismus der plastischen deformation, *Zs. Phys.* **81**, 560 (1933).
- [2] V. N. Mineev and A. G. Ivanov, Electromotive force produced by shock compression of a substance, *Sov. Phys. Usp.*, **19**, No. 5, 400-419 (1976).
- [4] Paul. Harris, Mechanism for the shock polarization of dielectrics, *J. Appl. Phys.* **36**, No. 3, 739-741(1965).
- [5] J. Y. Wong, R. K. Linde, R. M. White, Electrical signals in dynamically stressed ionic crystals: a dislocation model, *J. Appl. Phys.* **40**, No. 10, 4137-4145(1969).
- [6]. M. Reiche, M. Kittler, H. Uebensee, E. Pippel, S. Hopfe, Dislocations as native nanostructures—electronic properties, *Adv. Nano Res.* **2**, 1 (2014).
- [7] M. Reiche, M. Kittler, W. Erfurth, E. Pippel, K. Sklarek, H. Blumtritt, A. Haehnel, H. Uebensee, On the electronic properties of a single dislocation, *J. Appl. Phys.* **115**, 194303 (2014).
- [8] M. Reiche, M. Kittler, H. Uebensee, E. Pippel, A. Haehnel, S. Birner, Electronic properties of dislocations, *Appl. Phys. A* **122**:389(2016).
- [9] V. Nagarajan, C. L. Jia, H. Kohlstedt, R. Waser, I. B. Misirlioglu, S. P. Alpay, R. Ramesh, Misfit dislocations in nanoscale ferroelectric heterostructures, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 192910(1-3)(2005).
- [10] S. P. Alpay, I. B. Misirlioglu, V. Nagarajan, R. Ramesh, Can interface dislocations degrade ferroelectric properties? *Appl. Phys. Lett.* **85**, No.11, 2044-2046 (2004).

普适于二维材料体系、基于光学三倍频的应变张量表征方法

梁晶, 刘开辉*, 俞大鹏

定量地监控二维材料中的应变分布,对于理解物理现象本质及实现功能调控十分重要。光学表征方法具有无损伤、高效率的优点,被广泛应用于探测二维材料中的局域应变及应变分布。但是,目前存在的光学表征方法往往有材料体系的限制,例如,荧光光谱只适用于具有直接带隙的半导体材料体系;拉曼光谱只适用于具有对应变敏感的拉曼活性声子模的材料体系;光学倍频光谱只适用于中心反演对称性破缺的材料体系。本文首次报道了一种具有材料体系普适性的、监控二维晶体材料中应变张量的光学表征方法:偏振依赖的光学三倍频光谱。本方法的材料体系普适性源于两点:①二维材料普遍具有三阶非线性光学响应;②应变通过光弹张量作用于三阶非线性极化张量,从而使二维材料的三阶非线性响应发生变化。本文确定了中心反演对称性破缺的单层二硫化钨(WS_2 , D_{3h} 点群)及中心反演对称的双层 WS_2 (D_{3d} 点群)的光弹张量,并利用此张量成功地表征单层 WS_2 薄膜中均匀及随机的应变张量分布。作为参考,本文还提供了 32 个晶体结构点群的光弹张量形式。基于光学三倍频的、具有材料体系普适性的应变张量表征方法有助于实现二维材料的功能结构设计,促进基于二维材料的电子学、光电子学、光伏器件等的应用。

单层 WS_2 薄膜示意图及其中的随机应变张量分布

用第一性原理方法分析有限温度下硼烯的电阻率

刘喆、朱明枫、郑以松

吉林大学物理学院，长春 130012

Email: liuz15@mails.jlu.edu.cn

摘要：在有限温度下，由电子-声子散射主导的本征电阻率是金属的重要性质。作为一类新合成的二维平面材料，硼烯具有金属型输运特性。我们利用密度泛函理论，结合 Wannier 插值方法，对两种硼烯同素异形体(分别称为 β_{12} 和 χ_3)的本征电阻率进行了高精度的计算。首先，两种硼烯都表现出了明显的各向异性，但是 β_{12} 型硼烯的各向异性显著地受掺杂影响，而 χ_3 型硼烯的各向异性对掺杂不敏感。另外，两种材料的电阻都在高温区(>160K)与温度呈线性关系，这与 Bloch-Grüneisen(B-G)理论一致。但是当温度下降时，B-G 理论预测的电阻与 T^4 成正比的规律只在 β_{12} 型硼烯中成立，而在 χ_3 型硼烯中，这种关系并没有出现。然后，我们计算了各支声子对电阻的贡献。我们发现，对于两种材料，都是由垂直于材料平面的三支声子模式(ZA,ZO1,ZO2)对电阻率的影响占主导地位。我们进一步计算了费米面附近各电子态对本征电阻率的贡献。结果显示， β_{12} 型石墨烯的电阻率主要由带间散射贡献，而 χ_3 型硼烯在低温下主要受倒逆散射 (U 过程) 的影响。这两种过程都超出了 B-G 理论的假设，因此我们得出结论，B-G 理论并不适用于描述硼烯的这两种同素异形体。

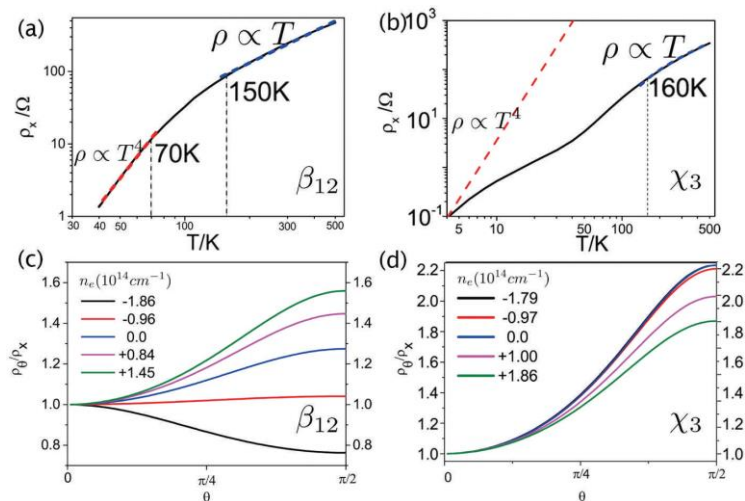


图 1 硼烯本征电阻率随温度的变化以及各向异性随掺杂浓度的变化

关键词：硼烯 电子-声子相互作用 第一性原理 本征电阻率 Bloch-Grüneisen 理论

【1】 Z. Liu, M. Zhu, and Y. Zheng, First-principles calculations on the intrinsic resistivity of borophene:

anisotropy and temperature dependence. Journal of Materials Chemistry C, 2019, 7(4), 986.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11774123) 等

Andreev reflection and $0-\pi$ transition in graphene-based antiferromagnetic superconducting junctions

周兴飞

南京邮电大学理学院, 南京市亚东新城区文苑路9号 邮编: 210023

Email: zxf@njupt.edu.cn

We investigate the Andreev reflection and $0-\pi$ transition in the graphene-based antiferromagnetic superconducting junctions on the SiC substrate, respectively. The differential conductance of Andreev reflection is reduced in the presence of a gap induced by the antiferromagnet or the substrate. Interestingly, although the gap induced by the antiferromagnet is the same to the one induced by the substrate, their differential conductances of the Andreev reflection are absolutely different, which can be used to detect antiferromagnetism in experiment. Although the interaction between the antiferromagnet and the substrate cannot show special differential conductance, their interaction can bring the $0-\pi$ transition. This breaks up the conventional wisdom that the antiferromagnetism-induced $0-\pi$ transition shows a rigorous atomic-scale dependence on the interlayer thickness. Furthermore, compared with the conventional atomic-scale dependent $0-\pi$ transition, our finding can be realized more easily in the experiment.

关键词 : Andreev reflection, $0-\pi$ transition, graphene

参考文献

- 【1】 X. Zhou and G. Jin, Phys. Rev. B 94, 165436 (2016).
- 【2】 X. Zhou and G. Jin, Phys. Rev. B 95, 195419 (2017)

基金项目 : 国家自然科学基金项目 (Nos. 11747019, 11804167, 11804291, 61874057)

少层黑磷的红外光谱学研究

张国伟¹、晏湖根²

¹西北工业大学柔性电子研究院，西安 710072

²复旦大学物理学系，上海 200433

Email: jamgwzhang@nwpu.edu.cn

摘要：黑磷是近年来备受关注的二维半导体材料，具有可调的直接带隙和独特的面内各向异性。当黑磷从体材料减薄至单层时，带隙从 0.3 eV 一直增大到~2.0 eV，覆盖了从可见光至中红外的光谱范围，正好填补了石墨烯（零带隙）和过渡金属硫化物（可见光/近红外带隙）之间的空白，在红外探测器、红外发光器件等领域具有广泛的应用前景。

课题组采用机械剥离法制备出高质量的少层黑磷样品，并对其进行红外光谱学表征，系统地研究了黑磷的能带结构随着层数的演化规律（图 1a），并且成功实现能带的应力调控（图 1b）。由于层间相互作用及量子束缚效应，在少层黑磷中，价带和导带发生劈裂，产生一系列子能带，光谱学表征结果可以很好地反映这一量子化的现象。除了最低能级之间的跃迁（ E_{11} ），还可以观察到高能级之间的跃迁（ E_{22} , E_{33} , E_{44} , ...）。随着层数的增加，带隙减小，而且子能级之间的间隔也越来越小，在体材料中演化为准连续的能带。此外，黑磷对光的吸收也表现出强烈的偏振依赖特性。

课题组通过施加单轴/双轴应力来调控黑磷的能带结构。以 6 层黑磷为例，1% 的单轴应力可以使其带隙变化~20%，这一结果预示着黑磷在应力传感领域有着广阔的应用前景。该系列工作揭示了黑磷在红外波段的巨大应用潜能。

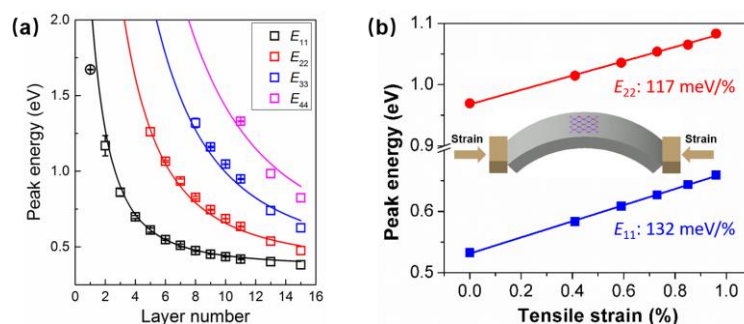


图 1 黑磷的能带结构的演化 (a) 及应力调控 (b)

关键词：黑磷，傅里叶变换红外光谱，能带结构，应力调控

参考文献

- 【1】 G. Zhang *et al.*, Infrared fingerprints of few-layer black phosphorus, *Nature Communications* 2017, 8, 14071.
- 【2】 G. Zhang *et al.*, Determination of layer-dependent exciton binding energies in few-layer black phosphorus, *Science Advances* 2018, 4, eaap9977.
- 【3】 S. Huang *et al.*, Strain-tunable van der Waals interactions in few-layer black phosphorus, *Nature Communications* 2019, 10, 2447.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11804398)

低缺陷密度单层钼基硫族半导体的VLS快速生长

王文峰, 周冬, 王君, 舒海波*

中国计量大学光学与电子科技学院, 浙江杭州, 310018

*舒海波 教授 Email: shuhaibo@cjlu.edu.cn

以二硫化钼(MoS_2)和二硒化钼(MoSe_2)为代表的二维过渡金属硫属化合物因为其独特的原子结构和优异的光电性质在纳米电子和光电子器件领域展现出巨大的应用潜力。实现这些二维材料大面积、高质量的生长是其在光电器件应用上的关键问题之一^[1]。然而, 由于缺少这些材料生长机制的深层次理解, 目前对于实现单层二维过渡金属硫属化合物的可控生长仍面临着巨大的挑战。本文以二硒化钼作为例子, 通过基于气-液-固(VLS)的熔盐辅助CVD方法实现了单层二硒化钼的超快生长。结合第一性原理计算和实验表征技术, 系统演绎了VLS生长的二硒化钼相较于传统VSS生长, 其生长速率提高了2~3个数量级。我们发现二硒化钼的超快生长起源于液态的过饱和种子颗粒的形成能够极大地提高成核速率。进而, 一维的VLS生长^[2]能够创造大量的kink位点, 这极大地促进了二硒化钼晶粒的快速生长。这些发现为我们理解二维过渡金属硫属化合物的CVD生长机制提供了新的思路, 并为实现二维过渡金属硫属化合物及其异质结的快速合成提供了新的机遇^[3]。

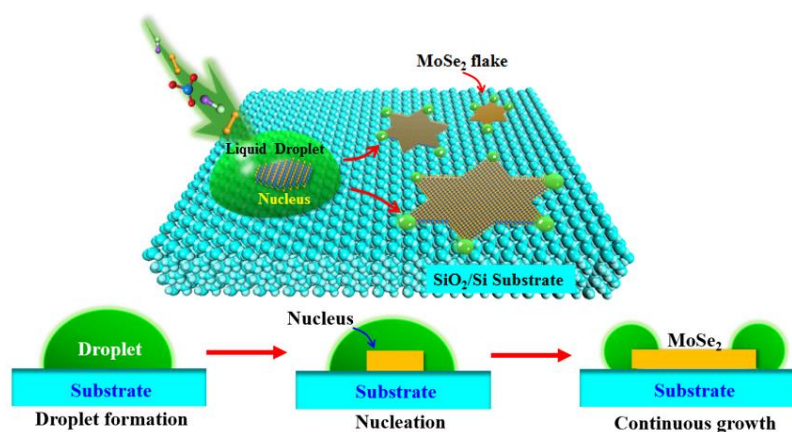


Fig. 1 单层二硒化钼的VLS生长示意图。

参考文献:

- [1] D. Zhou, H. Shu, C. Hu, L. Jiang, P. Liang, and X. Chen, *Crystal Growth Des.*, **18**, 1012 (2018).
- [2] S. Li, Y.-C. Lin, W. Zhao, et al. *Nat. Mater.*, **17**, 535 (2018).
- [3] W. Wang, H. Shu, D. Zhou, D. Cao, X. Chen, 2019, submitted.

二维超导材料 Mo_2C 的畴区结构对电荷运输的影响

刘震¹、徐川²、任文才²、康宁¹

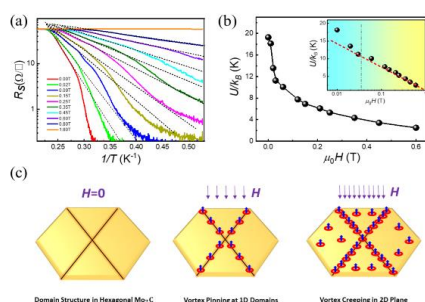
¹ 北京大学纳米器件物理与化学教育部重点实验室, 北京 100871

² 沈阳材料科学国家实验室, 中科院金属研究所, 沈阳 110016

Email: liuzhen2154@pku.edu.cn

摘要: 二维超导电性是凝聚态物理中的一个重要研究领域。一方面, 由于维度降低, 二维材料将会有别于体材料, 热涨落和量子涨落的影响变得更加明显, 从而有利于去研究材料的一些更本征的性质。另一方面, 低维超导材料中磁通动力学的研究也同样重要。由于磁通运动, 会对体系产生耗散, 从而产生电阻, 破坏超导态; 因此, 研究磁通动力学有助于我们认知超导电性逐渐湮灭的过程。然而, 之前关于二维超导电性的研究大多是基于无定型膜或粒状膜, 以及材料中存在一些本征的空位、缺陷或是晶界产生的磁通钉扎等, 都会影响本征的二维超导或磁通动力学的研究。所以目前对于高质量二维超导体中的磁通动力学的实验研究及其理解还有所不足; 此外, 关于二维超导向一维超导机制的转变研究还没有在同一个体系中实现过。

我们通过化学气相沉积法成功制备了高质量超薄的六方二维碳化钼材料^[1], 通过微纳加工的方法制备了标准的四端法器件, 并在综合物性测量系统中对其进行系统地低温输运研究。我们之前的研究^[2]证明, 六方碳化钼具有线型的畴区结构, 其电阻-温度曲线在临界温度下存在两步超导转变, 我们认为这两步转变分别对应于二维材料的超导转变和一维畴区的超导转变。为了使畴区对超导转变的影响更明显, 我们对尺寸更小的材料进行了研究^[3]。我们做了不同磁场下的降温测量, 利用热激发磁通蠕动模型提取了不同磁场下的激活能。激活能的磁场依赖证明, 六方碳化钼体系存在二维超导机制向一维超导机制的过渡。我们提取了二维六方碳化钼的相图, 在二维超导的相图中存在一维超导机制的区域。我们的结果给出了在二维高质量单晶超导体中的磁通动力学的研究, 同时也观察到超导维度机制的转变。



关键词: 二维超导 碳化钼 热激发磁通蠕动 畴区

参考文献

- 【1】 Xu C, et al, Large-area high-quality 2D ultrathin Mo_2C superconducting crystals. *Nat. Mater.* 2015, 14, 1135–41.
- 【2】 Liu Z B, et al, Unique Domain Structure of Two-Dimensional α - Mo_2C Superconducting Crystals. *Nano Lett.* 2016, 16, 4243–50.
- 【3】 Liu Z, et al, Effects of domain structures on vortex state of two-dimensional superconducting Mo_2C crystals *2D Mater.* 2019, 6, 021005.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 51325205 51290273 51521091 11374019)

Even-odd dependent optical transitions of zigzag monolayer black phosphorus nanoribbons

Pu Liu¹, Xianzhe Zhu¹, Xiaoying Zhou^{1*}, Benliang Zhou¹, Wenhui Liao²,
Guanghui Zhou^{1†}, and Kai Chang^{3‡}

¹Department of Physics, Key Laboratory for Low-Dimensional Structures and Quantum Manipulation (Ministry of Education) and Synergetic Innovation Center for Quantum Effects and Applications of Hunan, Hunan Normal University, Changsha 410081, China

²Department of Physics and Key Laboratory of Mineral Cleaner Production and Exploit of Green Functional Materials in Hunan Province, Jishou University, Jishou 416000, China

³SKLSM, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, P.O. Box 912, Beijing 100083, China

Email: xiaoyingzhou@hunnu.edu.cn

Abstract: We analytically study the electronic structure and optical properties of zigzag-edged black phosphorene nanoribbons (ZPNRs) utilizing the tight-binding (TB) Hamiltonian and Kubo formula. By solving the discrete Schrodinger equation directly, we obtain the energy spectra and wavefunctions for a N -ZPNR with N the number of transverse zigzag atomic chains, and classify the eigenstates according to the lattice symmetry. We then obtain the optical transition selection rule of ZPNRs based on the symmetry analysis and the analytical expressions of optical transition matrix elements. Under an incident light linearly-polarized along the ribbon, we find that the optical transition selection rule for the N -ZPNR with even- or odd- N is qualitatively different. In specification, for even- N ZPNRs the inter- (intra-) band selection rule is $\Delta n = \text{odd}$ (even), since the parity of the wavefunction corresponding to the n th subband in the conduction (valence) band is $(-1)^n$ [$(-1)^{n+1}$] due to the presence of the C_{2x} symmetry. In contrast, all optical transitions are possible among all subbands due to the absence of the C_{2x} symmetry. Our findings provide a further understanding on the electronic states and optical properties of ZPNRs, which are useful in the explanation of the optical experiment data on ZPNR samples.

Key words : ZPNRs, TB model, Linear response theory, Electronic structure, Optical transition selection rule

Ref:

Pu Liu, Xianzhe Zhu, Xiaoying Zhou, Benliang Zhou, Wenhui Liao, Guanghui Zhou, and Kai Chang,

arXiv:1903.03952.

Foundation: National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11804092, 11774085) and China Postdoctoral Science Foundation funded project (Grant No. BX20180097).

基于二维半导体黑磷的光电子和纳电子器件

李学飞、吴燕庆

华中科技大学国家脉冲强磁场科学中心，武汉 430074

Email: xfli@hust.edu.cn

摘要：

黑磷是一种单元素二维半导体材料，具备很高的载流子迁移率和可调控的直接带隙（0.3–2 eV）以及较大各向异性。因其众多特殊的电学和光学性能，自 2014 年被报道以来一直是低维材料领域的研究热点。然而迄今为止，实验上报道的黑磷晶体管的整体性能仍然低于预期。如何大幅提高基于二维半导体黑磷的光电子和纳电子器件的性能是目前该领域的主要挑战之一。

课题组团队通过优化并使用一种新型的铪镧氧(HfLaO)氧化物作为黑磷器件的栅介质，大幅提高了黑磷和栅介质的界面的质量并减少散射，从而实现了常温超过 $650 \mu\text{A}/\mu\text{m}$ ，20 K 低温 $1.1 \text{ mA}/\mu\text{m}$ 的高输出电流。与此同时，基于铪镧氧的黑磷光电探测器常温实现了超过 10^8 A/W 的超高光响应度和 10 微秒的快速响应时间，并在低温下实现 514 nm 到 1800 nm 的宽频谱响应。为了进一步提高器件的性能，在制备过程中，通过偏正拉曼确定黑磷材料的各向异性晶格方向，然后设计载流子输运方向沿着迁移率最大的扶手椅 (armchair) 方向，对于沟长为 100 nm 的黑磷晶体管，其室温驱动电流达到 $1.2 \text{ mA}/\mu\text{m}$ ，20 K 时进一步提高到 $1.6 \text{ mA}/\mu\text{m}$ 。通过 MIT Virtual Source 模型提取了黑磷晶体管的弹道率，室温下 100 nm 的黑磷晶体管的弹道率达到 36%，高于同等参数下硅基 MOS 器件。在低温 20 K 时，弹道率提高到了 79.4%。

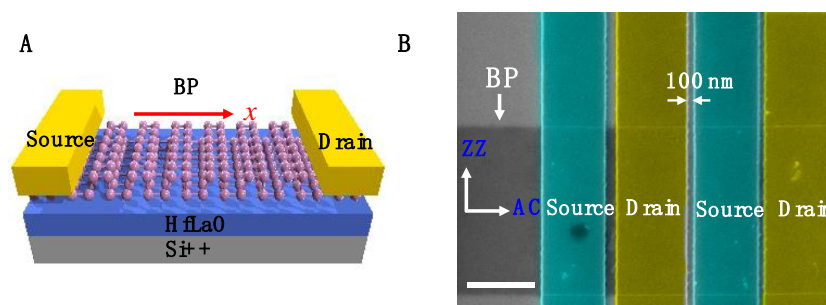


图 1 弹道运输的黑磷晶体管示意图和 SEM 照片

关键词：黑磷 场效应晶体管 弹道运输 迁移率 短沟道

[1] X. Li, *et al.*, High-speed black phosphorus field-effect transistors approaching ballistic limit. *Sci. Adv.* 5, eaau3194 (2019).

[2] X. Xiong, *et al.*, High Performance Black Phosphorus Electronic and Photonic Devices with HfLaO Dielectric. *IEEE Electron Device Lett.*, 39, 127-130 (2018)

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 61574066, 61874162, and 61522402) 等

PdSe₂/Perovskite Schottky Junction for Fast, Self-Powered, Polarization-Sensitive, Broadband Photodetectors and Image Sensor Application

Long Hui Zeng, Yuen Hong Tsang*

Department of Applied Physics, The Hong Kong Polytechnic University, Hung Hom, Kowloon, Hong Kong, China

Email: yuen.tsang@polyu.edu.hk

Abstract: Group-10 transition metal dichalcogenides (TMDs) with distinct optical and tunable electrical properties have exhibited great potential for various optoelectronic applications. Herein, we have developed a self-powered photodetector with broadband response ranging from deep ultraviolet to near-infrared by combining FA_{1-x}Cs_xPbI₃ perovskite with PdSe₂ layer, a newly discovered TMDs material. Optoelectronic characterization reveals that the as-assembled PdSe₂/perovskite Schottky junction is sensitive to light illumination ranging from 200 to 1550 nm, with the highest sensitivity centered at ~ 800 nm. What's more, the present device shows a large on/off ratio of ~10⁴, a high responsivity (*R*) of 313 mA/W, a decent specific detectivity (*D*^{*}) of ~10¹³ Jones, and a rapid response speed of 3.5/4 μs. These figures of merit are comparable with or much better than most of the previously reported perovskite detectors. In addition, the PdSe₂/perovskite device exhibits obvious sensitivity to polarized light, with a polarization sensitivity of 6.04. Lastly, the PdSe₂/perovskite detector can readily record five “P”, “O”, “L”, “Y” and “U” images sequentially produced by 808 nm. These results suggest that the present PdSe₂/perovskite Schottky junction photodetectors may be useful for assembly of optoelectronic system applications in near future.

Keywords: Palladium diselenide, Perovskite, Polarization-sensitive, Photodetectors, Image sensors

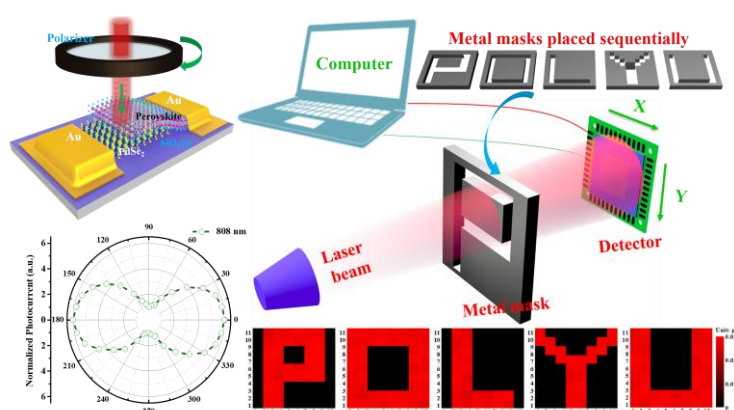


Figure 1. Highly Polarization-sensitive Photodetector based on PdSe₂/perovskite and its image sensor application

[1] L. H. Zeng *et al.*, PdSe₂/Perovskite Schottky Junction for Fast, Self-Powered, Polarization-Sensitive, Broadband Photodetectors and Image Sensor Application, *Adv. Sci.* 2019, DOI: 10.1002/adv.201901134.

Acknowledgement: Research Grants Council of Hong Kong (Project Number: GRF 152093/18E PolyU B-Q65N), PolyU grants (1-ZVGH), and National Natural Science Foundation of China (Nos. 61605174).

Boron-based nanostructures and the electro-optical performances

Junqi Xu*

Department of Physics and Electronic Engineering, Xinyang Normal University, Xinyang 464000,
PR China

* Corresponding author: phxujunqi@126.com

Boron-based nanomaterials trigger enormous interests from both scientific and technological angles of view because of its unique chemical and physical properties, which ensure its wide applications in high-temperature devices, high-energy fuel, nuclear engineering, coatings, and field emission (FE). Herein, we report the background, systematic synthesis and electro-optical performances of boron-based nanostructures. Field-emission measurements at RT show that the boron-based nanostructures possess good field-emission characteristics, with a low turn-on electric field, a low threshold electric field, a high current and a good stability. Temperature-dependent field emission investigation reveals that the significant reduction of the turn-on and threshold fields, and the remarkable increase of emission current to a decrease of effective work function with temperature resulting from the a absorption/desorption effect under heating. In addition, the photodetector device fabricated from single-crystalline UBNS demonstrates good sensitivity, reliable stability, and fast response, obviously superior to other reported boron nanomaterials. Superior electronic-optical performances suggest the potential applications of the boron-based nanomaterials in field-emitters, interconnects, integrated circuits, and optoelectronic devices.

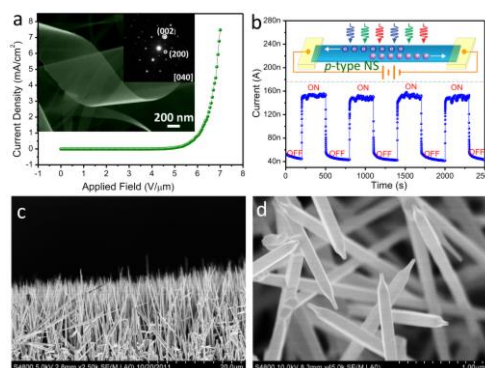


Figure 1. (a) the FE performances of the UBNSs; (b) the photodetectors of the UBNSs; (c) the vertical LaB₆ nanowire arrays; (d) the LaB₆ nanoneedles.

References

1. J. Q. Xu, T. Y. Zhai, et al, *Adv. Funct. Mater.* 2013, **23**, 5038.
2. J. Q. Xu, T. Y. Zhai, et al, *NPG Asia. Mater.* 2013, **5**, e53.
3. J. Q. Xu, T. Y. Zhai, et al, *Adv. Sci.* 2015, **2**, 1500023.
4. C. Fu, J. Q. Xu et al, *J Alloys compd.* 2013, **729**, 997.

二维六方氮化硼中局域应变的红外纳米成像

吕博赛、李宏元、单婉斐、罗卫东、史志文

上海交通大学物理与天文学院，上海 200240

Email: bslyu23@sjtu.edu.cn

摘要：应变一直以来在凝聚态物理和材料科学中都扮演着非常重要的角色。应变被视为一种可以调控材料性质的参量，它不仅可以用来调控材料的机械性能，电子结构以及光学性质，甚至可以引发材料中的结构相变。在二维材料体系中，应变则会变得更加有意思。一来是因为二维材料可以承受非常大的应变；在这种极端的应变下，材料可能表现出更多奇特的特性。二来应变还可能存在于在二维材料中的很多新奇结构中，比如一些在三维材料中不存在的纳米气泡，褶皱等等。在此之前，研究人员已经在这些新奇结构中发现了许多有意思的现象，比如带隙的局域调控，pseudomagnetic field 的产生，拓扑能谷输运等等。如果要深入研究这些新奇的现象，首先就要得到纳米尺度的应变分布信息。然而一直以来对局域应变的原位无损纳米成像问题都没能得到很好的解决。我们利用一种近场光学技术，扫描近场光学显微镜技术（SNOM）实现了对原子级厚度的六方氮化硼中局域应变的纳米尺度红外成像。同时我们还发现这种应变探测技术具有极高的空间分辨率（~20 nm）和探测灵敏度。这种探测技术使得研究二维材料中各种新奇的局域应变结构以及应变相关的物理现象成为可能。除此之外，这项研究还提供了局域应变导致的 phonon polariton 反射的实验证据，为纳米光子学器件中实现深度亚波长尺度光调控提供了一种新的手段。

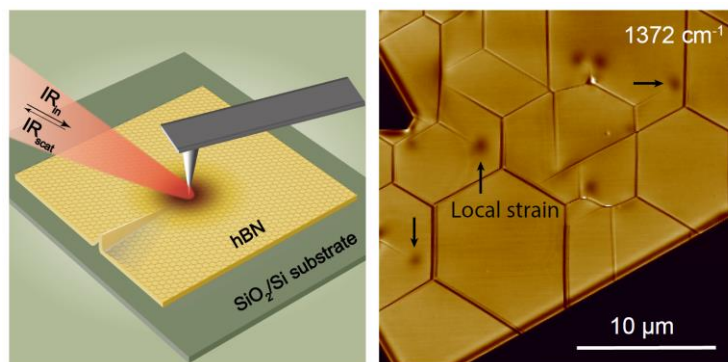


图 1 利用 SNOM 进行局域应变成像的实验示意图和一块氮化硼样品的近场红外图，其中局域应变的区域与周围区域具有显著的衬度差异。

关键词：局域应变 二维材料 红外纳米显微镜 声子极化激元

参考文献

- 【1】 Bosai Lyu *et al.*, Phonon Polariton-assisted Infrared Nanoimaging of Local Strain in Hexagonal Boron Nitride, *Nano Lett.* 19(3), 1982-1989(2019).

基金项目：科技部重点研发计划(2016YFA0302001)、国家自然科学基金(11574204, 11774224)等

基于三维结构的高速碳纳米管集成电路

谢雨农, 张志勇*, 仲东来, 彭练矛*

北京大学前沿交叉学科研究院, 北京, 100871

*Email: yunongxie@pku.edu.cn

在过去的几十年中, 集成电路的发展主要依赖于互补场效应晶体管 (CMOS) 的尺寸缩减。然而由于急剧增加的制造成本和功耗问题, 这种发展模式已经走到了瓶颈[1]。在三维 (3D) 集成电路 (IC) 中, 通过将多个晶体管层堆叠在一个芯片中, 可以增加晶体管的密度, 在不缩减晶体管尺寸的情况下也能提升电路性能, 因此吸引了广泛的关注[2]。碳纳米管场效应晶体管 (CNTFET) 是构筑未来集成电路的潜在模块之一, 由于其低温加工工艺和低功耗的特点[3], 对于构建三维集成电路具有很大的吸引力。然而, 在以往报道中, 基于碳管的三维电路的性能通常比单层碳管电路低, 缺乏高性能的碳管三维电路的展示。在这项工作中, 我们通过将多层高性能碳管薄膜晶体管集成到一个芯片中, 发展了三维集成电路技术, 结果表明其能大大提高碳管三维电路的工作速度。我们还探索了三维电路架构的优势, 其速度能比平面结构提高38%。特别地, 我们展示了三维五阶环振电路的工作结果, 其振荡频率高达680 MHz, 单级门延时为0.15 ns, 该结果代表了基于碳管的三维电路的最高工作速度。

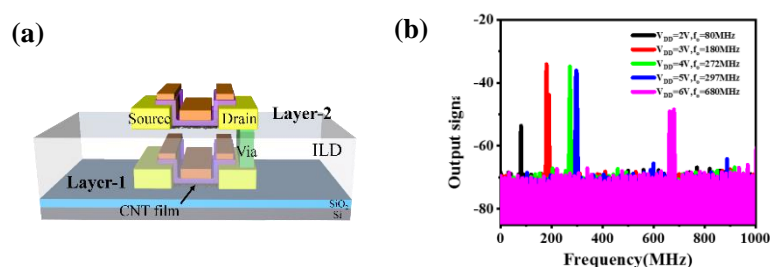


Fig. 1 (a)碳管三维集成电路示意图。(b)典型的碳管三维环振的输出频谱, 电源电压在2V至6V之间变化。

关键词: 碳纳米管 纳米电子学 场效应晶体管 3D集成电路 环振

参考文献:

- 【1】 Frank, D. J.; Dennard, R. H.; Nowak, E.; Solomon, P. M.; Taur, Y. and Wong, H.-S. P. Device scaling limits of Si MOSFETs and their application dependencies. Proceedings of the IEEE 2001, 89, 259-288..
- 【2】 Topol, W.; Tulipe, D. C. L.; Shi, L.; Frank, D. J.; Bernstein, K.; Steen, S. E.; Kumar, A.; Singco, G. U.; Young, A. M.; Guarini, K. W. and Jeong, M. Three-dimensional integrated circuits. IBM Journal of Research and Development 2006, 50, 491-506.
- 【2】 Qiu, C.; Zhang, Z.; Xiao, M.; Yang, Y.; Zhong, D. and Peng, L.-M. Scaling carbon nanotube complementary transistors to 5-nm gate lengths. Science 2017, 355, 271-276.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (Nos. 61621061, 61427901, 61888102), 国家重点研发计划 (No. 2016YFA0201901), 北京市科学技术委员会 (No. D171100006617002 1-2)

化学机械法制备 Mn 掺杂 CsPbCl₃ 量子点及其 LED 器件应用

成佳宁, 李亚南, 杜伟杰, 张毅闻

上海师范大学数理学院, 上海 200235

Email: zhang_yw@shnu.edu.cn

摘要: 铅卤族钙钛矿量子点具有优异的光电性能, 如电子空穴迁移率高、光吸收系数高 (10^4 cm^{-1}), 被认为是发光二极管 (LED) 的理想材料。近年来, 通过掺杂其他元素来取代 Pb 从而提高材料的稳定性并减少环境负担成为铅卤族钙钛矿量子点研究的一个热点。例如, Mn 掺杂 CsPbCl₃ 量子点由于引入了 Mn 发光能级, 能够显著地提高量子点的发光效率并改善其稳定性。热注入法和离子交换法是目前制备掺杂量子点的主要方法。但是这些方法制备过程复杂、对制备环境氛围的要求高。

本研究利用化学机械法制备了高结晶质量、立方体结构的 Mn 掺杂 CsPbCl₃ 量子点。通过在 GaN 基板上涂覆量子点, 制备了 LED 器件。相比较热注入法和离子交换法, 化学机械法具有工艺简单、容易控制量子点中 Mn 掺杂比例的优点。随着 Mn 掺杂比例增加, LED 器件呈现出紫色、暖白色、橙色的变化。在 Mn 掺杂比例达到 10% 时, LED 器件的发光亮度达到 13.8 lmW^{-1} , 对比无掺杂量子点的 2.6 lmW^{-1} , 显著提高了发光效率。这一研究为制备不同元素掺杂的无机钙钛矿量子点发光器件提供了一种新的思路。

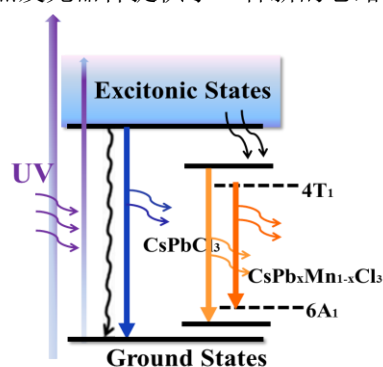


图 1 Mn 离子掺杂 CsPbCl₃ 量子点的发光机理

关键词: 无机钙钛矿 化学机械法 量子点 LED

参考文献

- 【1】 Z. Y. Zhu *et al.*, Solvent-Free Mechanochemical Synthesis of Composition-Tunable Cesium Lead Halide Perovskite Quantum Dots, *J. Phys. Chem. Lett.* 2017, 8, 1610.
- 【2】 H. Wu *et al.*, Single Component Mn-Doped Perovskite-Related CsPb₂Cl_xBr_{5-x} Nanoplatelets with a Record White Light Quantum Yield of 49%: A New Single Layer Color Conversion Material for Light-Emitting Diodes, *Nanoscale*, 2017, 9, 16858.

基金项目: 上海市科委项目 (No.18070502800), 国家自然科学基金项目 (No. 61704108)

二维纳米结构的制备及其在钙钛矿发光器件中的应用

李亚南、成佳宁、杜伟杰、张毅闻

上海师范大学数理学院, 上海 200235

Email: zhang_yw@shnu.edu.cn

摘要：有机金属卤化物钙钛矿材料由于其缺陷密度低，载流子扩散长度长，具有成为下一代发光材料的潜力。利用这种材料制备电致发光二极管(LED)成为近来的研究热点。目前通过控制钙钛矿材料的薄膜形貌和化学成分，以及调节各层之间的界面能级，能够有效地减少材料缺陷和抑制激子淬灭，使得基于该材料的LED的内部量子效率几乎达到了100%。但是，器件较低的外量子效率限制了其广泛应用。

本课题组利用软纳米压印技术在钙钛矿LED器件中制备二维纳米结构的空穴传输层。通过二维纳米结构减少空穴传输层和钙钛矿材料层之间的折射率突变，增强光在界面处的耦合，从而提高LED器件的光取出效率。时域有限差分法(FDTD)的仿真计算结果表明，二维纳米结构的引入对发光层和空穴传输层界面之间突变折射率进行了修饰，提高了近场辐射。加入该结构的LED亮度达到 12792 cd/m^2 ，和平面结构相比外量子效率提高了25%。实验和仿真的结果表明在钙钛矿LED器件中引入二维纳米结构可以有效地增强在发光层中的光的耦合，提高器件的发光效率。

关键词：二维纳米结构 钙钛矿发光二极管 光取出增强

- 【1】 H. Cho *et al.*, Overcoming the electroluminescence efficiency limitations of perovskite light-emitting diodes. *Science* 2015, 350(6265), 1222-1225
- 【2】 S. Yang *et al.*, High-efficiency perovskite light-emitting diodes with synergetic outcoupling enhancement, *Adv. Mater.* 2019, 31(24), 1901517.

基金项目：上海市科委项目 (No.18070502800), 国家自然科学基金项目 (No. 61704108)。

3D self-branched zinc-cobalt oxide@N-doped carbon hollow nanowall arrays for high-performance asymmetric supercapacitors and oxygen electrocatalysis

Dezhi Kong^{1,2}, Ye Wang^{1,2}, Hui Ying Yang^{1,*}

¹ Pillar of Engineering Product Development, Singapore University of Technology and Design, Singapore, 487372; ² Department of Physics and Engineering, Zhengzhou University, 450052

Email: edzkong@163.com

Abstract:

This study reports the design and fabrication of ultrathin zinc-cobalt oxide nanoflakes@N-doped carbon hollow nanowall arrays (ZnCo₂O₄@NC NWAs) from vertically aligned 2D Co-MOF solid nanowall arrays by controllable cation ion-exchange and post annealing strategies. The unique 3D self-branched nanostructure anchored on flexible carbon textiles (CTs) can offer short ion diffusion length, fast and continuous electron transport pathway, and abundant reaction active sites. More importantly, the rational incorporation of Zn²⁺ generates hollow structure as well as reduces the intrinsic band gap, which further enhance the ion transportation efficiency and electronic conductivity. The above superiorities endow the 3D self-branched ZnCo₂O₄@NC/CTs electrodes with remarkable performances in terms of flexible asymmetric supercapacitor and oxygen electrocatalysis. When evaluated as a flexible cathode for asymmetric supercapacitor, the as-fabricated ZnCo₂O₄@NC/CTs electrode exhibits outstanding electrochemical performance with a wide work voltage up to 2.0 V, high areal energy density of 0.278 mWh cm⁻² (or volumetric energy density of 2.32 mWh cm⁻³) and long-term cycling stability (~85.89% capacitance retention over 6000 cycles). Additionally, the ZnCo₂O₄@NC/CTs electrode shows excellent oxygen evolution reaction (OER) performance with a small overpotential of 196.4 mV at 10 mA cm⁻² and long-term durability (over 45h). This work provides a rational design strategy for controllable synthesis of 3D self-branched hollow nanostructure on flexible substrate for energy storage and conversion applications.

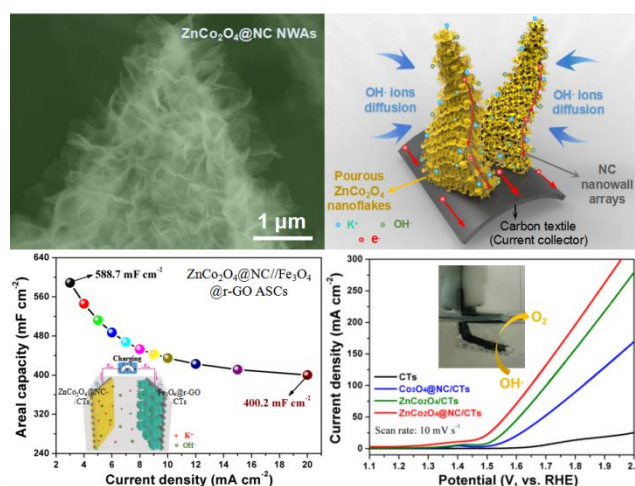


Figure 1. 3D self-branched ZnCo₂O₄@NC/CTs electrode materials for both flexible asymmetric supercapacitors and oxygen electrocatalysis.

Keywords: ZnCo₂O₄ nanoflakes, N-doped carbon, Metal-organic framework, asymmetric supercapacitor, oxygen electrocatalysis

Acknowledgements: This work is supported by SUTD Digital Manufacturing and Design (DManD) Centre and SUTD-MIT International Design Centre (IDC).

二维过渡金属硫属化合物（TMDs）的发光性质调控

刘为振*, 徐海阳, 刘益春

东北师范大学 紫外光发射材料与技术教育部重点实验室, 长春 130024

Email: liuwz@nenu.edu.cn

摘要：二维过渡金属硫属化合物（TMDs）作为二维材料的典型代表，具有大的激子束缚能^[1]，自旋-能谷耦合以及强的非线性光学响应等优良特性，使其在光电子器件领域中具有可观的应用潜力。然而，二维 TMDs 较低的量子效率限制了实际的应用，其主要原因包括两个方面：（1）TMDs 中存在高的缺陷浓度能够诱导大量的非辐射复合；（2）单层 TMDs 具有较低的光子吸收能力。因此，想要提升 TMDs 量子效率首先就需要深刻理解其内部非辐射复合中载流子的行为，有效减少非辐射复合路径并提升其光子吸收能力。首先，我们借助于飞秒瞬态吸收技术在多层硒化钨体系观测到了超快的缺陷辅助俄歇过程，并定量的给出俄歇复合速率： $6.69(\pm 0.05) \times 10^{-2}$ 和 $1.22(\pm 0.04) \times 10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ 。^[2]随后对单层二硫化钼中的高能非荧光活性的 C 激子进行了研究，并发现其弛豫时间尺度并没有之前文献报道的亚皮秒范围，而是存在两个不同的弛豫时间尺度（几皮秒和几十皮秒）。基于瞬态吸收光谱，我们证实了这个缓慢的 C 激子弛豫过程是由于热载流子能谷间载流子转移所限制的而不是来自带边激子因此的泡力阻塞效应，并定量得到能谷间载流子转移的时间尺度： $5.1 \pm 0.6 \text{ ps}$ 和 $69.5 \pm 8.4 \text{ ps}$ 。基于对非辐射过程充分理解，我们在单层二硫化钼体系中提出了——热离化效应控制低复合效率的带电激子的浓度，并且得在 450K 下到~4 倍的荧光增强（相比室温）。^[3]此外，我们又借助原子层沉积技术（ALD）在硫化钼表面沉积生长氧化铝薄膜，通过改变硫化钼与空气的接触来控制空气对硫化钼 p 型“掺杂”效应。^[4]这个方法能够有效控制硫化钼内带电载流子数目，实现中性激子数目和其发光强度的调控。对于如何提升单层 TMDs 光子吸收能力，我们设想借助热膨胀去层间耦合效应实现——多层的间接带隙半导体到直接带隙半导体的能带转变。在多层硫化钼中，我们的确获得了~6.5 倍高温荧光增强（640K）。^[5]但是基于理论计算和实验结果，我们证明这个高温增强的现象并不源于热诱导层间去耦合效应，而是来自热驱动的能谷间载流子转移（从 Λ/Γ 点到 K 点）。此外，我们在多层二硫化钨中也证实了谷间载流子现象并获得~300 倍高温荧光增强（740K）。^[6]我们的结果不但为 TMDs 载流子动力学行为提供了更深层次的理解，而且实现了其荧光强度的提升，为 TMDs 在未来应用的进程中提供了有价值的研究思路和帮助。^[7, 8]

关键词：二维过渡金属硫化合物、载流子动力学、荧光增强、带电激子、能谷间载流子转移。

参考文献

- 【1】 Y. Li, X. Li, T. Yu, G. Yang, H. Chen, C. Zhang, Q. Feng, J. Ma, W. Liu*, H. Xu, *Nanotechnology* 2018, 29, 124001.
- 【2】 Y. Li, J. Shi, H. Chen, R. Wang, Y. Mi, C. Zhang, W. Du, S. Zhang, Z. Liu, Q. Zhang, X. Qiu, H. Xu, W. Liu*, Y. Liu, X. Liu, *Nanoscale* 2018, 10, 17585.
- 【3】 Y. Li, W. Liu*, H. Xu, C. Zhang, L. Yang, W. Yue, Y. Liu, *J. Mater. Chem. C* 2016, 4, 9187.
- 【4】 Y. Li, X. Li, H. Chen, J. Shi, Q. Shang, S. Zhang, X. Qiu, Z. Liu, Q. Zhang, H. Xu, W. Liu*, X. Liu, Y. Liu, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2017, 9, 27402.
- 【5】 Y. Li, H. Xu, W. Liu*, G. Yang, J. Shi, Z. Liu, X. Liu, Z. Wang, Q. Tang, Y. Liu, *Small* 2017, 13, 1700157.
- 【6】 H. Chen, Y. Li, W. Liu*, H. Xu, G. Yang, J. Shi, Q. Feng, T. Yu, X. Liu, Y. Liu, *Nanoscale Horiz.* 2018, 3, 598.
- 【7】 Li Y. Z., Shi J., Chen H. Y., Mi Y., Du W., Sui X., Jiang C., Liu W. Z.*, Xu H. Y., Liu X., *Laser Photonics Rev.*, 2019, 13(4), 1800270, DOI: 10.1002/lpor.201800270
- 【8】 Feng Q. S., Shi J., Yang W., Zhong W., Li Y., Chen H., Liu W. Z.*, Xu H. Y., Liu X., Liu Y. C., *Nanoscale*, 2019, 11: 6544-6551

Spin-valley filter and tunnel magnetoresistance in asymmetrical silicene magnetic tunnel junctions

Dali Wang (王大理)^{1,2}, Guojun Jin (金国钧)²

¹Department of Physics and Center for Nano Science and Technology, Anhui Normal University, Wuhu, 241000, China

²National Laboratory of Solid State Microstructures, Department of Physics, and Collaborative Innovation Center of Advanced Microstructures, Nanjing University, Nanjing, 210093, China

Email: wangdali@ahnu.edu.cn

Abstract : Transports of massive Dirac fermions in silicene display many novel behaviors different from those in graphene, including particularly spin and valley transports. The charge transport of silicene nanoribbons and spin transport in a bulk silicene junction have been investigated. The charge transport properties in silicene-based *pn* and *npn* junctions have been analyzed. The spin and valley transports in normal/ferromagnetic/normal (N/F/N) silicene junctions have also been explored.

In this work, the spin and valley transports and tunnel magnetoresistance are studied in a silicene-based asymmetrical magnetic tunnel junction consisting of a ferromagnetic tunnel barrier, sandwiched between a ferromagnetic electrode and a normal electrode. For such an asymmetrical silicene junction, a general formulism is established. The numerical results show that the spin-valley resolved conductances strongly depend on the magnetization orientation of the ferromagnetic tunnel barrier, and the fully spin-valley polarized current can be realized by tuning a perpendicularly applied electric field. We also find that the tunnel magnetoresistance in this case can be effectively modified by the external electric field when the conductance is fully spin-valley polarized. In particular, the exchange field in the ferromagnetic electrode can further substantially enhance the tunnel magnetoresistance of the system. Our work provides a practical method for electric and magnetic manipulation of valley/spin polarization and tunnel magnetoresistance.

Keywords : spin-valley filter, tunnel magnetoresistance, silicene, asymmetrical magnetic tunnel junctions

References:

- [1] X. Zhai *et. al*, Valley-locked thermospin effect in silicene and germanene with asymmetric magnetic field induced by ferromagnetic proximity effect, *Phys. Rev. B*, 2018, 97, 085410.
- [2] B. Rzeszutarski and B. Szafran, Electron spin inversion in gated silicene nanoribbons, *Phys. Rev. B*, 2018, 93, 195425.

基金项目 : 国家自然科学基金项目 (NO. 11047019, NO. 11774002, and NO. 2015CB921202)

制备基于双金属氢氧化物的大尺寸水驱动摩擦纳米发电机

崔鹏、程纲、杜祖亮

河南大学 特种功能材料重点实验室, 材料学院 开封 475004

Email: cuipeg@henu.edu.cn

摘要 :能够从水滴中收集能量的高性能水驱动摩擦纳米发电机对能量转换机制的基础研究和实际应用都很重要。目前报道的水驱动摩擦纳米发电机主要基于合成聚合物薄膜,大多同时难以同时实现超低表面能和大规模制造。在这里,我们展示了一种自下而上的策略,通过化学水浴生长垂直于金属基底的层状双金属氢氧化物纳米片层,通过进一步化学改性,可以提供几乎“无摩擦”的表面,以获得更好的能量采集效率。此工作利用了便捷原位生长的层状双金属氢氧化物作为摩擦层和金属基底作为电极,制备了水驱动的摩擦纳米发电机。此外,工作中通过有限元模拟了利用水滴摩擦发电的机制。这种方法可以很容易地按制备大尺寸的水驱动摩擦纳米发电机,此工作中成功展示了长达一米器件的制备。对于目前的水驱动摩擦纳米发电机和基于水驱动摩擦纳米发电机的自驱动传感器的制备工艺,这个制备水驱动摩擦纳米发电机的新方法提供了一个有意义和潜力的新思路。

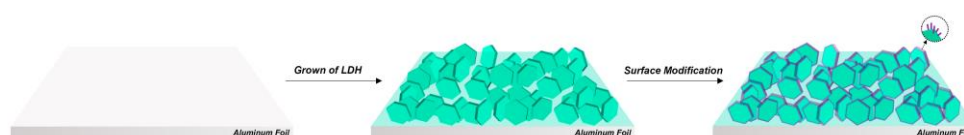


图 1 基于 LDH 的水驱动摩擦纳米发电机的制备过程

关键词 : 摩擦纳米发电机, 蓝色能源, 自驱动系统, 超疏水, 固液界面。

基金项目 : 国家自然科学基金项目 (61522405)

金属纳米颗粒和二硫化钼界面的局域应力和结构演化

孙颖慧, Yan Aung Moe, 赵豪飞, 许应瑛, 朱玉辰, 叶欢宇, 王荣明*

北京科技大学磁光电复合材料与界面科学北京市重点实验室、

北京科技大学数理学院应用物理系

yhsun@ustb.edu.cn; rmwang@ustb.edu.cn

金属/二维半导体界面的形貌和结构稳定性强烈地影响二维电子器件的输运性质和协同催化性能。然而,界面的结构演化还没有很好地探索,特别是在原子分辨率下。我们在此工作中,利用高分辨透射电子显微镜和定量的高角度环形暗场扫描透射电子显微技术研究了被广泛使用的电极材料金在典型的二维半导体材料二硫化钼少层上的演化过程。我们观察到金从纳米颗粒到枝晶的转变,这揭示了金和二硫化钼晶格之间的动态外延排列。这种外延取向可以在常温常压条件下发生,并且也可以通过高能电子束的辐照来加速实现。原位透射电子显微镜观察表明,金原子在二硫化钼上的迁移和相邻金纳米颗粒之间的聚结,可能是导致树枝晶结构形成的原因。扫描透射电子显微技术可以观察到金原子在二硫化钼上形成的原子通道。最终,金的枝晶结构沿二硫化钼的晶格取向,形成了莫尔条纹。我们的发现为研究金的长程排列后在界面上形成的枝晶提供了重要的证据,有望改善电子或催化中的载流子输运或转移过程。

参考文献:

- (1) **Yinghui Sun**, Haofei Zhao, Dan Zhou, Yuchen Zhu, Huanyu Ye, Yan Aung Moe, Rongming Wang*, Direct observation of epitaxial alignment of Au on MoS₂ at atomic resolution, Nano Research, 2019, 12: 947-954.
- (2) Yan Aung Moe[#], **Yinghui Sun**[#], Huanyu Ye, Kai Liu, Rongming Wang*, Probing Evolution of Local Strain at MoS₂-metal Boundaries by Surface-enhanced Raman scattering, ACS Applied Materials & Interfaces, 2018, 10: 40246-40254
- (3) **Yinghui Sun**, Rongming Wang, Kai Liu*, Substrate induced changes in atomically thin 2-dimensional semiconductors: Fundamentals, engineering, and applications, Applied Physics Reviews, 2017, 4: 011301
- (4) **Yinghui Sun**^{#,*}, Kai Liu[#], Xiaoping Hong, Michelle Chen, Jonghwan Kim, Sufei Shi, Junqiao Wu, Alex Zettl, Feng Wang*, Probing local strain at MX₂-metal boundaries with surface plasmon enhanced Raman scattering, Nano Letters, 2014, 14: 5329-5334

F-P067

专题代号 : F

Modulation of the universal conductance fluctuations by broken time-reversal symmetry in topological insulator

张帅, 宋凤麒

南京大学物理学院, 南京 210008

Email: szhang@nju.edu.cn

摘要 : Symmetry is one of the most elementary physical features of electronic states. Ever since the discovery of topological insulators (TIs), intense efforts have been made to show the properties of time-reversal-symmetry-protected TIs. Due to the substantial difficulty of close-tracking the electronic relativistic movement, the electronic transport is still an intriguing way to reveal this key element in the physics of three-dimensional TIs. The magnitude of the conductance fluctuation (CF) reveals the intrinsic symmetry of the electronic states. It is this universal conductance fluctuation (UCF) that is manifested in the repeatable fluctuation observed during the transport measurements. This can be described by the random matrix theory, where the symmetry of the electronic states can be transferred during the matrix operation and expressed in the root mean square magnitudes of the UCF.

In topological insulator BiSbTeSe₂ nanowire device, we extract the conductance fluctuations and study their magnetic field dependence in the gatedependent transport of topological electrons. With the magnetic field increasing, the conductance fluctuation magnitudes are found to reduce by a ratio of $\sqrt{2}$ and form a quantized step, and this is observed both in n-type and p-type transport. This is related to the breaking of the time reversal symmetry of three dimensional topological insulators, which reveal a crossover of the symmetry classes.

关键词 : topological insulator; universal conductance fluctuations ; time reversal symmetry

基金项目 : National Key R&D Program of China (Grant No. 2017YFA0303203), National Natural Science Foundation of China (Grant No. U1732273, No. 91622115, No. 11522432, No. 11674165, No. 11834006 and No. 11574217).