

二维材料激子效应的理论研究取得重要进展

近日，中国科大合肥微尺度物质科学国家实验室国际功能材料量子设计中心在二维材料激子效应的理论研究方面取得重要进展，研究人员利用GW-BSE方法计算了单层黑磷、氟化石墨烯、氮化硼等一系列二维材料的激子结合能，并揭示出此类材料的激子结合能与其准粒子能隙之间存在显著的线性标度关系。该研究成果以“Linear Scaling of the Exciton Binding Energy versus the Band Gap of Two-Dimensional Materials”为题发表在国际权威物理学杂志《物理评论快报》上。

激子结合能也称激子效应，是分离组成激子的电子-空穴对所需要提供的能量，其大小在许多基于半导体的光伏与光电器件的工作效率中起着至关重要的作用。近期的研究发现，很多一维和二维材料的激子结合能都比相应的体材料大得多，相应的激子效应也更加显著，从而可为设计新的能量转换器件提供新机遇。

Jinho Choi博士和崔萍博士等人利用GW-Bethe-Salpeter-Equation (GW-BSE)方法首先计算了实验上新近发现的两种层状二维材料的激子结合能：黑磷（由中国科大合肥微尺度陈仙辉教授研究组近年首次生长出高质量黑磷单晶）和氟化石墨烯。它们的激子结合能分别是0.85 eV和2.03 eV，再次验证了二维材料由于库仑屏蔽作用的减弱而具有很强的激子效应。更重要的是，他们将这些结果与其它几个有代表性的层状材料体系的激子效应作为整体考虑，发现二维半导体材料的激子结合能与准粒子能隙之间存在显著的线性标度关系。利用类氢模型，结合k微扰理论，他们进一步解释了这种线性关系存在的内在物理原因，并用具体例子展示了这一标度关系对确定其它二维体系激子效应的普适性预测功能。

文章在评审过程中得到多位审稿人的高度肯定，尤其是在以统一精度标准下新的计算结果证明七种常见的二维体系都满足同一标度规律这一主要方面。一位审稿人评论道，“这些结果不仅在预言二维体系所遵从的线性标度规律方面有耐人回味的新意，也在规范该领域的严谨度方面迈出了显著的新步伐 (The results present a significant new step in establishing rigor in the field, as well as intriguing innovation with the prediction of a linear scaling law for direct band gap 2D materials).”



◆微尺度理化分析实验室举办《热分析方法通则》分析标准修订研讨会

7月22-23日，微尺度理化分析实验室举办《热分析方法通则》修订工作研讨会，理化分析实验室刘文齐主任出席研讨会并致辞，修订组组长、理化分析实验室副主任丁延伟主持了此次会议。

教育部科技发展中心、国家计量认证高校评审组于2015年6月发起并组织国内高校技术力量对现行的现代分析仪器原理和分析方法进行修订，微尺度理化分析实验室作为主修单位分别承担了《热分析方法通则》和《原子荧光光度分析方法通则》两项标准的修订工作。参与此次《热分析方法通则》修订工作研讨会的专家分别来自中国科学技术大学、北京大学、浙江大学、西南科技大学、南京师范大学、武汉理工大学、山东理工大学。作为长期从事热分析工作的专业科技人员，多位专家进行了为期两天的热烈研讨，确定了本次通则修订的方案，分组完成了修订方案中每部分内容，最终汇总形成通则初稿。来自美国PE公司、美国TA仪器公司和法国塞塔拉姆 (Setaram) 公司的技术专家应邀参加了本次研讨会，并针对不同型号仪器的现状和发展趋势提出了十分宝贵的建议。

◆微尺度国家实验室召开安全工作专题会议

根据学校安全工作校务专题会议布置，合肥微尺度物质科学国家实验室成立了安全工作自查组，并于8月28日组织召开安全工作专题会议。安全工作自查组全体成员学习了学校2015年度安全工作校务专项会议精神，深刻认识到安全工作在国家实验室建设发展中的重要性。

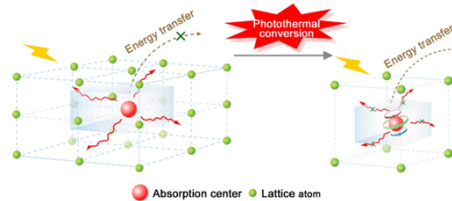
按照《中国科学技术大学关于全面排查安全隐患专项行动的紧急通知》内容，自查组讨论了涉及危险化学品、生物试剂、特种设备和放射源的安全制度建设和完善、安全责任落实、排查工作范围、安全人员专职化等问题；要求各研究室或课题组针对各自情况全面开展安全隐患自查自改；实验室将在原有例行的每月安全检查工作基础上加大排查工作力度，以消除各种可能存在的安全隐患。会后，参会人员就理化分析、低温强磁场、计算楼和理化大楼等实验楼逐一进行了安全检查，对水电消防设施、气体钢瓶、仪器设备、化学品、违规电器等展开安全隐患排查，着重对涉及使用危险化学品的实验场所进行了细致排查。

◆博士后逯鹤获得第八批博士后科学基金特别资助



中国科大基于智能相变晶格裁剪策略 发明高效上转换发光材料

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室熊宇杰实验课题组与江俊理课题组、宋礼及储旺盛同步辐射表征课题组等合作攻关，提出一类改善材料传能性能的新策略。在该策略中，他们巧妙利用先前提及的不受欢迎的能量弛豫过程产生的热能来引发一种“智能相变”过程，即利用能量弛豫热能驱动晶格中的原子重排，形成不再能够有效发生能量弛豫的高度有序立方晶格结构，从而极大地提高其量子效率。相关研究成果最近发表在国际著名材料科学期刊Advanced Materials上 (Adv. Mater. 2015, 27, 5528)。



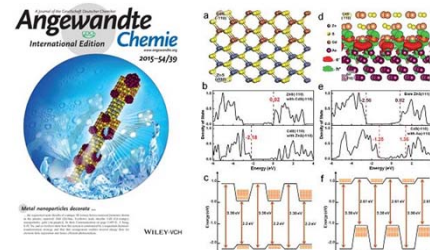
智能相变原理示意图

从实验方法上，研究人员使用简便的近红外光处理的方法，利用六方相 NaYF_4 晶格中能量弛豫过程完成光热转换，在局部热效应下引发一种智能的相变过程。第一性原理的相变模拟揭示出这是一种新颖的局部相变机制，即全局相变是在热驱动局部重排原子的静电势牵引下完成的。更有意思的是，一旦相变形成的立方晶格中不再具有明显的局部能量弛豫通道，这种智能过程就会自动停止。基于该方法，相变前后的上转换效率提高高达700余倍。在传统概念中，业界普遍认为由于立方相 NaYF_4 晶格中钠离子和稀土离子的随机分布，在传能过程中具有更多的非谐振声子耦合带来的能量损失，其上转换效率远低于六方相 NaYF_4 。该工作中发展出的立方相 NaYF_4 材料具有高度有序的离子排列，在上转换发光过程中展现出高达8.2%的量子效率，甚至高于目前报道的大多数六方相 NaYF_4 材料。

中国科大研制成功高效三元多节点鞘异质纳米棒 光催化产氢催化剂

最近，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室俞书宏课题组与江俊课题组、福州大学王心晨课题组合作，基于液相化学转换方法首次成功制备了一种独特的一维三元多节点鞘硫化物异质纳米棒-[S1-(S2/M)]-S1-[S1-(S2/M)]-S1-，其中金属组分选择生长在分段节点鞘S2上 (S1 = ZnS; S2 = CdS; M = Au, Pd, Pt)，通过贵金属的选择性生长成功实现了二元type-I型异质结能带匹配到三元type-II结构的转换。研究人员通过理论计算模拟分析表明，这种能带分布保证了光生电子不但可以从CdS节点鞘转移到金属表面，而且同时能够转移到暴露的ZnS组分，从而形成两种富电子活性中心，促使光催化产氢性能得到显著提高。

该成果近期以Hot Paper发表在《德国应用化学》(Angew. Chem. -Int. Ed. 2015, 54(39), 11495-11500)，并被选为内封面。论文发表后，被MaterialsView以“Metal-semiconductor heteronanorods for efficient photocatalytic hydrogen”为题选为研究亮点，被称为“事实上，电子-空穴的分离在半导体材料应用领域一直是极为重要的过程，因而这里报道的材料设计策略为利用适当组分进行能带工程调控并增强其协同功能提供了新的视角，这一工作为今后合理设计光电功能化的纳米体系提供新的思路。”



图左：多节点鞘异质纳米棒；图右：多节点鞘异质纳米棒的能带结构