

表面物理国家重点实验室

STATE KEY LABORATORY FOR SURFACE PHYSICS

2013-2014

Annual Report 2013-2014

年报

中国科学院物理研究所

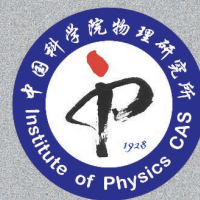
INSTITUTE OF PHYSICS

CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

北京凝聚态物理国家实验室（筹）

BEIJING NATIONAL LABORATORY

FOR CONDENSED MATTER PHYSICS



目录

CONTENTS

01

Preface

前言 / 01

02

Laboratory Profile

实验室概况 / 05

03

Group Annual Work Progress

课题组年度工作进展 / 13

04

International Cooperation and

Academic Exchanges

国际合作与学术交流 / 31

05

Introduction and Training of Talents

人才引进及培养 / 45

06

Laboratory Equipment

实验室设备 / 53

07

Honors and Awards

荣誉和奖励 / 65

08

The Reports

相关报道 / 67

09

Publications List

发表文章 / 79

01 前言

表面物理国家重点实验室以发展表面新型分析方法与精确可控制备技术为基础，着眼于能源、信息科学与产业的可持续发展，针对薄膜、表面、界面以及低维体系中的物理问题开展高水平的基础研究。2013-2014年间，实验室在围绕水与固态材料界面、二维晶体材料、狄拉克电子体系、复杂过渡金属氧化物及其复杂行为微观物理机制的研究中取得了一系列优秀的研究成果，在SCI收录期刊中发表论文86篇，其中*Nature*子刊4篇，*PNAS* 3篇，*PRL* 2篇，*JACS* 2篇，*NL* 4篇。2013年，何珂获得国家杰出青年基金支持，王文龙和陈岚分别获得基金委优秀青年科学基金支持，白雪冬获得科技部中青年科技创新领军人才；2014年，郭建东获得中国真空学会科技青年创新奖，孟胜获得物理所科技新人奖。

2013-2014年，表面实验室的研究团队充分发挥尖端仪器自主研发以及低维量子结构设计构筑方面的优势，在对硅烯的研究中继续取得重要突破。我们发现银衬底上的硅烯在低温下自发形成两种镜像对称的 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 三角形重构，它们在有限温度下的快速相互转变揭示出硅烯与衬底较弱的作用，而该结构还导致其电子结构在狄拉克点处打开较大的能隙，有利于硅烯在电子器件中的应用。充分氢化 3×3 重构的硅烯表面，可以在每个元胞内吸附7个氢原子，并在450K发生可控的去氢反应，这为硅烯的能带调控和新型储氢材料研究打下了基础。我们完成了新型高分辨电子能量损失谱仪（HREELS）的自主研发，通过设计特殊的电磁透镜，将半球形电子能量分析器与二维探测器应用于HREELS测量，能够同时获得声子等表面元激发的能量/动量二维信息，角分辨率与测量效率得到大大提高，为电子-声子耦合（EPC）对材料性质影响的研究提供了有力的工具。通过对二维电荷密度波（CDW）材料NbSe₂声子谱与电子能带结构的分析，我们发现该体系中CDW相的形成由各向异性的EPC决定，与一维金属体系中的费米嵌套机制完全不同，由此指出在研究中需要对这种重要的物理现象进行分类。通过对Cu₃NM_x（M= Cu, Ag, Au）薄膜掺杂的精确控制，我们实现了大温区内的恒定电阻率现象，Cu₃NAg_{0.76}样品的归一化电阻率在55~300K范围内的方差仅为 8.0×10^{-4} 。我们利用原位透射电镜方法，在原子尺度原位实时观察到MoS₂纳米片中锂离子嵌入导致的相变过程，揭示了层状MoS₂纳米材料储锂的原子机制。在理论研究方面，我们通过对水在不同晶格常数的固体fcc（111）表面浸润性质的分析，直接证明了表面晶格常数、界面水的结构、表面浸润性三者密切相关，从而为材料表面浸润性质的微观理解和调节奠定了基础。

在鼓励原创性基础科研工作的同时，实验室面向国家重大研究任务和战略性技术储备需求，努力促进各课题组学术方向的凝聚和合作。2013年起，由物理所承担的中国科学院战略性先导科技B类专项“拓扑与超导新物态调控”计划启动，表面实验室人员全面参与，并负责“拓扑有序材料的制备和性质调控”以及“低维电子系统的量子调控”两个课题研究。2014年，实验室加快推进共享仪器建设，购进X射线光电子能谱仪、共焦扫描近场光学显微镜等，并整合已有资源，形成集理论计算、低维量子结构制备、高空间分辨率观测、多自由度谱学以及输运性质测量等完善手段的“低维量子结构表征

与操纵平台”，包含26台/套大型仪器，在实验室内部共享并对外开放。与光物理重点实验室合作，实验室分别于2013年7月和2014年6月主办氧化物人工低维结构方面的国际研讨会，这是继2012年实验室主办“Recent Progress in Oxide Interfaces”会议之后的年度系列研讨会，吸引了众多这一新兴领域的国际专家来交流最新的研究进展，并开展长期稳定的科研合作；2014年6月，吴克辉在物理所国际合作中心的支持下主办了第四届国际硅烯大会，这也是国际上第一次硅烯研究领域的独立盛会；实验室还一直坚持推动“表面物理系列报告”和实验室“物理半月谈”，有效促进了学术交流和文化建设。

表面实验室的发展离不开前辈专家、各界朋友的关心与支持，在此谨向大家表示衷心的感谢！我们将继承发扬实验室的优良传统，团结一致，面向世界科学前沿和国家战略需求，再接再厉，力争取得更大的进步！



表面物理国家重点实验室主任

2015年6月

01 PREFACE

Aiming at the sustainable development of clean energy and future information industry, the State Key Laboratory for Surface Physics has been carrying out fundamental researches on surfaces, interfaces, films, and low-dimension materials, with persistent efforts in establishing novel characterization instruments and controllable fabrication techniques with ultimate precision. During year 2013-2014, series of significant progress have been achieved in studies of water-solid interfaces, two-dimensional crystals, Dirac electron materials, transition metal oxides, and the microscopic mechanisms of their complex behaviors. More than 80 SCI papers were published, including 4 in *Nature sub-journals*, 3 in *PNAS*, 2 in *PRL*, 2 in *JACS*, and 4 in *NL*. Ke He won the National Natural Science Fund for Distinguished Young Scholar, Wenlong Wang and Lan Chen received the National Natural Science Fund for Excellent Young Scholar, and Xuedong Bai was awarded with the Leading Talents of Science and Technology Innovation in 2013; Jiandong Guo received the Innovation Award of Vacuum Technology for Young Scientists of Chinese Vacuum Society, and Sheng Meng received the IOP New Star Award in 2014.

With unique specialties in developing state-of-the-art instruments and precise control methods for the fabrication of novel quantum structures, we made further breakthroughs in the studies of silicene. It was found that the silicene on silver forms two types of triangular reconstruction with mirror-symmetry spontaneously at low temperature. The fast, reversible transformation between them reveals the weak interaction between silicene and the substrate. And the reconstruction leads to the opening of a large electronic gap in the band structure, facilitating the applications of silicene in electronic devices. We also found that, by fully hydrogenating the (3×3)-reconstructed silicene monolayer, seven H atoms can be adsorbed in each unit cell, while the dehydrogenation occurs at ~450 K in a controlled way and recovers the initial silicene-(3×3). Thus we pave the way for further investigations of the band engineering of silicene and novel hydrogen storage materials. We developed a new high-resolution electron energy loss spectroscopy (HREELS). By designing a special electromagnetic lens system attached to the standard electron source, hemispherical analyzer and two-dimensional (2D) detector are employed, which provide the information of energy and momentum of surface excitations in a 2D map. With improved angle resolution and measurement efficiency, the new HREELS is a powerful tool for the understanding of the role of electron-phonon coupling (EPC) related to physical properties of novel materials. We analyzed the phonon spectra and the electron band structures of the 2D charge density wave (CDW) material, NbSe₂. It was found that, distinct from the Fermi surface nesting mechanism as valid in one-dimensional metals, the CDW in NbSe₂ is determined by the anisotropic EPC. We further suggested that CDW phases should be classified based on their nature. By precisely tuning the doping in Cu₃NM_x (M= Cu, Ag, Au) films, we realized the constant resistivity in a broad

temperature range. The standard deviation of normalized resistivity of $\text{Cu}_3\text{NAg}_{0.76}$ is as low as 8.0×10^{-4} within 55-300 K. We designed a Li ion battery structure with MoS_2 nanosheet as the electrode in high-resolution transmission electron microscope. Two types of phase transition induced by the Li ion insertion were observed at the atomic scale in real time. The storage mechanism of Li ion in MoS_2 has been clarified. With the efforts in theoretical calculations, we analyzed the wetting behaviors of water on fcc (111) surfaces with different lattice constants. The close relations among the length of lattice constant, contact angle of the water droplet, as well as the structure and dynamics of vicinal water are manifested.

The lab encourages original research exploration, while we are also making great efforts to organize teams for major national projects. Since the start of the Strategic Priority Research Program (B) of the Chinese Academy of Sciences in the institute in 2013, the surface lab has been a major power. With close collaborations with other labs, we are in charge of two topics, "Ordered Topological Materials" and "Low-Dimensional Electron Systems". In 2014, we made major progress in establishing the shared network of instruments. Including the new x-ray photoemission electron spectroscopy (XPS) and the confocal scanning near-field optical microscope, we integrate the available resources into a comprehensive instrument platform with equipments for material computations, fabrications of low-dimensional structures, high-resolution characterizations, spectroscopy with multiple degrees of freedom, and electric transport measurements. Following the first international workshop on oxide interfaces in IOP in 2012, we cooperated with the Key Laboratory for Optical Physics to organize the series of the workshop annually. Experts in this emerging field from worldwide have been attracted to exchange their latest progress and to initiate solid collaborations. In 2014, Kehui Wu organized the 4th International Conference on Silicene, which is the first independent conference on silicene researches. To promote the exchange of scientific ideas, we organize the Surface Physics Series Seminars and the Semimonthly Forum on Physics.

We sincerely appreciate the tremendous help and support from all colleagues and friends around the world. Thank you for your continuous interest in the lab. We strive to work with our staff, students and friends for a better future.



Director: Jiandong Guo

June, 2015

02 实验室概况

实验室概况

表面物理国家重点实验室是由国家计委批准并资助建设的第一批国家重点实验室之一，于1987年建成并向国内外开放。首任实验室学术委员会主任为王迅院士，首任实验室主任为王鼎盛院士。林彰达，王恩哥，薛其坤，高世武曾先后担任实验室主任。现任实验室学术委员会主任为薛其坤院士，现任实验室主任为郭建东研究员。

实验室拥有一支年轻的优秀科研团队，现有固定研究人员22名，在站博士后2名，在读研究生51名。研究团队以青年人为主，其中45岁以下的研究人员占90%。

实验室以物质表面和界面为主要研究对象，使用高精度实验工具，与理论方法密切结合，开展与信息科学、纳米科学和能源科学有直接联系的材料制备、物性表征、功能调控等方面的研究。当前研究集中于发展原子级精度控制方法制备低维与纳米结构，发展多种自由度、高分辨率新型表征技术，以此为基础研究表面/界面各种局域效应及其集体行为、微观结构/掺杂/缺陷等对体系宏观性质的影响、以及相关的电子激发态动力学特征等。实验室设六个课题组，研究内容包括：

- 低维纳米结构的控制生长、新奇性质与原子尺度观测
- 表面原子过程与薄膜生长
- 单分子及表面元激发的测控和动力学研究
- 氧化物人工低维结构的生长与性能调控
- 低维量子材料的分子束外延生长及电子态调控
- 表面激发动力学和能源应用

实验室目前承担多项国家重大科研项目，包括主持科技部国家重大科学研究计划“基于扫描探针技术的纳米表征新方法研究”（首席科学家：白雪冬）；作为负责人承担多个973项目与国家重大科学研究计划子课题；作为主要骨干参加中国科学院战略性先导科技B类专项“拓扑与超导新物态调控”，并负责“拓扑有序材料的制备和性质调控”以及“低维电子系统的量子调控”两个课题研究；另外还承担国家自然科学基金与重点项目多项。

近五年来，实验室共发表文章200余篇，申请专利数十项，在表面物理相关学科的一些领域取得了重要进展。研究工

作得到了国内外学界的一致认可，曾多次获得集体和个人重要奖项，如王恩哥领导的团队“轻元素新纳米结构的构筑、调控及其物理特征的研究”和贾金锋领导的团队“薄膜/纳米结构的控制生长和量子操纵”分别获得国家自然科学二等奖（2011年），马旭村获得陈嘉庚科学奖和中国青年女科学家奖（2012年），白雪冬获得科技部中青年科技创新领军人才（2013年），郭建东获得中国真空学会科技青年创新奖（2014年），孟胜获得物理所科技新人奖（2014年）等。

表面物理国家重点实验室十分注重为研究工作者们提供广阔自由的交流空间，着力搭建开放和谐的科研平台，为培养优秀科研人才奠定基础。实验室成立至今有3人（王鼎盛、薛其坤、王恩哥）被推选为中国科学院院士，9人获得国家杰出青年科学基金支持，3人获得优秀青年科学基金项目。

实验室与国内外专家积极合作，共同探索前沿科学问题，推进相关领域国家重大科研项目的进展。近年来实验室国内外学术交流日益深入，科研水平不断提高，已经成为国内外相关领域重要的交流合作基地之一。

02 INTRODUCTION

The State Key Laboratory for Surface Physics was founded in 1987 as one of the first ten state key laboratories in China. Prof. Xun Wang and Prof. Dingsheng Wang served the first term of the Academic Steering Committee Chair and Lab Director, respectively. Subsequent lab directors include Prof. Zhangda Lin, Prof. Enge Wang, Prof. Qikun Xue, and Prof. Shiwu Gao. The current Academic Steering Committee Chair is Prof. Qikun Xue and the Lab Director is Prof. Jiandong Guo. The Laboratory owns a young talented research team, including 22 regular staff members, 2 post doctors and 51 graduate students. Over 90% percent of the staff members are under the age of 45.

Our mission is to explore the fundamental aspects of novel phenomena at surfaces and interfaces, with a combination of high-resolution experimental tools and first principle calculations. The researches specialize in fabrication, characterization and functionalization of artificial materials that have potential applications in information, energy and nano science. Current research activities include the controlled growth of low-dimensional quantum structures with atomic precision, development of novel instruments with high resolution in multiple degrees of freedom, and investigation with such novel tools on the localized phenomena as well as their collective behaviors at surfaces and interfaces, effect of the microstructure on macroscopic properties, and dynamic behavior in excited electronic states. There are six research groups in the Lab:

- Controlled Growth, Novel Properties and Their Atomic-level Characterization of Low-dimensional Nanostructures
- Atomic Processes on Surface and Film Growth
- Detection, Control, and Dynamics of Single Molecules and Elementary Excitations
- Growth of Artificial Low-dimensional Oxide Structures and the Functionality Control
- MBE Growth of Low-dimensional Materials and Manipulation of Their Electronic Properties
- Surface Excitation and Energy Conversion

The Lab has been very active in undertaking major national scientific projects, including the Major National Scientific Research Program—Developing Nanocharacterization Methods Based on Scanning Probe Microscopy Technique (chief scientist: Xuedong Bai) and several other National Key Basic Research and Development Programs of Chinese Ministry of Science and Technology, the Strategic Priority Research Program of the Chinese Academy of Sciences “Control of novel states in topological and superconducting materials”, as well as the key projects of National Natural Science Foundation of China.

Significant research progress has been made in the Lab and has attracted lots of attention worldwide. During the past five years, we have published more than 200 papers in international peer-reviewed journals and filed tens of patents. Prizes and honorary have been awarded to Lab members, including the Second Prize of National Natural Science Awards (Enge Wang's team, 2011; Jinfeng Jia's team, 2011), Tan Kah Kee Science Award and Chinese Young Women Scientist Award (Xucun Ma, 2012), Leading Talents of Science and Technology Innovation (Xuedong Bai, 2013), Innovation Award of Vacuum Technology for Young Scientists (Jiandong Guo, 2014), and IOP New Star Award (Sheng Meng, 2014).

It is our high priority to provide all members an open research platform and a harmonic environment for communications and collaborations, which we believe being crucial for the growing research talents. Since the founding of Lab in 1987, three lab members (Dingsheng Wang, Qikun Xue and Enge Wang) have been elected to the Academy of Chinese Academy of Sciences, nine have received National Outstanding Young Scientists Awards, three have received National Excellent Young Scientists Awards.

Persistent efforts have been made in the Lab to promote worldwide collaborations in frontier scientific research fields and to stimulate progresses in national scientific projects. With the continuous academic exchanges and research progresses, the Lab has been one of the major bases for worldwide collaborations in the field.

行政机构和管理

Organization & Administration

实验室主任：郭建东 研究员

Director: Prof. Jiandong Guo

实验室副主任：陆兴华 研究员

Deputy Director: Prof. Xinghua Lu

行政秘书：李秋虹

Secretary: Ms. Qihong Li

历届主任

Successive Directors

第一届主任
(1987 - 1991)

王鼎盛 研究员 (院士)
Prof. Dingsheng Wang

第二届主任
(1991 - 1995)

林彰达 研究员
Prof. Zhangda Lin

第三届主任
(1995 - 2000)

王恩哥 研究员 (院士)
Prof. Enge Wang

第四届主任
(2000 - 2005)

薛其坤 教授 (院士)
Prof. Qikun Xue

第五届主任
(2005 - 2009)

高世武 研究员
Prof. Shiwu Gao


学术委员会(2011-2015)

Academic Steering Committee

主任 Chairman	
薛其坤 教授 (院士)	Prof. Qikun XUE, Tsinghua University
副主任 Deputy Chairman	
王恩哥 研究员 (院士)	Prof. Enge WANG, Chinese Academy of Sciences
委员 Members	
万立骏 教授 (院士)	Prof. Lijun WAN, University of Science and Technology of China
王鼎盛 研究员 (院士)	Prof. Dingsheng WANG, Institute of Physics, CAS
王琛 研究员	Prof. Chen WANG, National Center for Nanoscience and Technology
王牧 教授	Prof. Mu WANG, Nanjing University
王兵 教授	Prof. Bing WANG, University of Science and Technology of China
牛谦 教授	Prof. Qian NIU, University of Texas At Austin
包信和 研究员 (院士)	Prof. Xinhe BAO, Dalian Institute of Chemical Physics, CAS
江颖 教授	Prof. Ying JIANG, Peking University
朱星 教授	Prof. Xing ZHU, Peking University
刘峰 教授	Prof. Feng LIU, University of Utah
李树深 研究员 (院士)	Prof. Shushen LI, Institute of Semiconductors, CAS
杨学明 研究员 (院士)	Prof. Xueming YANG, Dalian Institute of Chemical Physics, CAS
张振宇 教授	Prof. Zhenyu ZHANG, University of Science and Technology of China
何丕模 教授	Prof. Pimu HE, Zhejiang University
张坚地 教授	Prof. Jiandi ZHANG, Louisiana State University
张绳百 教授	Prof. Shengbai ZHANG, Rensselaer Polytechnic Institute
周兴江 研究员	Prof. Xingjiang ZHOU, Institute of Physics, CAS
姜晓明 研究员	Prof. Xiaoming JIANG, Institute of High Energy Physics, CAS
封东来 教授	Prof. Donglai FENG, Fudan University
高鸿钧 研究员 (院士)	Prof. Hongjun GAO, Institute of Physics, CAS
郭建东 研究员	Prof. Jiandong GUO, Institute of Physics, CAS
贾金锋 教授	Prof. Jinfeng JIA, Shanghai Jiao Tong University
裘晓辉 研究员	Prof. Xiaohui QIU, National Center for Nanoscience and Technology

杰出人才


Outstanding Researchers

 中国科学院院士
Academician, CAS

王鼎盛 Dingsheng Wang

王恩哥 Enge Wang

薛其坤 Qikun Xue (现在机构: 清华大学)

 国家杰出青年基金获得者
National Natural Science Fund for Distinguished Young Scholar

1995 王恩哥 Enge Wang

1996 薛其坤 Qikun Xue (现在机构: 清华大学)

2003 贾金锋 Jinfeng Jia (现在机构: 上海交通大学)

2007 白雪冬 Xuedong Bai


2008 夏 珂 Ke Xia (现在机构: 北京师范大学)

2008 高世武 Shiwu Gao (现在机构: 北京计算科学中心)

2010 马旭村 Xucun Ma (现在机构: 清华大学)


2012 郭建东 Jiandong Guo

2013 何 珂 Ke He (现在机构: 清华大学)

 国家海外青年学者合作研究基金获得者
Joint Research Fund for Overseas Chinese Young Scholars

1999 张振宇/王恩哥 Zhenyu Zhang/Enge Wang

2001 施至刚/薛其坤 Chih-Kang Shih/Qikun Xue

 优秀青年科学基金项目
National Natural Science Fund for Excellent Young Scholar

2012 孟 胜 Sheng Meng

2013 王文龙 Wenlong Wang 陈 岚 Lan Chen



2013年研究生考核暨
学术交流大会



2014年研究生考核暨
学术交流大会

03 课题组年度工作进展

研究组和研究方向

Research Groups & Directions

☑ SF01 课题组长：白雪冬 研究员/Group Leader: Prof. Xuedong Bai

低维纳米结构的控制生长、新奇性质与原子尺度观测

Controlled Growth, Novel Properties and Their Atomic-level

Characterization of Low-dimensional Nanostructures

☑ SF03 课题组长：曹则贤 研究员/Group Leader: Prof. Zexian Cao

表面原子过程与薄膜生长

Atomic Processes on Surface and Film Growth

☑ SF05 课题组长：陆兴华 研究员/Group Leader: Prof. Xinghua Lu

单分子及表面元激发的测控和动力学研究

Detection, Control, and Dynamics of Single Molecules and Elementary Excitations

☑ SF06 课题组长：郭建东 研究员/Group Leader: Prof. Jiandong Guo

氧化物人工低维结构的生长与性能调控

Growth of Artificial Low-dimensional Oxide Structures and the Functionality Control

☑ SF09 课题组长：吴克辉 研究员/Group Leader: Prof. Kehui Wu

低维量子材料的分子束外延生长及电子态调控

MBE Growth of Low-dimensional Materials and Manipulation of Their Electronic Properties

☑ SF10 课题组长：孟胜 研究员/Group Leader: Prof. Sheng Meng

表面激发动力学和能源应用

Surface Excitation and Energy Conversion

SF01

低维纳米结构的控制生长、新奇性质与原子尺度观测 Controlled Growth, Novel Properties and Their Atomic-level Characterization of Low-dimensional Nanostructures

组长/Leader:

白雪冬 Xuedong Bai

组员/Group Members:

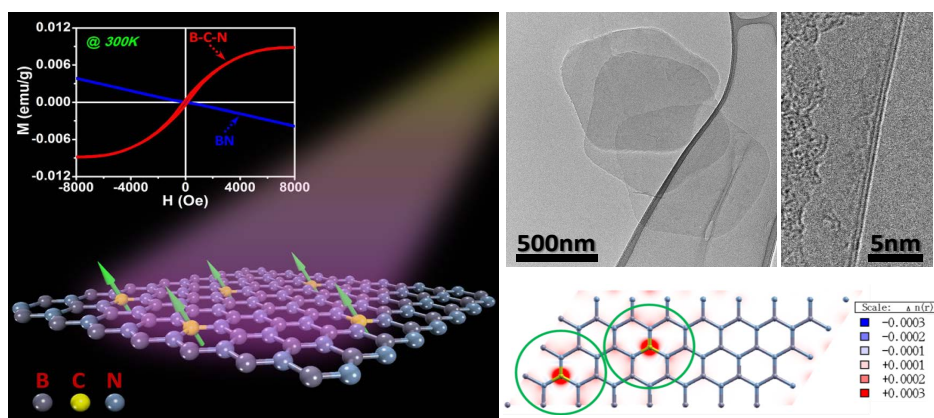
王文龙 Wenlong Wang 许智 Zhi Xu

Selected Scientific Results

1. B-C-N二维纳米片层材料的控制合成与室温铁磁性研究

以BN低维结构作为母体，对其进行C原子取代掺杂，这是制备三元B-C-N低维材料的一种重要途径，特别是，如果能够控制C原子在BN晶格中的掺杂方式，可控地实现单原子掺杂（即单个的C原子取代单个的B或N原子），则将可以在体系中产生未配对电子，从而发生自旋极化形成B-C-N轻元素自旋体系。在本研究中，我们从六方BN的体材料出发，首先通过液相化学法剥离制备出二维BN纳米片层，然后采用“原位C源掺杂法”来实现对BN纳米片层的C控制掺杂，该方法不仅可以获得高质量的宏观量（bulk-quantities）的B-C-N纳米片层样品，而且由于在合成过程中不涉及任何金属催化剂，从而可以避免引入磁性金属杂质对样品的污染。利用SQUID-VSM对B-C-N纳米片层材料进行的磁性表征的结果表明，在C掺杂之前作为母体的BN纳米片层是典型的抗磁性材料，没有自旋极化电子态，而经过C掺杂所形成的B-C-N纳米片层则表现出典型的铁磁行为，5K下的矫顽力约为300 Oe，饱和磁矩为0.009 emu/g，而且即使升温到室温以上铁磁性仍能保持，说明居里温度（ T_c ）是高于室温的。进一步地进行对比试验，通过控制氧化的方式把B-C-N纳米片层中的C原子选择性去

除，重新回到BN后铁磁性也随之消失，从而证明铁磁性的产生的确是来自C原子的掺杂效应。我们的实验结果首次给出了在三元B-C-N轻元素体系中可以发生自旋极化的确凿实验证据，并且所形成的局域磁矩之间可以发生长程耦合而形成铁磁序。结合第一性原理计算的结果初步阐明了B-C-N体系中自旋极化电子态的产生及其相互耦合物理机制，其简单的物理图像是：单个的C原子无论是取代BN二维六角晶格中的B还是N原子，都会产生一个未配对电子，从而在费米能级处产生一个色散几乎为零的“平带”杂质能级，该平带能级会自发发生自旋劈裂，形成局域磁矩；当BN晶格中发生更多的单C原子取代掺杂时，如果所形成的局域磁矩之间的距离足够近，自旋密度将发生交叠，通过交叠区域电子的交换关联作用，形成铁磁或反铁磁耦合，从而可以产生长程磁有序。相关结果发表在Adv. Funct. Mater. 24, 5985-5992 (2014) 上。



二维B-C-N纳米片层中的自旋极化及室温铁磁性

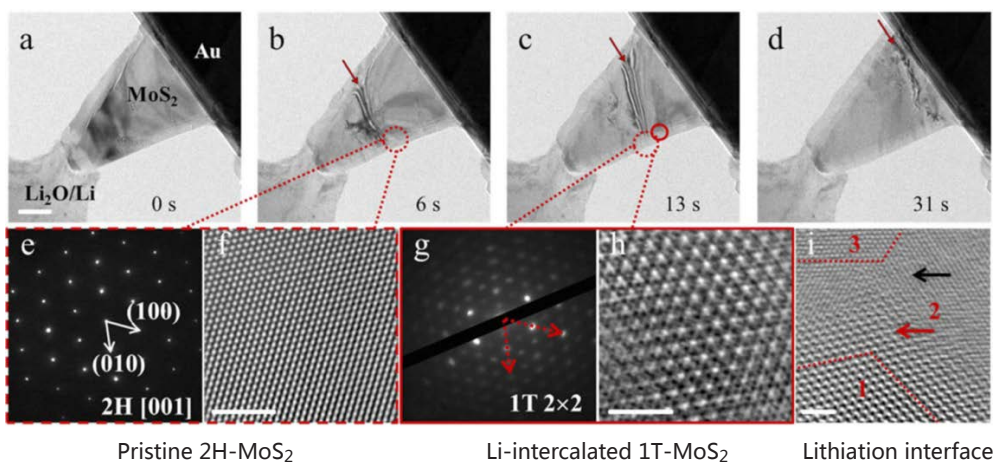
2. 应用原位透射电镜方法揭示二硫化钼纳米片嵌锂诱导结构相变的原子机制

层状金属硫化物体系具有多变的原子配位结构和电子结构，电子和声子之间存在很强的相互作用。层间较弱的范德瓦尔斯力使得可以通过嵌入各种功能化的分子和离子来调控材料的性质。二硫化钼 (MoS_2) 及其插层化合物在很多方面具有重要的应用价值，例如制备催化剂、吸附剂、固体电解质、感应器、电致变色显示器以及二次锂离子电池等。因此 MoS_2 中的嵌入化学以及嵌入化合物的物理和化学性质在基础研究和实际应用中都受到高度关注。锂离子嵌入 MoS_2 中的过程在以往被描述为一种离子-电子转移的拓扑反应，金属锂（施主）中的电子转移到钼（受主）的最低未占据轨道即d轨道上。这种描述中受主只提供了受主位置和氧化还原中心，然而实际上嵌入反应同样会导致受主发生重要的结构和相转变。由于层间耦合、量子局域效应对称性的改变等使得锂离子嵌入前后结构性质发生本质的变化。

本研究基于原位透射电子显微镜 (in-situ TEM) 技术，在透射电镜中设计并搭建了以 MoS_2 纳米片为工作电极的锂离子半电池，在原子尺度原位实时观察到 MoS_2 纳米片中嵌锂导致的两种相变过程。

首次锂化过程中，第一次相变对应的是锂离子的嵌入反应过程，由于电子的共嵌入，金属Mo的配位结构发生变化，由三菱柱配位转变为八面体配位，相应空间群由 $P6_3/m$ 转变为 $P-3m1$ ，产生2H-1T的相转变，锂离子嵌入在层间S-S的四面体配位中心处。本征2H结构的 MoS_2 为半导体性，锂化后的1T结构对应的电子结构为金属性，由于低维金属的不稳定性，二维平面内出现了超晶格从而产生电荷密度波 (Charge Density Wave)。原位动态过程研究发现这一相转变过程遵循剪切机制 (Shear Mechanism)，即锂离子的嵌入导致 MoS_2 中原子层之间发生相对滑移，造成二维平面内的剪切应力。多于1摩尔的锂离子嵌入时，1T- LiMoS_2 被分解为金属Mo网格和 Li_2S ，即发生第二次相变。该工作首次在实验上原位

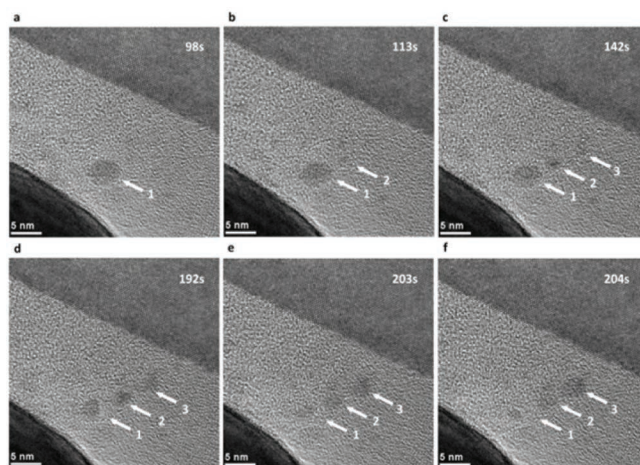
观察到 MoS_2 中锂离子嵌入发生的相转变，上述结构性质与 MoS_2 纽扣电池的放电曲线特征一一对应，对层状 MoS_2 纳米材料储锂机制和工作机理有个直接清晰的认识。相关结果发表在*J. Am. Chem. Soc.* 136, 6693-6697 (2014) 上。



3. 应用原位透射电镜方法表征离子输运动力学过程

离子输运是物理、化学和生命科学的一个基本过程，其性质对储能、催化和阻变存储等器件性能有重要的影响。在实验上高分辨表征离子输运过程和表界面电化学反应对揭示器件工作机理和开发新型器件具有重要的意义。我们利用原位透射电镜方法将纳米结构器件置入电镜内对器件工作的动态过程进行原位高分辨观测表征，研究器件的工作机理。最近在离子输运动力学及其相关的阻变存储器机理研究方面取得新进展。离子传输引起导电物质迁移而形成导电通道，这是被广泛接受的模型，但是对于离子输运和导电通道形成的动力学过程目前仍然缺少直接的实验证据。

以 $\text{Ag}/\text{SiO}_2/\text{p-Si}$ 体系的阻变机理研究为例，在透射电镜内原位观测 Ag 纳米颗粒的生长、迁移的动力过程及其伴随的电致阻变效应。针对一个独立的 SiO_2 中包埋的 Ag 颗粒进行观察，在电场下银颗粒逐渐收缩，沿电场前方有小颗粒析出并逐渐长大，同时刚生长的颗粒前方又开始有新的小颗粒析出。该颗粒充当“中继站”的作用，其后方的颗粒物质传递过来，同时又输送给前方颗粒使其逐渐长大，沿着电场方向依次进行，递推前移。其物理过程是，银颗粒表面在电场下产生极化，沿电场方向的两侧表面分别呈现正和负极性，即一个金属颗粒表现为双极性，当极化强度足够大时，在正负电极处发生氧化还原反应，即正极一侧氧化生成银离子，电场驱动其迁移，负极一侧又将传输过来的银离子还原。银离子在电化学势作用下发生迁移，并和氧化还原反应同时进行，形成了边消耗边生长的逐步移动过程。从能带的角度给出了离子输运动力学过程的物理图像，还进行了有限元方法模拟计算，指出这些银颗粒作为双极性电极需要满足的临界尺寸，与实验结果一致。这项研究应用自行研制的原位透射电镜仪器表征了固体介质中金属离子输运及其伴随的电化学传质过程，对深入理解离子型阻变存储器机理具有重要意义。相关结果发表在*Adv. Mater.* 26, 3649-3654 (2014) 上。



银纳米颗粒电化学传质过程的高分辨成像

Continue making progress on the studies of atomic-level observation and understanding of the ion transport and their related properties, and the structural controlling of surface/interface of light-element nanomaterials. There are the main results as following:

1. We reported on the bulk-quantity synthesis of high-quality C doped BN (B-C-N) nanosheets, and the first experimental observation of high-temperature ferromagnetism in such B-C-N based ternary light-element materials. An easy way to induce spin polarization in B-C-N systems is the random substitution of B and/or N atoms in a BN honeycomb lattice with C atoms. As predicted by previous theoretical studies, a substitutional C dopant in a BN sheet possesses a net magnetic moment of $1 \mu\text{B}$ independent of substitutional site (B or N). Here we synthesize bulk quantities of B-C-N nanosheets that are free of metallic impurities and investigate the magnetic properties of these samples. The samples were prepared through a multi-step process. The key procedure is the substitutional incorporation of C dopants into the honeycomb lattice of exfoliated BN nanosheets. These B-C-N samples exhibited ferromagnetic hysteresis at 300 K and above, with saturation magnetization of 0.009 emu/g and coercivity of 300 Oe, which are comparable to the previously reported behavior of defective graphite samples. The ferromagnetic response disappeared upon the removal of carbon dopants from BN lattice, indicating that magnetic contaminations can be excluded as the origin of observed magnetism. On the basis of first-principle calculations, we show that not only the substitutional carbon doping into a honeycomb BN lattice favors spontaneous spin polarization and local moment formation, but also the spin moments can be (anti)ferromagnetically coupled to exhibit long-range magnetic order.
2. Layered molybdenum disulfide (MoS_2) shows a unique combination of valuable structural, electronic, optical, mechanical, chemical, and thermal properties that have been studied for decades. The inexpensiveness and availability have offered the uses for lubricant, optoelectronic, catalytic, and clean energy storage applications. The weak van der Waals interaction between the MoS_2 layers allows alkali ions to intercalate without a significant volume expansion, which enables MoS_2 to be an alternative as an electrode material for high capacity lithium ion batteries. Research on the electrochemical lithiation reaction mechanism of MoS_2 has important significance, both in fundamental studies and practical application.

In our continuous efforts to develop in-situ transmission electron microscopy (TEM) characterization methods for nanomeasurements and device mechanism, we recently studied the dynamic electrochemical lithiation process of MoS_2 nanosheets by construction of an in-situ TEM electrochemical cell. They found that MoS_2 undergoes a trigonal prismatic (2H)-octahedral (1T) phase transition upon lithium intercalation. The in-situ real-time characterization at atomic scale provides a great leap forward in the fundamental understanding of the lithium ion storage mechanism in MoS_2 .

MoS_2 by its nature is a semiconductor with trigonal (2H) structure, where the S atoms locate in the lattice position of a hexagonal close-packed structure. Planes of Mo atoms are sandwiched between two atomic layers of S, such that each Mo is coordinated to six S atoms in a trigonal prismatic geometry (2H). Another MoS_2 polytype based on tetragonal symmetry is the octahedral phase (1T) with one MoS_2 layer per repeat unit. A structural transformation of

2H-1T corresponds to the electronic structure change from semiconducting to metallic. In their work, a systematical study has been performed on the structural properties of MoS₂ nanosheets during the lithiation process using an in-situ electrochemical TEM holder. The results demonstrate the existence of a phase transition of 2H-MoS₂ to 1T-LiMoS₂ and structural modulation in the 1T-LiMoS₂ in the first lithiation process, as shown in the figure below. Furthermore, with the capability of characterizing the phase boundary, the shear mechanism of the 2H-1T phase transition has been confirmed.

In addition, utilizing the in-situ measurements, the electrochemical reaction in each stage has been studied, which can also be correlated with the ex-situ performance of MoS₂ coin-type cells. After the phase transition of 2H-MoS₂ to 1T-LiMoS₂, there follows a conversion reaction during the lithiation of MoS₂. So the structural mechanism corresponding to the electrochemical property of MoS₂ during lithiation can be clearly understood.

The fundamental understanding of lithium ion intercalation behavior can allow for development in other transition metal dichalcogenides (TMDCs)-related energy devices and should enable a wide range of studies, such as TMDCs-based composition and optoelectronics.

3. Nanoionic resistive memories are one of most promising future information technologies with increasing scientific interests for memory, logic and neuromorphic applications. Generally, a conductive filament model has been testified to be the underlying switching mechanism. However, understanding of the physicochemical processes at atomic scale is still a challenge. We reported the real-time recorded electrochemical mass transfer process of silver in the silicon dioxide matrix, which is dedicated to revealing the filament formation and switching dynamics for nanoionic resistive memories. The novel sample structure and the atomic-scale images have provided us with unambiguous details of the mass transfer processes. Based on the experimental evidences, we proposed a bipolar electrochemical mass transfer mechanism to explain the switching dynamics. The physics of electronic conduction and device degradation is also clarified. The microscopic picture can be extended to varieties of systems, and helps guide research into stability and scalability.



晚餐会



体育活动

SF03

表面原子过程与薄膜生长

Atomic Process on Surface and Film Growth

组长/Leader:

曹则贤 Zexian Cao

组员/Group Members:

纪爱玲 Ailing Ji 王强 Qiang Wang 张凌云 Lingyun Zhang

Selected Scientific Results

1. 深入研究了APPJ放电的机理，确立了导致He、Ar等离子体羽辉不同形貌的原因；弄清楚了Penning Effect 在APPJ 过程中的特殊作用；
2. 在Au、Ag掺杂Cu₃N体系和Mn₃NMn基体系固体中获得了大温区内恒电阻率材料；
3. 开展水科学研究，在coffee ring, Leidenfrost effect以及水自发形核极致方面取得进展;发现水溶液玻璃化温度对浓度的普适性依赖关系，并利用相关结果研究混合溶液中离子的水合能力；
4. 深入研究了如何用一类特殊的函数产生8次和12次准周期结构，并由此找到了正方格子和三角格子的单向缩放对称性，利用高斯整数和Eisenstein整数证明了上述发现并证明对正方格子存在无穷多个单向缩放对称性，前两个方向分别和黄金分割数与白银分割数有关；
5. 出版专著一本《物理学咬文嚼字》卷二，编辑出版了一起水科学专辑，编辑了一本物理所85周年所庆专刊。

1. Investigation of mechanisms leading to the difference in the plume structure of APPJs of Ar and He; the role of Penning effect in determining the structure of plasma bullet in APPJ was clarified.
2. Realization of constant electrical resistivity over large temperature range in Cu₃NAg_x, Cu₃NAu_x and Mn₃NMn-based films.
3. Research over coffee ring effect, the Leidenfrost effect and the spontaneous nucleation in aqueous solutions. A universal dependence of glass transition temperature upon the concentration is discovered. The hydration behavior of ions in the mixed solutions is investigated.
4. Generation of 8-and 12fold quasi-periodic structures by using a special kind of function, with which we find the directional scaling symmetry for the square and triangular lattice. By virtue of the Gaussian integer and Eisenstein integer the discovery was proven, and it shows there are infinite possibilities for directional scaling symmetry in square lattice. The first two are related to the golden ratio and the silver ratio.
5. Publication of the book Etymologicon for Chinese Physics Learners (Vol. II, World Scientific 2013); Editing of a special issue upon water science; Editing of a special issue for the 85th anniversary of IOP, CAS.

SF05

单分子及表面元激发的测控和动力学研究

Detection, Control, and Dynamics of Single Molecules and Elementary Excitations

组长/Leader:

陆兴华 Xinghua Lu

组员/Group Members:

赵继民 Jimin Zhao 郭阳 Yang Guo 单欣岩 Xinyan Shan

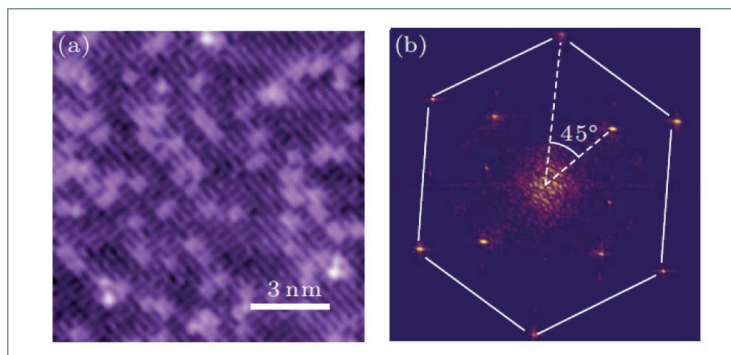
Selected Scientific Results

1. 开展多项仪器设备的研制工作：深紫外激光原位时间分辨隧道电子谱仪的研制及改进，实现了shaken-pulse-pair的工作模式，有效摒除了热效应对实验的影响；自旋相关扫描探针显微镜的研制按计划进行；纳米孔DNA测序研究在纳米孔的制备和控制电路的研制进展顺利。
2. 研究了铜箔表面石墨烯的微观结构和电子态密度，观察到了一种新的迷宫状重构图样。该图样由石墨烯的“three for six”三角晶格和铜衬底的正交格点组成，利用功能化的STM 针尖可以分别对这两种结构成像。通过扫描隧道谱技术（Scanning Tunneling Spectroscopy, STS），我们观察到了局域电子态密度的“能隙中心”态，验证了“three for six”三角晶格的部分 sp^3 杂化。结合X射线衍射数据，我们揭示了衬底表面的 $(2\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$ 重构。研究表明：石墨烯和铜衬底之间可以存在较强的相互作用，通过石墨烯和铜衬底之间的相互作用可以在石墨烯中诱导 sp^3 杂化，进而实现对石墨烯电子结构的调控。
3. 研究了水分子低温下吸附在Cu(111)表面会形成有特征构型的纳米团簇结构，如六聚体，七聚体，八聚体和九聚体等。利用带正偏压的金属针尖，我们实现水纳米团簇的电子注入，形成带电的水或者湿的电子（wet electron）。水分子的电子注入，会诱导整个纳米团簇面内的平移运动和整体的转动。结合DFT理论计算，我们详细讨论了水纳米团簇带电以及诱导的内部单个水分子扩散机制。
4. 在多铁体系 RFe_2O_4 中观测到双电荷有序态。采用超快光谱方法研究了单层FeSe超导体，成功地观测到了超导相变，测得超导转变温度为68 K，超导能隙 $\Delta(0)=3.2\sim 3.7 k_B T_c$ 。电-声子耦合常数为 $\lambda=0.48$ ，并阐释了可能的声子在超导机制中的重要作用，解释了覆盖层降低 T_c 的物理原因。在铁基超导体 $BaFe_{2-x}N_xAs_2$ 中观测到超导相变温度上下相干态声子的初相位的变化。研究了超快激光脉冲产生并相干调节多层石墨烯片中的声波产生。获颁一项中国发明专利授权。
5. 成功制备了单层氮化硼的超薄纳米孔并观测到了大量DNA穿孔信号。其亲水性增加了穿孔信号的产率，有效降低了电容和噪声。实验观测到DNA在氮化硼纳米孔的穿孔过程中有较慢的穿孔速率，预示着有较强的相互作用。
6. 作为最早发现并广泛应用的铂类抗癌药物，顺铂与DNA的相互作用过程可以分为三个阶段。我们利用氮化硅纳米孔研究了顺铂药物和DNA相互作用过程，清晰的展示了三个阶段发生的时间、效果和机理。第一阶段，带正电的顺铂分子与带负电的DNA相结合形成单臂结合物，使DNA的线电荷密度降低，从而降低了穿孔捕获率。第二阶段，部分DNA-

顺铂单臂结合位点上的顺铂与临近的G或A碱基结合形成双臂加合物，迫使DNA发生弯折并变软，减少了其驻留长度，导致捕获率升高。第三阶段，剩余的单臂位点的顺铂与较远处的G或A碱基结合，使DNA团聚形成复杂结构，有效直径增加，从而再次降低纳米孔的捕获率。

1. Design and construction of scientific instruments: Ultrafast laser coupled STM has been completed and the shaken-pulse-pair mode has been demonstrated in order to depress the thermal effect of the experiment; Spin resolved STM is under construction as planned; Nanopore for DNA sequencing has good progress in nanopore fabrication and electric control circuit design.

2. Interaction with the substrate plays an essential role in determining the structure and electronic property of graphene supported by a surface. We observe a maze-like reconstruction pattern in graphene on flat copper foil. With functionalized scanning tunneling microscope tips, a triangular three-for-six structure of graphene and a mixed $(2\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$ reconstruction of a Cu(100) surface are separately visualized at the atomic scale. Substrate-induced changes in the structure and electronic property are further



illustrated by micro-Raman spectroscopy and scanning tunneling spectroscopy. This finding suggests a new method to effectively induce partial sp^3 hybridization in a single-layer graphene and therefore to tune its electronic property through interaction with the substrate.

3. Our scanning tunneling microscopy experiments demonstrate that excess electrons in single H_2O clusters on Cu(111) surface can be injected from a negatively charged metallic tip and maintained stable. Density functional calculations show that three-fold symmetric H_2O nonamers without a none-zero dipole moment under the localized electric field induced by a charged metallic tip could be polarized to form new molecular structures which will increase the possibility of accumulating excess electrons to form hydrated electrons for nonamers on Cu(111) surface, which results in both the diffusion of single H_2O monomers within H_2O clusters and the in-plane directional motion of nonamers on Cu(111) surface. Both the direction and distance can be intentionally controlled by applied tip voltage and duration.

4. For the first time observed double charge ordering state in a RFe_2O_4 system. Using ultrafast spectroscopy we investigated the single layer FeSe superconductor. Observed the superconducting phase transition, measured that $T_c = 68$ K, the SC gap $\Delta(0) = 3.2 \sim 3.7 k_B T_c$, the electron-phonon coupling constant $\lambda = 0.48$, found the essential role of phonon in the superconducting mechanism, and explained why the capping layer will reduce the T_c . In the iron-based superconductor $BaFe_{2-x}N_xAs_2$ we found that the coherent phonon has a shift in the initial phase at below and above

the T_c . Investigated ultrafast pulse generation of acoustic waves in a multi-layered graphene thin film and realized coherent control of such waves. One patent got approved.

5. Solid-state nanopores based on single-layer hexagonal boron nitride (h-BN) are fabricated, showing strong stability under multiple disassembly and assembly. With UV-ozone treatment, the hydrophilicity of h-BN nanopore device can be significantly increased, resulting in a much reduced $1/f$ noise as compared with that in graphene nanopores. The good wetting property of h-BN nanopore also leads to very high DNA capture rate, where thousands of translocation events have been observed. The demonstrated distinct performance of h-BN nanopore suggests a very promising ultra-thin solid-state nanopore for DNA sequencing application.
6. A real-time monitoring of DNA-cisplatin interaction has been demonstrated by employing solid-state SiN nanopores. The DNA-cisplatin interacting process is clearly classified into three stages by measuring the capture rate of DNA-cisplatin adducts. In the first stage, the negative charged DNA molecules were partially discharged due to the bonding of positive charged cisplatin and forming of mono-adducts. In the second stage, forming of DNA-cisplatin di-adducts with the adjacent bases results in DNA bending and softening. The capture rate increases since the softened bi-adducts experience a lower barrier to thread into the nanopores. In the third stage, complex structures, such as micro-loop, are formed and the DNA-cisplatin adducts are aggregated. The capture rate decreases to zero as the aggregated adduct grows to the size of the pore. The characteristic time of this stage was found to be linear with the diameter of the nanopore and this dynamic process can be described with a second-order reaction model.



2013年9月慕田峪长城



2014年6月石林峡



2014年香山

SF06**氧化物人工低维结构的生长与性能调控****Growth of Artificial Low-dimensional Oxide Structures and the Functionality Control**

组长/Leader:

郭建东 Jiandong Guo

组员/Group Members:

郭沁林 Qinlin Guo 王炜华 Weihua Wang 杨芳 Fang Yang

朱学涛 Xuetao Zhu

胡旻卉 (博士后) Minhui Hu (Postdoctor)

Selected Scientific Results

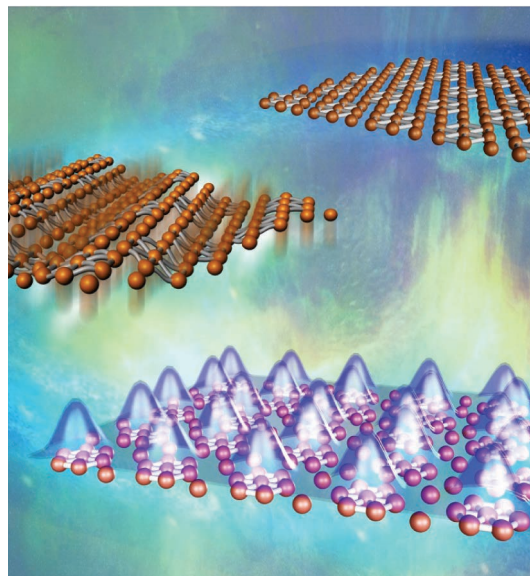
基于半导体的传统微电子工业面临越来越多的技术和基础科学问题挑战。复杂过渡金属氧化物中由于存在晶格、电荷、自旋与轨道等多种自由度及其耦合作用，对掺杂、外场等表现出灵敏的响应；特别是通过人工设计构筑的氧化物低维结构中还可能在与体相材料相关却又截然不同的“演生”现象，这为人工调控多种量子态、进而发展新型多功能氧化物电子器件提供了可能性。本组的研究方向针对氧化物界面电子学这一新兴领域展开，一方面发展氧化物薄膜、异质结等人工低维纳米结构的制备方法，通过原子级精度的生长控制实现对其电子结构的可靠调控，另一方面研究复杂氧化物表面与人工低维结构新奇量子效应的产生机理，进而探索其调控的方法与原理，为多功能氧化物电子器件的发展打下物理基础。本课题组2013-2014年取得的进展包括：

1. 通过控制SrTiO₃(110)表面的不同重构相可靠调节其电子结构，实现了对能隙态的调控，澄清了氧化物表面不同种类点缺陷对水吸附/解离行为的影响规律。
2. 通过对温度的控制在超高真空中实现了高质量SrTiO₃(110)薄膜的同质外延生长，在原子尺度表征了其中氧空位的分布，并阐明其决定因素。
3. 详细研究了原子级平整SrTiO₃(111)表面的制备方法，并且通过改变表面Ti/Sr阳离子浓度比例实现了对表面重构可逆变化的调节。进一步发展了氧化物分子束外延生长SrTiO₃(111)薄膜的精确控制方法，获得具有高对称性的原子级平整表面，而且薄膜具有优异的介电性能，在金属性掺杂衬底上形成的底栅结构可以在 $2 \times 10^{13}/\text{cm}^2$ 范围调控电极载流子浓度。
4. 研究了NbSe₂电荷密度波相的产生机理，通过对电子-声子耦合矩阵元的详细解析，揭示出各向异性电子-声子耦合的决定性作用。而在复杂的铜氧化物中，虽然电子-声子耦合强度值类似，但由于相关声子能量较大，不能导致声子失稳进而形成电荷密度波相。

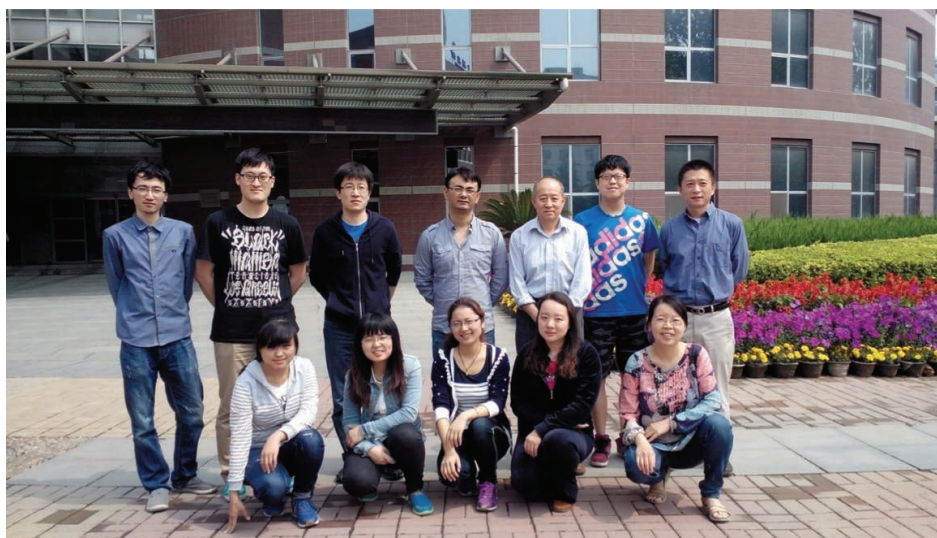
The traditional microelectronic industry based on semiconductors faces critical challenges in both fabrication techniques and fundamental physics. Complex transition metal oxides respond sensitively to the doping and external field due to the coupling between lattice, charge, spin, and orbit. Exotic phenomena emerge in the artificial low-dimensional oxide structures, offering the possibility to control the quantum states and to develop new multifunctional electronic devices. Our research focuses on the electronic structure at oxide interfaces. We have investigated the structures of complex surfaces at the atomic scale and the microscopic growth kinetics. In the recent works, we developed the new methods for the preparation of oxide films and artificial heterostructures. The growth control with atomic precision was achieved and therefore the electronic structures were manipulated dependably. This is the material basis of novel electronic devices. We also studied the mechanism of novel quantum effects on oxide surfaces or in low-dimensional structures. To develop the control method is the physical basis of multifunctional oxide electronics. The progress in 2013-2014 includes:

1. Tuned the electronic structure of $\text{SrTiO}_3(110)$ surface, especially the in-gap states, by controlling the stability of its different reconstruction phases. The effects of surface point defects on water adsorption/dissociation were clarified.
2. Realized the high-quality homoepitaxy of $\text{SrTiO}_3(110)$ film in ultra-high vacuum by controlling the temperature. The distribution of oxygen vacancies were characterized at the atomic scale. And the mechanism was proposed.
3. Studied the preparation methods of the atomically flat $\text{SrTiO}_3(111)$ surface and realized the control of the reversible transition between different reconstruction phases by adjusting the surface Ti/Sr cation concentration. Further developed the precise control method of the homoepitaxial $\text{SrTiO}_3(111)$ films by oxide MBE. The obtained films show high-symmetry atomically well-defined surfaces and possess high dielectric performance. The back gate structure formed on conducting substrate allows the carriers tuning range of $2 \times 10^{13}/\text{cm}^2$.
4. Studied the formation mechanism of charge density waves on NbSe_2 . By determining the electron-phonon coupling matrix elements, we clarified the key role of anisotropic EPC. But in cuprates that have similar EPC strength, the involved phonon cannot get instable to create CDW due to its relatively high energy.

电荷密度波 (CDW) 是一种电子电荷密度空间分布受到长程有序调制的现象, 它可以用固定的波长来描述, 并且往往伴随着相应于CDW波长的周期性晶格畸变。CDW相广泛存在于固体材料, 特别是低维体系中, 与金属-绝缘体转变等重要物理行为密切相关。在上世纪30年代, Peierls最早预言了一维金属性原子链中CDW的存在。他指出, 一维金属中电子态的不稳定, 会使得费米波矢处打开能隙, 从而使体系能量降低并驱动晶格相变。之后, 这种费米面上不同部分电子之间的强耦合作用往往被称之为“费米嵌套”(Fermi Surface Nesting)。1959年Kohn指出, 费米嵌套会引起晶格声子在相应动量的能量软化。但是最近, 对实际材料的越来越多的实验和理论分析表明, CDW相的形成不能用费米嵌套这一简单的图像来描述。对此, 我们提出了对实际材料中的电荷密度波体系根据它们不同的起源进行分类的新方法。



Charge Density Waves (CDW) are observed in many solids, especially in low-dimensional systems. A CDW is a modulation of the electronic charge density with a long-range ordering characterized by a given wavelength. CDWs are usually accompanied by a periodic lattice distortion. Their existence was first predicted in the 1930s by Rudolf Peierls, who prophesied that CDWs would exist in an ideal one-dimensional (1-D) chain of atoms. Peierls argued that this 1-D metal would be unstable forming energy gaps at the Fermi wavevectors $\pm k_F$, lowering the energy of the system and driving a reconstruction of the lattice. This coupling of one part of the Fermi surface to another is called Fermi-surface nesting. In 1959 Walter Kohn pointed out that this nesting results in what is now known as a “Kohn Anomaly”, a simultaneous softening of coherent lattice vibrations, i.e., phonon softening. This simple text-book picture of the origin of CDWs does not seem to be correct in many real materials as pointed out in several recent key publications and in this report we propose a new classification of CDWs based upon their nature.



SF09**低维量子材料的分子束外延生长及电子态调控**
MBE Growth of Low-dimensional Materials and Manipulation of Their Electronic Properties

组长/Leader:

吴克辉 Kehui Wu

组员/Group Members:

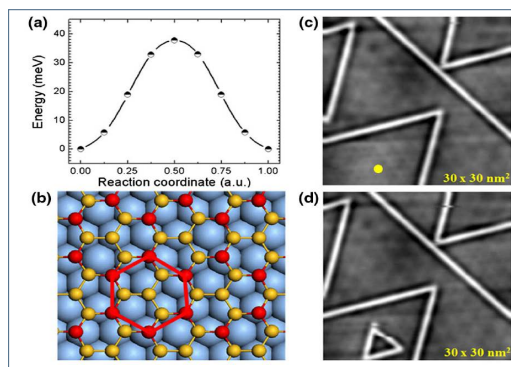
陈岚 Lan Chen 程鹏 Peng Cheng

陈建 (博士后) Jian Chen (Postdoctor)

Selected Scientific Results**硅烯的电子特性的研究：**

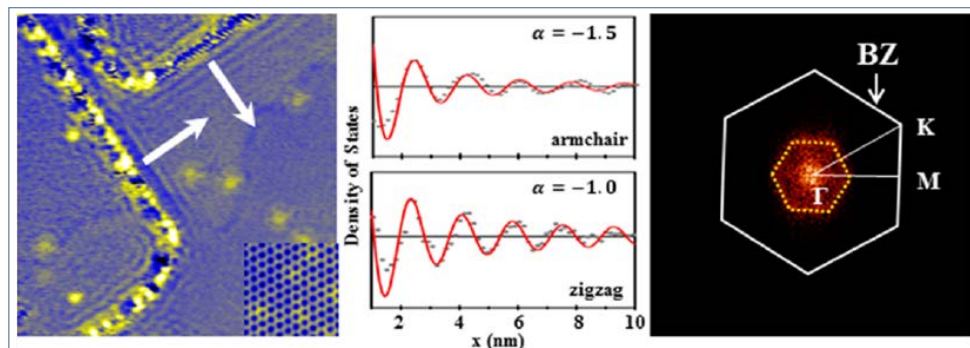
硅烯是由硅元素形成的类石墨烯结构的单层二维材料，有着与石墨烯相同的Dirac型电子结构。2011-2012年，我们在硅烯的材料生长和电子态的表征中取得了非常大的进展，利用分子束外延的办法成功地在Ag(111)单晶表面上制备出了单层硅烯，发现并解释了硅烯独有的重构结构，并于实验上首次证实了其线性的能量-动量关系。在此基础上，2013-2014年间，我们对硅烯的电子特性进行了更深入的研究，并获得了以下实验进展：

1. 硅烯在低温下的奇特相变现象：利用低温STM发现，将温度降至5K时硅烯出现了一个结构相变，原本大面积连续的 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 蜂窝结构分离为两种互为镜像对称的菱形结构相。这种有趣的相变行为展示出硅烯和石墨烯、以及硅烯和体相的硅结构的不同之处，其结构的复杂性也揭示了通过结构改性来调控硅烯电子结构的可能性。论文发表在Phys. Rev. Lett. 110, 085504 (2013)上，已被SCI引用60多次。并入选ESI “highly cited papers”。



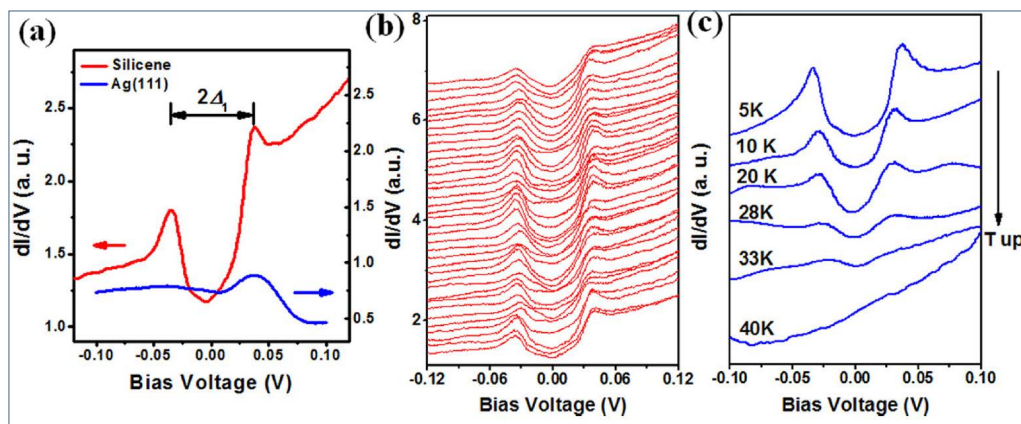
硅烯的相变及其理论解释。(a)镜像结构之间的转变势垒，(b)两个镜像的平均结构，(c)和(d)在低温下相变形成的三角形畴界的STM形貌图。

2. 硅烯中赝自旋和能带弯曲现象的研究：利用低温STM研究硅烯在两个不同晶体方向（armchair和zigzag）上的电子驻波的衰减规律，发现了其衰减指数分别为-1.5和-1.0，比普通的二维电子气（衰减指数为-0.5）要大得多，有力地证明了硅烯中存在手性的狄拉克电子特性。另外，我们还发现硅烯独特的 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 重构会使得高能处的电子能带产生六角对称的能带弯曲，这与石墨烯中的三角形能带弯曲完全不同，说明硅烯具有自己独特的量子特性。该论文发表在ACS Nano 7, 9049(2013)上。



硅烯中存在赝自旋和动量耦合的证据。左图为硅烯的台阶边缘的电子驻波，通过测量驻波的衰减可以拟合不同方向上的衰减指数，显示在中图，右图是对硅烯上点缺陷周围的驻波进行傅立叶变换得到的六角形图案

3. 硅烯薄膜的疑似超导能隙的发现：在液氮温度下的扫描隧道谱测量中，我们发现费米能级处有个70meV的能隙，并且能隙两端可以观察到相干峰，当温度升高时，能隙宽度变小，直到消失，转变温度大概在35-40K左右。这似乎表明观察到的能隙有可能是超导能隙。当然，该现象也有可能来自其他来源，例如电荷密度波，但无论是何种起源，这都是传统的硅材料，以及石墨烯等层状材料中从未观察到的奇异现象。该论文发表在Appl. Phys. Lett. 102, 081602 (2013)，并得到了Nature China的highlight报道。



硅烯薄膜的疑似超导能隙：(a) 在硅烯薄膜表面和Ag单晶表面分别测得的STS谱；(b) 在硅烯表面不同位置测得的能隙谱，显示出超导态的空间均一性；(c) 硅烯表面超导能隙随温度的变化图

Silicene is a new allotrope of silicon in a two dimensional honeycomb structure analogous to graphene. It does not exist in nature but has been successfully fabricated on metal Ag(111) recently. Experiments reveal similarities between silicene and graphene: honeycomb structure, linear dispersion of the electron band. Based on these results, some further interesting studies have been proceeded during last two years.

1. The $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ honeycomb of silicene monolayer on Ag(111) was found to undergo a phase transition to two types of mirror-symmetric boundary-separated rhombic phases at temperatures below 40 K by scanning tunneling microscopy, which is originating from the weak dispersive interaction between the Si atom and the Ag substrate, indicated the unusual superstructure and electronic properties of silicene.
2. The evidence of Dirac Fermion chirality of silicene was found through the observation of stronger power law decay of quasiparticle interference (QPI) patterns than that in two-dimensional electron gas (2DEG). In contrast to the trigonal warping of Dirac cone in graphene, we found that the Dirac cone of silicene is hexagonally warped. Our results demonstrate that the $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ phase is an ideal system to investigate the unique Dirac Fermion properties of silicene.
3. A possible superconducting gap, about 35meV, was observed in silicene on Ag(111) substrate by scanning tunneling spectroscopy. The temperature-dependence measurement reveals a superconductor-metal transition in silicene and gives a critical temperature of 35–40K, higher than all other single-element superconductors discovered so far. The fundamental understanding of superconductivity in silicene is still unknown and need to be investigated.



SF10

表面激发动力学和能源应用

Surface Excitation and Energy Conversion

组长/Leader:

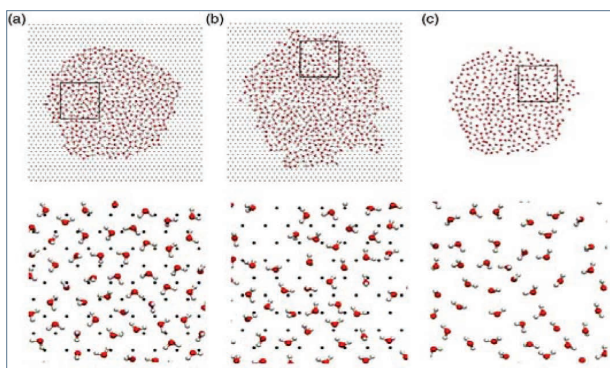
孟胜 Sheng Meng

组员/Group Members:

李晖 Hui Li 孙家涛 Jiatao Sun

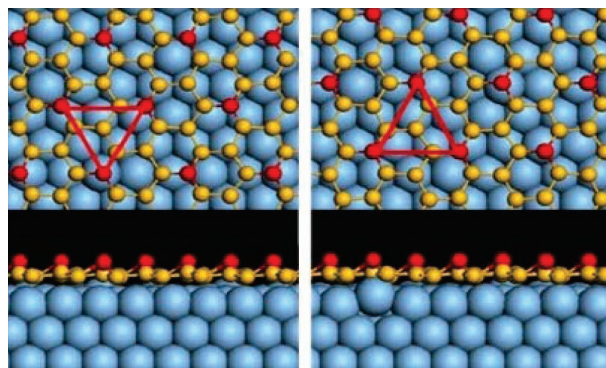
Selected Scientific Results

1. 发现了晶格诱导的亲水性。通过分子动力学模拟发现水在不同晶格常数的固体表面浸润性不同，且不单调变化。表面晶格与水匹配时呈现了奇特的浸润角极小现象，为从微观上调节材料浸润性提供了新方向。



(左图：不匹配晶格上的第一层水结构；中间：匹配晶格上的第一层水结构；右图：体相水的结构)

2. 外延硅烯的结构和性质的第一原理研究。成功解释了硅烯的 $\sqrt{3}$ 重构的原因，并且指出这种相与衬底作用较弱，近似于自由硅烯，能更好的保持硅烯本身独特的物理特性。预测一种有能隙的双层硅烯结构。发现层状硅材料是良好的锂离子存储电极材料。



银表面硅烯的两种 $\sqrt{3}$ 重构的原子结构

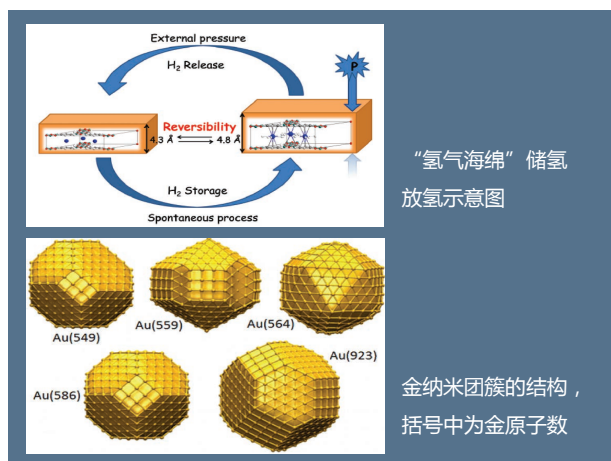
3. 能源应用方面：

i)开发了一套第一性原理动力学预言太阳能电池器件总效率的方法，即“虚拟太阳能电池”，得到的理论值与实验值的差别小于2%；

ii) 精确测定太阳能电池界面分子构型相对比例，人为调控原子尺度界面结构，提高太阳能电池效率（从2%到6%）；

iii)发现“氢气海绵”：金属插层有机共价框架物是一种新的三维储氢材料，能够像“海绵”吸水一样吸取氢气、受压释放。

iv)澄清了直径为1-3.5nm的金团簇的原子结构，发现3nm左右发生从Ih到fcc的结构转变，但金团簇仍具有催化性质。



1. Lattice-induced hydrophilicity. We find from molecular dynamics studies that liquid water on a range of model surfaces with different lattice constant have different wettability. In particular, a contact angle minimum is rendered when the surface lattice matches that of O-O distance in water. This provides new ways to tune surface hydrophilicity at the atomic scale.
2. First principles study on epitaxial silicene. The $\sqrt{3}$ reconstruction of epitaxial silicene structure is explained. Moreover such a reconstruction suggests the interaction between silicene and substrate is weak, so that the intrinsic properties of free silicene can be maintained. We also predicted a bilayer-silicene semiconductor and silicene based anode for lithium ion battery.
3. For energy applications: i) We designed a “virtual solar cell”, namely, a set of algorithms that predict solar cell frequencies from first principle quantum dynamic simulations. A difference of 2% is found between predicted and measured efficiency. ii) We precisely measured the proportion of surface binding configurations of dye molecules in dye solar cells. Optimal control of molecular adsorption configuration renders an increase in solar cell efficiency from 2% to 6%. iii) We predicted a new hydrogen storage material: “H₂ sponge”, based on three dimensional metal incorporated covalent organic framework. It adsorbs H₂ molecules automatically and release them upon pressure. iv) We illustrate the atomic structure of gold nanoclusters with a diameter from 1 to 3.5 nm. A Ih to fcc structure transition is found at a diameter of 3 nm, while all clusters maintain catalytic properties.



04 国际合作与学术交流

出访情况

序号	出访人员	职务	出访时间	出访地点
1	冯宝杰	博士生	2013.09-2014.03	美国加州大学欧文分校
2	郭 阳	副研究员	2014.03	美国加州大学欧文分校
3	赵继民	副研究员	2014.03	美国加州大学伯克利分校
4	李 晖	副研究员	2014.03	内布拉斯加大学林肯分校
5	魏家科	博士生	2014.03-2015.08	美国亚利桑那州立大学
6	马 薇	博士生	2014.03-2015.02	加州州立大学北岭分校及哈佛大学
7	朱重钦	博士生	2014.03-2014.06	内布拉斯加大学林肯校区
8	赵继民	副研究员	2014.05	爱尔兰都柏林三一学院
9	胡旻卉	博士后	2014.10-2014.12	美国阿肯色大学
10	陈 岚	副研究员	2014.11-2014.12	澳大利亚卧龙岗大学

来访情况

序号	来访人员	职务	机构	来访时间
1	Ward Plummer	Professor	Louisiana State University, USA	2013.04,2013.07 2013.12,2014.06
2	Jiandi Zhang	Professor	Louisiana State University, USA	2013.05-2013.07 2014.05-2014.07
3	Dmitri Golberg	Professor	National Institute for Material Science, Japan	2013.06
4	Jak Chakahalian	Professor	University of Arkansas, USA	2013.07 2014.06-2014.09
5	Kyle Shen	Professor	Cornell University	2013.07
6	Xiaoqing Pan	Professor	University of Michigan-Ann Arbor	2013.07
7	T. Zachariah Ward	Professor	Oak Ridge National Laboratory	2013.07
8	Jinyue Liu	Professor	Arizona State University, USA	2013.10
9	Andrew Hodgson	Professor	University of Liverpool, UK	2014.01
10	Paul Gao	Associate Professor	University of CT, USA	2014.03
11	Steven Cundiff	Professor	JILA, National Institute of Standards and Technology and University of Colorado	2014.03
12	Thomas Frauenheim	Professor	Bremen University, Germany	2014.03
13	Andrey Oreshkin	Professor	Moscow State University, Russian	2014.03-2014.06
14	Wei Xiong	Postdoctor	JILA, University of Colorado at Boulder	2014.04
15	Zhenchuan Kang	Professor	RE-POWER TECH. USA	2014.08 -2014.10
16	Franz Kaertner	Professor	Center for Free-Electron Laser Science, University of Hamburg, Massachusetts Institute of Technology	2014.08
17	Noejung Park	Professor	Ulsan National Institute of Science and Technology, Korea	2014.08
18	Bibek Adhikari	PhD candidate	University of Stuttgart	2014.08-2014.11
19	Andrea Cavalleri	Professor	Max Planck Institute & University of Oxford	2014.12

国际会议

序号	姓名	会议名称	时间	报告题目	地点
1	白雪冬	The 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing	2013.08.04 -2013.08.09	Electrical, optical and ion electromigration studies of nanomaterials by in-situ TEM	夏威夷 美国
2	白雪冬	International Conference on Electron Microscopy	2014.07.09 -2014.07.11	In situ TEM Technique and Its Applications on Nano Research	新德里 印度
3	白雪冬	The American Vacuum Society 61st International Symposium and Exhibition	2014.11.09 -2014.11.14	Development and Applications of SPM inside TEM	巴尔的摩 美国
4	白雪冬	The 2014 Materials Research Society Fall Meeting	2014.11.30 -2014.12.05	Structural and Physical Properties of Nanomaterials Studied by In-Situ TEM Method	波士顿 美国
5	宫会期	American Physical Society March Meeting	2013.03.18 -2013.03.22	Highly enhanced green emission of ZnO via plasmonic resonance of a tungsten tip	巴尔的摩 美国
6	赵继民	American Physical Society March Meeting	2013.03.18 -2013.03.22	Critical Role of Modal Spatial Overlap in Nanoscale Nonlinear Optics	巴尔的摩 美国
7	赵继民	The 1 st Germany-China young scientist symposium on ultrafast light sources and spectroscopy applications	2013.06.24 -2013.06.26	Purely coherent nonlinear optical response in graphene sheets-- Spatial self-phase modulation	汉堡 德国
8	赵继民	The 7th International Conference on Materials for Advanced Technologies	2013.06.30 -2013.07.05	Purely coherent nonlinear optical response in graphene sheets: Spatial self phase modulation	新加坡
9	赵继民	American Physical Society March Meeting	2014.03.03 -2014.03.07	Coherent A_{1g} Phonon in $\text{FeSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$: $\pi/2$ Phase Difference across Superconducting Phase Transition	丹佛 美国
10	赵继民	SPIE Optics and Photonics 2014	2014.08.17 -2014.08.21	Ultrafast spectroscopy toward generating coherence in a few quantum materials	圣地亚哥 美国
11	周智	American Physical Society March Meeting	2014.03.03 -2014.03.07	Probe DNA-Cisplatin Interaction with Solid-State Nanopores	丹佛 美国

序号	姓名	会议名称	时间	报告题目	地点
12	郭建东	International Workshop on Functionality of Complex Materials in an Environment of Reduced Dimensionality or Broken Symmetry	2013.07.18 -2013.07.19	The Control of Cation Stoichiometry in MBE Growth of Complex Oxide Films	北京 中国
13	胡旻卉	American Physical Society March Meeting	2014.03.03 -2014.03.07	Dielectric and ferroelectric properties of SrTiO ₃ /Si heterostructure controlled by cation concentration; Preparation and characterization of SrCoO ₃ heterostructures grown along the (111) direction	丹佛 美国
14	吴克辉	The 4th ICQs Joint Annual Workshop on Spintronics	2014.06.02 -2014.06.03	Persistent Dirac electron state in Si-based material	北京 中国
15	吴克辉	The OCPA8 International Conference on Physics Education and Frontier Physics	2014.06.23 -2014.06.27	Persistent Dirac fermion state in bulklike Si(111)	新加坡
16	吴克辉	5th Australia-China Symposium for Materials Science	2014.07.21 -2014.07.23	Persistent Dirac fermion state in bulklike Si(111)	卧龙岗 澳大利亚
17	吴克辉	ICAM -China Summer School -- The new developments in condensed matter physics	2014.08.19 -2014.08.26	Structure and electronic structure of silicene	威海 中国
18	吴克辉	The 1st International Conference on Two-Dimensional Layered Materials	2014.10.12 -2014.10.15	Reversible Hydrogen adsorption on silicene	杭州 中国
19	陈 岚	American Physical Society March Meeting	2013.03.18 -2013.03.22	Quasiparticle Interference in Silicene on Ag(111) Surface	巴尔的摩 美国
20	陈 岚	The 4th International Meeting on Silicene	2014.06.10 -2014.06.12	STM investigation of multilayer silicene on Ag(111)	北京 中国
21	陈 岚	The 7th International Conference on Materials for Advanced Technologies	2013.06.30 -2013.07.05	Experimental Realization and Characterization of Silicene	新加坡
22	孟 胜	ChinaNano 2013	2013.09.05 -2013.09.07	Breaking the bottleneck: unraveling energy mechanism at nanoscale	北京 中国
23	孟 胜	International Conference On Water Sciences	2014.04.14 -2014.04.17	Atomic scale water wetting	北京 中国

序号	姓名	会议名称	时间	报告题目	地点
24	孟 胜	Conference on Energy, Materials, Nanotechnology (EMN)	2014.06.08 -2014.06.13	Quantum interactions at surfaces and materials design	坎昆 墨西哥
25	孟 胜	CECAM-ZnO	2014.06.22 -2014.06.28	Precise Predicting and Tuning Structure-Function Relationship on Oxide Surfaces	不莱梅 德国
26	孟 胜	1-st Asia-Pasific Symposium on Solid Surfaces	2014.09.27 -2014.10.03	Precise Tuning Quantum Interactions and Quantum Dynamics at Solid Surfaces	海参崴 俄罗斯
27	孟 胜	The 4 th international meeting on quantum energy	2014.08.04 -2014.08.0	Electron dynamics in solar cells and photocatalysis	成都 中国
28	孟 胜	The 17th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations	2014.11.01 -2014.11.06	Excited state dynamics at photovoltaic and photocatalytic interfaces	首尔 韩国
29	李 晖	The 7th International Conference on Materials for Advanced Technologies	2013.06.30 -2013.07.05	Reconstruction of Silicene on Substrates: A First-Principles Calculation	新加坡
30	李 晖	International Conference On Water Sciences	2014.04.14 -2014.04.17	The first-principles molecular dynamics simulations of surface wetting and confined water/ice	北京 中国
31	李 晖	The 4th International Meeting on Silicene	2014.06.10 -2014.06.12	A First Principles Investigation on Multilayer Silicene	北京 中国
32	李 晖	The Second International Workshop on Computational Science and Engineering	2014.12.12 -2014.12.17	Multilayer Silicene: A Bottom-up Approach to Si(111) Surface	香港 中国
33	张 帆	ChinaNano 2013	2014.08.04 -2014.08.0	Manipulating Dye Adsorption Geometry for Dye Solar Cells	北京 中国
34	朱重钦	American Physical Society March Meeting	2014.03.03 -2014.03.07	Quantized Water Transport: Ideal Desalination through Graphyne-4 Membrane	丹佛 美国
35	马 薇	American Physical Society March Meeting	2014.03.03 -2014.03.07	Modeling recombination processes and predicting energy conversion efficiency of dye sensitized solar cells from first principles	丹佛 美国
36	张 帆	65th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistr	2014.08.31 -2014.09.05	Identification and Manipulation of Adsorption Geometry of Organic Dye on Nanocrystalline TiO ₂ Films for Improved Photovoltaic Performances	洛桑 瑞士

国内会议

序号	姓名	会议名称	时间	报告题目	地点
1	白雪冬	2013年纳米、表面和Graphene科学与技术全国会议	2013.12.20 -2013.12.22	电阻开关效应的原位透射电镜研究	香港
2	白雪冬	中国化学会第29届学术年会	2014.08.04 -2014.08.07	原位透射电镜纳米表征技术与科研进展	北京
3	白雪冬	2014年全国电子显微学会议	2014.10.14 -2014.10.18	纳米材料物理性质的原位透射电镜研究	南宁
4	王文龙	中国物理学会2014年秋季学术会议	2014.09.11 -2014.09.14	Light-Element Magnetism in Carbon Doped Boron Nitride Nanosheets and Related Systems	哈尔滨
5	王文龙	第八届功能聚合物纳米材料研讨会	2014.10.09 -2014.10.12	硼碳氮低维材料中的轻元素磁性及其化学调控	井冈山
6	陆兴华	中国化学会第29届学术年会	2014.08.04 -2014.08.07	Control rotational oscillation of a single molecule by molecular charge state	北京
7	赵继民	第十九届全国半导体物理学术会议	2013.07.14 -2013.07.18	Spatial Self-Phase Modulation in Graphene-related Materials: Coherent Response & Remarkably Large $\chi^{(3)}$	威海
8	赵继民	第十七届全国光散射学术会议	2013.10.19 -2013.10.22	Purely Coherent Nonlinear Optical Response from Graphene Sheets: Spatial Self-Phase Modulation	西安
9	胡颖	中国物理学会2013年秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	The implementation of electronic circuit for DNA ping-pong control in a solid-state nanopore	厦门
10	胡颖	中国物理学会2014年秋季学术会议	2014.09.11 -2014.09.14	固态纳米孔中DNA分子折返运动的精确控制	哈尔滨
11	周智	中国物理学会2013年秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	固态纳米孔研究DNA和顺铂的相互作用	厦门
12	周智	中国化学会第29届学术年会	2014.08.04 -2014.08.07	利用氮化硅纳米孔研究DNA和顺铂分子的相互作用	北京
13	周智	中国物理学会2014年秋季学术会议	2014.09.11 -2014.09.14	超薄纳米孔的制备及其在DNA探测中的应用	哈尔滨
14	郭建东	中国物理学会2014年秋季学术会议	2014.09.11 -2014.09.14	分子束外延生长SrTiO ₃ 薄膜的精确控制	哈尔滨
15	郭建东	中国真空学会2014学术年会	2014.11.07 -2014.11.09	能量/动量二维解析高分辨率电子能量损失谱仪的研制及其应用	广州
16	王炜华	中国物理学会2014年秋季学术会议	2014.09.11 -2014.09.14	金属-分子接触对分子电子态的调控	哈尔滨

序号	姓名	会议名称	时间	报告题目	地点
17	胡旻卉	中国物理学会2013秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	Interface characterization, optical and thermal properties of multilayer mirrors	厦门
18	朱学涛	中国物理学会2013秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	能量/动量二维解析的高分辨电子能量损失谱仪	厦门
19	李琳	中国物理学会2013秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	La _{2/3} Sr _{1/3} MnO ₃ 超薄薄膜低温下再次进入的绝缘相的研究	厦门
20	杨芳	中国物理学会2013秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	阳离子化学计量比调控Si上SrTiO ₃ 薄膜的介电性质	厦门
21	刘书铭	中国物理学会2013秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	水在Fe ₃ O ₄ 薄膜表面上的分解	厦门
22	李文涛	中国物理学会2013秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	SrTiO ₃ (110)表面的水吸附和分解	厦门
23	陈岚	中国物理学会2013秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	Experimental realization and characterization of silicene	厦门
24	陈岚	2013年纳米、表面和 Graphene 科学与技术全国会议	2013.12.20 -2013.12.22	Ag(111)表面硅烯的生长和电子态研究	香港
25	陈岚	中国真空学会2014学术年会	2014.11.07 -2014.11.09	Reversible hydrogenation of monolayer silicene on Ag(111)	广州
26	孟胜	第十九届全国半导体物理学术会议	2013.07.14 -2013.07.18	Simulating interface electron dynamics in dye solar cells	威海
27	孟胜	中国化学会第29届学术年会	2014.08.04 -2014.08.07	Precise Predicting and Tuning Structure- Function Relationship for Energy Conversion	北京
28	孟胜	中国物理学会2014秋季学术会议	2014.09.11 -2014.09.14	Quantum interaction between water and gold cluster for water photocatalysis	哈尔滨
29	李晖	中国物理学会2013秋季学术会议	2013.09.12 -2013.09.15	硅烯在Ag(111)表面重构的计算研究	厦门
30	孙家涛	2013年纳米、表面和 Graphene 科学与技术全国会议	2013.12.20 -2013.12.22	吸附物和基底界面上的电子结构的修饰	香港
31	孙家涛	新兴电子材料和器件物理国际研讨会	2014.06.10 -2014.06.13	Generating valley polarized currents in thin silicon films	上海
32	孙家涛	中国物理学会2014秋季学术会议	2014.09.11 -2014.09.14	吸附物和基底界面上的电子结构的修饰	哈尔滨
33	张帆	中国化学会第29届学术年会	2014.08.04 -2014.08.07	染料太阳能电池的界面调控	北京

国内学术组织任职

序号	姓名	任职情况	任期
1	郭建东	中国物理学会表面界面物理专业委员会 秘书长	2011.12-
2	郭建东	中国真空学会 常务理事	2014.12-

国际期刊任职

序号	姓名	任职情况	任期
1	白雪冬	Journal of Nanomaterials, 编委	2008-
2	白雪冬	Nanoscience and Nanotechnology-Asia, 编委	2011-
3	陆兴华	美国物理联合会 “Review of Scientific Instruments”, 副主编	2012-
4	郭建东	International Journal of Modern Physics B; Modern Physics Letters B, 编委	2007-
5	郭建东	Frontiers of Physics, 编委	2012-
6	孟 胜	Chemical Physics, 编委	2014-
7	孟 胜	International Journal of Photoenergy, 编委	2014-

国内期刊任职

序号	姓名	任职情况	任期
1	白雪冬	《材料科学》编委	2011-

表面物理系列学术报告

序号	报告人	报告题目	机构
1	Dr.Weihua Wang (王炜华)	Investigation of Single Molecular Electronic Structure by Low-temperature STM	Department of Physics, Hong Kong University of Science and Technology
2	Dr.Lin He (何林)	Defect Engineering of Graphene	Department of Physics, Beijing Normal University
3	Dr. Rui He (何睿)	Optical Spectroscopy of Graphene and Topological Insulators	Department of Physics, University of Northern Iowa, United States
4	Prof.Mingshu Chen (陈明树)	Characterization of Catalytically Active Surfaces by In-situ IRAS	Department of Chemistry, College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University
5	Dr. Jiali LI	Developing Solid-State Nanopore Device for Single Molecule DNA Sequencing	Department of physics, University of Arkansas
6	Dr.Junguang Tao (陶俊光)	TiO ₂ 表面修饰及其电子特性的研究	Institute of Materials Research and Engineering, Singapore
7	Dr. Wei-Li Lee	Thermoelectric Property in Bilayer Graphene	Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei
8	Prof. Michael F. Crommie	Exploring Atomically-Engineered Graphene Nanostructures	Department of Physics, University of California, Berkeley
9	Dr. Renu Sharma	Dynamic observations of gas-nanoparticle Interactions Using Environmental Scanning Transmission Electron Microscopy	Center for Nanoscale Science and Technology, National Institute of Standards and Technology, U. S. A
10	Dr. Wang Zhengfei (王征飞)	Organic Topological Insulators in Organometallic Lattices	Department of Materials Science and Engineering, University of Utah
11	Dr. Zhong Zhicheng (钟志诚)	Two Dimensional Electron Gas in Oxide Heterostructures	Institute of Solid State Physics, Vienna University of Technology, Austria
12	Dr. Jaeil Bai	Novel Low Dimensional Water and Silicon Nanostructures	Department of Chemistry, University of Nebraska at Lincoln


序号	报告人	报告题目	机构
13	Prof. Andrew Hodgson	A Microscopic Picture of Water and Wetting at Metal Interfaces	Department of Chemistry at Liverpool
14	Dr. Pu-Xian Gao	Scalable 3-D Nanostructure Array Integration and Manufacturing: A Nanomaterials Roadmap toward Ultrahigh Efficiency, Robustness, and Multi-functionality	Department of Materials Science and Engineering & Institute of Materials Science, University of Connecticut
15	Dr. Thomas Frauenheim	DFTB+ - An approximate DFT method: Applications to Computational Nanomaterials	Bremen Center for Computational Materials Science, University of Bremen
16	Dr. Steven T. Cundiff	Optical Two-Dimensional Coherent Spectroscopy	JILA, National Institute of Standards and Technology and University of Colorado
17	Dr. Wei Xiong	Studying Ultrafast Dynamics of Free Standing Nanoparticles	JILA, University of Colorado at Boulder, University of California, San Diego
18	Prof. Jianjun WANG (王健君)	Investigating Anti-icing Surfaces: From Fundamentals to Applications	Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences
19	Prof. Franz X. Kärtner	Advanced Timing Distribution and Light Wave Synthesis	Center for Free-Electron Laser Science, Deutsches Elektronen-Synchrotron Physics Department and the Hamburg Center for Ultrafast Imaging, University of Hamburg Department of Electrical Engineering and Computer Science and Research Laboratory of Electronics, Massachusetts Institute of Technology
20	Dr. Lauren F. Greenlee	Nanotechnology for Water and Energy	National Institute of Standards and Technology (NIST)
21	Dr. Noejung Park	Electronic structure calculations within or beyond Born-Oppenheimer approximation for energy storage and energy conversion	Department of Physics, Ulsan National Institute of Science and Technology
22	Dr. Shaowei Li	Rotational Spectromicroscopy with Scanning Tunneling Microscope	University of California, Irvine
23	Dr. Ding Pan (潘鼎)	Dielectric Properties of Water under Extreme Conditions	Institute for Molecular Engineering, the University of Chicago
24	Prof. Andrea Cavalleri	Condensed Matter Department, Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter	Department of Physics, University of Oxford

表面物理半月谈

序号	报告人	报告题目
1	杨是赧	纳米线压电电子学及其器件应用
2	王立芬	锂离子电池负极材料锂化机制的原位透射电子显微镜研究
3	冯 硝	Search for the quantum anomalous hall effect
4	彭俊平	热电效应
5	邱静岚	Controlling single atom or molecule kondo effect by STM
6	王 浩	科恩异常
7	胡 颖	聪明的DNA--DNA纳米科技
8	张慧敏	二类超导体中的磁通
9	魏家科	Scanning transmission electron microscopy
10	欧云波	Landauer-Büttiker Formalism
11	张 帆	Perovskite solar cell
12	田义超	Femtosecond time-resolved measurement
13	李文涛	表面等离子激元(Surface Plasmons)
14	于同旭	The Three Musketeers-Spin Liquid, Glass & Ice
15	马 薇	Advanced Solar Cells
16	朱重钦	Membranes for water treatment
17	高 飞	Metal catalysts for methane activation
18	汤辰佳	二维体系中的拓扑相变——KT相变
19	董 立	超快时间分辨扫描隧道显微镜简介
20	黄永峰	液固界面相互作用：固体表面水滴和油滴的静态形状
21	张立果	约瑟夫森效应及其应用
22	李 志	STM在超导研究中的应用
23	齐 阔	Lorentz Transmission Electron Microscope
24	吴艳玲	Coherent Phonon
25	张文号	Interface superconductivity
26	李晓敏	环境透射电子显微镜
27	赵立山	Liquid Liquid Transition in Water
28	黄前明	Crystallographic Symmetry Group
29	关佳其	Quantum Well States in 2D Metal Films
30	孙慕华	Electron Energy -Loss Spectroscopy in TEM
31	钟 青	The pursuit of Majorana fermions in solid state systems
32	付会霞	Two-Dimensional Nanomaterials
33	徐 阳	Graphene Transistors


主办国际会议

中国科学院物理研究所
Institute of Physics Chinese Academy of Sciences



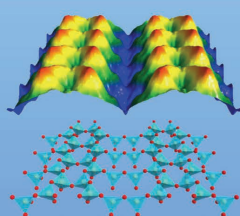
International Workshop on
Functionality of Complex Materials in an Environment of Reduced Dimensionality or Broken Symmetry

Beijing Part:
July 18th-19th, 2013
Meeting Room 234, Building M, IOP, CAS

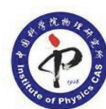


Invited Speakers:

Qikun XUE	<i>Tsinghua University</i>
E.Ward PLUMMER	<i>Louisiana State University</i>
Zhong FANG	<i>Institute of Physics CAS</i>
René MATZDORF	<i>University of Kassel</i>
Jak TCHAKHALIAN	<i>University of Arkansas</i>
Donglai FENG	<i>Fudan University</i>
Kyle SHEN	<i>Cornell University</i>
Yihong WU	<i>National University of Singapore</i>
Xiaoqing PAN	<i>University of Michigan-Ann Arbor</i>
Xi DAI	<i>Institute of Physics CAS</i>
Jinfeng JIA	<i>Shanghai Jiao Tong University</i>
T. Zac WARD	<i>Oak Ridge National Laboratory</i>
Changgan ZENG	<i>Univ. of Science and Technology of China</i>
Tom WU	<i>King Abdullah Univ. of Science and Technology</i>
Jiandi ZHANG	<i>Louisiana State University</i>
Zhaoliang LIAO	<i>Louisiana State University</i>
Jiandong GUO	<i>Institute of Physics CAS</i>



Organizer: State Key Laboratory for Surface Physics, Institute of Physics, CAS
中国科学院物理研究所表面物理国家重点实验室
Contact: Ms. QiuHong LI (Email: surface@iphy.ac.cn, 010-82649428)



Center for International Collaboration of IOP/CAS
中国科学院物理研究所国际合作研究中心

The Center for International Collaboration of Institute of Physics (IOP), Chinese Academy of Sciences (CAS), invites outstanding international scientists to visit IOP regularly and initiate research collaborations with local scientists. It also organizes international workshops on a variety of research topics on a regular basis.

The 4th International Meeting on Silicene

11 - 13 June, 2014

Room M236, Second Floor, Building M,
Institute of Physics, Chinese Academy of Science, Beijing, China

Invited Speakers from Abroad:

Hamid Oughaddou, University Paris Sud
Antoine Fleurence, Japan Advanced Institute of Science and Technology
Lok C. Lew Yan Voon, Military College of South Carolina
Guy Le Lay, Aix-Marseille Université
Yi Du, University of Wollongong
W. F. Tsai, Natl Sun Yat Sen University
Patrick Vogt, Technische University Berlin
Paola De Padova, Consiglio Nazionale delle Ricerche-ISM
Bene Poelsema, University of Twente
Andrew Mayne, Universite Paris Sud
Azeddine Bendounan, French synchrotron
Bernard Aufray, Aix Marseille University
Haik Jamgotchian, Aix Marseille University
Ganapathy Baskaran, Perimeter Institute for Theoretical Physics
Frank Wiggers, MESA+ Institute for Nanotechnology

Invited Speakers from China:

Yugui Yao, Beijing Institute of Technology
Lan Chen, Institute of Physics, CAS
Yeliang Wang, Institute of Physics, CAS
Hui Li, Institute of Physics, CAS
Jijun Zhao, Dalian University Technology
Xiaodong Pi, Zhejiang University
Jing Lu, Peking University
Jun Ni, Tsinghua University
Baojie Feng, Institute of Physics, CAS

Organizers:

Prof. Kehui Wu, Institute of Physics, CAS
Prof. Xi Dai, Institute of Physics, CAS
Prof. Hongjun Gao, Institute of Physics, CAS
Prof. Abdelkader Kara, University of Central Florida
Contact:
Miss Qi Fu, Tel: 010-82649469; Email: fuqi@iphy.ac.cn

05 部分科研项目

序号	项目名称	负责人	项目来源	时间
1	原位透射电镜光电测试系统的研制	白雪冬	基金委科学仪器基础研究专项	2011-2013
2	基于扫描探针技术的纳米表征新方法研究	白雪冬 (首席科学家)	科技部国家重大科学研究计划	2012-2016
3	轻元素硼碳氮低维材料的控制合成与电子结构调控研究	王文龙	基金委优秀青年科学基金	2014 -2016
4	复杂纳米体系的凝聚行为、输运过程及应用技术研究	曹则贤 (首席科学家)	国家重点基础研究发展计划	2009-2013
5	水-微颗粒复合体系中的输运行为研究	曹则贤	中国科学院知识创新工程重要方向项目	2011-2013
6	体相水结构与物性的多尺度研究	曹则贤	基金委重大项目	2013-2017
7	电子自旋共振扫描隧道显微镜的研制	陆兴华	基金委科学仪器基础研究专项	2011-2013
8	超快激光耦合扫描隧道显微镜技术与应用研究	陆兴华 (课题负责人)	科技部国家重大科学研究计划	2012-2016
9	表面吸附水分子的超快光激发动力学研究	陆兴华	中国科学院知识创新工程重要方向项目	2012-2013
10	量子材料超快光谱的先进激光技术	赵继民	中国科学院知识创新工程重要方向项目	2014-2016
11	能量/动量二维解析的新型高分辨电子能量损失谱仪	郭建东	基金委科学仪器基础研究专项	2011-2013
12	功能关联电子材料的局域效应与集体激发行为研究	郭建东 (课题负责人)	科技部国家重大科学研究计划	2012-2016

序号	项目名称	负责人	项目来源	时间
13	复杂过渡金属氧化物人工低维结构	郭建东	基金委杰出青年科学基金	2013-2016
14	拓扑与超导新物态调控	郭建东 (课题负责人)	中国科学院战略性先导科技专项(B类)	2014-2018
15	拓扑有序材料的制备和性质调控	吴克辉 (课题负责人)	中国科学院战略性先导科技专项(B类)	2014-2018
16	拓扑有序态及其新奇量子效应研究	吴克辉 (课题负责人)	科技部国家重大科学研究计划	2012-2017
17	拓扑绝缘体材料设计与实现及新效应探索	吴克辉	中国科学院知识创新工程重要方向项目	2011-2014
18	硅烯的基础物理研究	吴克辉	基金委重点项目	2014-2018
19	新型低维体系的物性研究和调控	陈 岚	基金委优秀青年科学基金项目	2013-2016
20	异质界面诱导的新奇量子现象及调控	孟 胜 (课题负责人)	科技部国家重大科学研究计划	2012-2016
21	固体表面水浸润现象的微观尺度研究	孟 胜	中国科学院知识创新工程重要方向项目	2012-2013
22	宏观量子态的表面与界面调控	孟 胜	科技部国家重大科学研究计划	2014-2018
23	水的微观性质的理论计算与数值模拟研究	孟 胜	基金委重大项目	2013-2017

06 人才引进及培养

2013-2014年引进人才介绍



王炜华
WEIHUA WANG

王炜华，2003年7月毕业于中国科学技术大学物理系，获应用物理学学士学位，2003年至2008年在中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室硕博连读，并于2012年获得物理学博士学位。2009年至2014年在香港科技大学物理系进行博士后研究工作，2014年5月加入物理所，现任副研究员。主要研究方向为用低温超高真空扫描隧道显微镜研究金属表面吸附的单个有机分子，有机分子低聚物及组装结构的物理化学性质，过渡金属氧化物表面及过渡金属氧化物表面纳米结构的物理性质。代表性工作包括：利用单个金属原子-分子接触调控分子的局域电子态 (*Phys. Rev. Lett.* 105, 126801, 2010) ；利用多重金属-分子接触调控分子的非局域电子态 (*Phys. Rev. Lett.* 110, 046802, 2013) ；测量联苯分子中的超交换耦合强度 (*J. Am. Chem. Soc.* 132, 8774, 2010) ；在单分子尺度确定了表面催化的Ullmann聚合反应的一个中间体结构 (*J. Am. Chem. Soc.* 133, 13264, 2011) 。

Weihua Wang obtained his bachelor's degree in applied physics from University of Science and Technology of China in 2003, and then he joined Hefei National Laboratory for Physical Sciences at the Micro Scale, University of Science and Technology of China for his Ph.D. study, and obtained his doctor's degree in 2012. He did 5-year post-doctoral research in the Hong Kong University of Science and Technology from 2009 to 2014. He joined the Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences and became an associate professor in May, 2015. His major research interests are investigating the physical and chemical properties of single molecules, oligomers and molecular networks on metal surfaces, and characterizing the physical properties of transition metal oxide

surfaces and nanostructures on transition metal oxide substrates by ultra-high vacuum low temperature scanning tunneling microscope. His representative works are listed as following: manipulating localized molecular orbitals by single-atom contacts (Phys. Rev. Lett. 105, 126801, 2010); cooperative modulation of electronic structures of aromatic molecules coupled to multiple metal contacts (Phys. Rev. Lett. 110, 046802, 2013); probing electronic superexchange coupling at isolated poly-p-phenylene molecules (J. Am. Chem. Soc. 132, 8774, 2010); revealing an organometallic intermediate in a surface-supported Ullmann coupling reaction with single-molecule resolution (J. Am. Chem. Soc. 133, 13264, 2011).



孙家涛

JIATIAO SUN

孙家涛博士，1980年7月出生于山东省栖霞市，1998年至2005年在山东大学材料科学与工程系学习并获得学士学位和硕士学位；2008年毕业于中科院物理所纳米实验室，获得博士学位；随后至新加坡国立大学和美国犹他大学从事博士后研究。2013年底加入表面物理国家重点实验室SF10组，任副研究员。现有以下方面的研究：利用第一性原理计算，分析表面分子吸附及自组装机理、界面电子结构及其输运的调控；结合实空间万尼尔函数研究新型量子材料波函数的物理性质。主要成果有发现并解释了边界重构引起的巨大能隙，理论上解释了分子吸附诱导的Au(111)表面重构变化等。曾在PRL, PRB, APL等杂志以第一作者发表论文20余篇。



朱学涛

XUETAO ZHU

朱学涛，2004年07月毕业于北京师范大学，获得理学学士学位；2011年01月毕业于波士顿大学，获得物理学博士学位；2011年01月至2012年02月在波士顿大学物理系做博士后；2012年03月至2015年02月在中国科学院物理研究所任“国际青年学者计划”博士后；2015年03月加入物理所，任副研究员。主要研究方向为：新材料的表面动力学实验观测与理论计算，材料表面的电子-声子相互作用等。代表性工作包括：拓扑绝缘体表面的声子动力学(Phys. Rev. Lett. 107, 186102, 2011)及电子-声子耦合(Phys. Rev. Lett. 108, 185501, 2012)；电荷密度波的成因，特别是电子-声子耦合在二维电荷密度波材料中的具体贡献(PNAS 112,2367,2015)；多铁材料的表面结构和动力学异常行为的研究(Surf. Sci. 604, 692, 2010; Surf. Sci. 605, 376, 2011)等。

Xuetao Zhu obtained his bachelor's degree from Beijing Normal University in 2004, and finished graduate study at Boston University in 2011 with a Ph.D. degree in Physics. He did one-year postdoctoral research in Boston University from 2011 to 2012. Then he finished postdoctoral research as an International Young Scientist Fellow at the Institute of Physics in Chinese Academy of Sciences from 2012 to 2015. He became an associate professor at the Institute of Physics in Chinese Academy of Sciences since 2015. His major research interests are: experimental investigations and theoretical calculations of the surface dynamical properties of novel materials, and the interaction of electrons and phonons on material surfaces. He has finished several important studies in the following specific fields: phonon dynamics and the electron-phonon coupling on the surface of topological insulators (Phys. Rev. Lett. 107, 186102, 2011; Phys. Rev. Lett. 108, 185501, 2012); the role of electron-phonon coupling on the formation of charge density waves in 2D materials and classification of charge density waves based on their nature (PNAS 112,2367,2015); and the anomalous behavior of the surface structural and dynamical properties of the multiferroic materials (Surf. Sci. 604, 692, 2010; Surf. Sci. 605, 376, 2011).

博士后 Post Doctors

序号	姓名	导师	进出站时间	研究方向	获博士学位时间、机构
1	王劲川	陆兴华、孟胜	2013	单分子与金属纳米颗粒等离子体相互作用 Interaction between single molecule and plasmon of metallic nanoparticles	2012.11 香港理工大学
2	胡昱卉	郭建东	2011.10	激光分子束外延生长复杂氧化物低维结构 Laser MBE growth of low-dimensional complex oxide structures	2011.10 法国巴黎第六大学—皮埃尔和玛丽·居里大学
3	陈建	吴克辉	2013-2015	低维材料的扫描隧道显微学研究 The STM research of low dimensional materials	2013.06 中国科学院大学

毕业生 Alumni

序号	姓名	在读时间	论文题目	所获学位	导师	现在机构
1	王立芬	2009-2014	纳米材料储锂机制的原位透射电镜研究 In-situ TEM studies of lithium storage mechanism in nanomaterial electrodes	博士	白雪冬	美国阿贡国家实验室
2	田学增	2009-2014	阳离子型阻变存储器工作机制的原位透射电镜研究 In-Situ TEM Study Of Working Principles Of Cation-Based Resistive Memories	博士	白雪冬	新加坡国立大学
3	曾敏	2010-2014	几种新型光/电分解水催化剂的制备与性能研究	博士	白雪冬 王文龙	苏州大学
4	杨是贇	2009-2014	原位透射电镜光电测试装置的搭建及其在半导体纳米线研究中的应用 In-Situ Optical and Photoelectrical Measurement Setup and Its Application on Semiconductor Nanowires	博士	王恩哥 白雪冬	美国橡树岭国家实验室
5	赵冲	2009-2014	轻元素硼碳氮二维结构的自旋特性及其化学调控 Spin polarization in light-element (B, C, N) two-dimensional nanostructures and its chemical manipulation	博士	王恩哥 王文龙	华为

序号	姓名	在读时间	论文题目	所获学位	导师	现在机构
6	廖龙光	2009-2013	(准)周期性二维格子的标度变换研究 Research on scaling symmetry of (quasi-) periodic two-dimensional lattices	博士	曹则贤	
7	高奎意	2010-2014	玻色-爱因斯坦凝聚装置的升级及物质波超辐射的起源 Upgrade of the Bose-Einstein condensation apparatus and the origin of matter wave radiation	博士	曹则贤	德国汉堡大学
8	鲁年鹏	2012-2014	大温区恒电阻率单一固体探索 Searching for Single Solids of Constant Electrical Resistivity over Large Temperature Range	博士	曹则贤	清华大学
9	张文彬	2008-2013	纳米颗粒-液体复杂体系行为研究 Behavior of nanoparticle-liquid complex systems	博士	曹则贤	中科院力学所
10	郭晓东	2008-2014	单自旋测控和自旋分辨扫描隧道显微镜的研制 Single Spin Detection and Fabrication of a Spin-Resolved Scanning Tunneling Microscope	博士	陆兴华	公司职员
11	周智	2009-2015	超薄固态纳米孔的制备及DNA与顺铂相互作用的动力学研究 Fabrication ultrathin solid-state nanopore and studying the dynamics of DNA-cisplatin interaction	博士	陆兴华	美国肯塔基大学
12	宫会期	2010-2013	利用光耦合扫描隧道显微镜对半导体发光及分子动力学的研究 Investigation of Semiconductor Luminescence and Molecule Dynamics by Photo-assisted Scanning Tunneling Microscopy	硕士	陆兴华	美国范德堡大学
13	朱蕾蕾	2011-2013	石墨烯衍生材料的空间自相位调制 Spatial Self-Phase Modulation of Graphene-Related Materials	硕士	赵继民 左旭	公司职员

序号	姓名	在读时间	论文题目	所获学位	导师	现在机构
14	吴艳玲	2012-2014	FeSe _{0.5} Te _{0.5} 薄膜超导体中相干态声子的超快光谱研究 Ultrafast spectroscopy study of coherent phonon in FeSe _{0.5} Te _{0.5} thin film superconductor	硕士	赵继民 左旭	中科院物理研究所
15	李琳	2009-2014	(110)取向La _{2/3} Sr _{1/3} MnO ₃ 薄膜的生长和物性的研究 Growth and Properties of La _{2/3} Sr _{1/3} MnO ₃ on SrTiO ₃ (110)	博士	郭建东	荷兰特温特大学
16	刘书铭	2009-2014	金、水与极性金属氧化物薄膜表面的相互作用 The Interaction Between Gold, Water and Polar Surface of Metal Oxide Films	博士	郭沁林	北京育英学校
17	李逢苗	2009-2014	钛酸锶表面再构与薄膜外延生长的热力学和动力学研究 Thermodynamics and Kinetics of the Strontium Titanate Surface Reconstruction and Epitaxial Film Growth	博士	郭建东	University of British Columbia, Canada
18	何小月	2008-2014	硅烯的分子束外延生长及电子性质研究 MBE growth of thin film of topological insulator and investigations of their electronic properties	博士	吴克辉	国家纳米科学中心
19	冯宝杰	2009-2015	拓扑绝缘体薄膜的分子束外延生长及其电子学性质研究 MBE Growth of Silicene and Investigation of Its Electronic Properties	博士	吴克辉	Tokyo University, Japan
20	焦扬	2008-2013	有机染料太阳能电池界面结构和功能关系第一性原理研究 Interface structure and functional relationship in Dye-sensitized solar cells from first-principles	博士	孟胜	Goteberg University, Sweden
21	宋鹏	2008-2013	表面等离子激元与小尺度体系电子输运耦合的研究 Electronic couplings between surface plasmon and electron transport in small structures	博士	孟胜	中科院物理研究所
22	丁子敬	2009-2014	金属团簇在氧化物表面光催化分解水机制的第一性原理研究 Mechanism of water photosplitting catalyzed by metal cluster on oxide surfaces from First-principles	博士	孟胜	新加坡国立大学

在读研究生情况 Graduate Students

序号	姓名	合作导师	入学日期
1	魏家科	白雪冬	2010年09月
2	李晓敏	白雪冬	2011年09月
3	齐 阔	白雪冬	2013年09月
4	孙慕华	白雪冬	2012年09月
5	黄前明	白雪冬	2012年09月
6	陈 潘	白雪冬	2014年09月
7	刘 宇	王文龙	2013年09月
8	于同旭	曹则贤	2013年09月
9	许 腾	曹则贤	2013年09月
10	纪桂萍	曹则贤	2014年09月
11	田义超	陆兴华、赵继民	2010年09月
12	孙 飞	王炜华、赵继民	2014年09月
13	吴 穹	王炜华、赵继民	2014年09月
14	胡 颖	陆兴华	2010年09月
15	李来来	陆兴华	2012年09月
16	李健梅	陆兴华	2013年09月
17	孙立欢	陆兴华	2013年09月
18	董安宁	陆兴华	2014年09月
19	姚一锟	陆兴华	2014年09月
20	高 磊	陆兴华	2014年09月
21	李文涛	郭建东	2010年09月
22	张慧敏	马旭村	2010年09月
23	彭俊平	马旭村	2010年09月
24	欧云波	马旭村	2010年09月
25	关佳其	郭建东、王炜华	2012年09月
26	聂彩娜	马旭村	2012年09月
27	张书源	郭建东	2013年09月
28	刘 冰	郭建东	2013年09月
29	沙九全	郭建东	2013年09月
30	贾 逊	郭建东	2014年09月
31	刘丽霞	郭建东	2014年09月
32	朱 清	郭建东	2014年09月
33	邱静岚	吴克辉	2010年09月

序号	姓名	合作导师	入学日期
34	钟青	吴克辉	2012年09月
35	苟健	吴克辉	2012年09月
36	黎文彬	吴克辉	2012年09月
37	盛少祥	吴克辉	2012年09月
38	杨硕	吴克辉	2012年09月
39	王旭光	吴克辉	2014年09月
40	马薇	孟胜	2010年09月
41	张帆	孟胜	2010年09月
42	朱重钦	孟胜	2010年09月
43	高飞	孟胜	2010年09月
44	黄永峰	孟胜	2011年09月
45	付会霞	孟胜	2012年09月
46	王逸非	孟胜	2012年09月
47	刘剑	孟胜	2013年09月
48	张进	孟胜	2013年09月
49	徐纪玉	孟胜	2014年09月
50	赵鹏	孟胜	2014年09月
51	孟利楠	孟胜	2014年09月

联合培养学生情况

序号	姓名	合作导师	所属单位
1	王浩	王恩哥 王文龙	北京大学
2	赵立山	潘礼庆 王强	北京科技大学
3	吴艳玲	左旭 赵继民	南开大学
4	马瑞萍	窦瑞芬 陆兴华	北京师范大学
5	梁艳	杨浩 郭建东	苏州大学
6	宋锐男	陈向荣 郭建东	四川大学
7	徐阳	周庆 吴克辉	云南大学
8	张圣楠	周庆 吴克辉	云南大学
9	李帅	张伟风 吴克辉	河南大学
10	王虹	蔡喜平 孟胜	黑龙江大学
11	程才	陈向荣 孟胜	四川大学

07 实验设备

低维量子结构表征与操纵平台

表面物理国家重点实验室长期致力于新型电子器件涉及的表面界面基础物理问题的研究，以实验紧密结合理论的方法，聚焦于表面低维量子结构的精确构筑、高分辨率表征与人工设计调控等问题。为整合实验室的理论计算与生长、观测等实验设备资源，于2104年建设了“低维量子结构表征与操纵平台”。平台设备包括：

理论计算	
高性能计算机集群系统 High Performance Computing Platform	<p>该浪潮高性能计算机群主要用于做大规模数值计算，特别是并行计算有关的重大科研项目服务。该集群共有36个计算节点，每个计算节点有两个六核的2.4GHz的Intel Xeon64位处理器及24GB的内存，250G的硬盘，计算的峰值性能为4.2Gflops。管理节点采用同样的cpu配置，但配置了更大的3T硬盘，满足现有的数据存储的要求。所有计算节点同时配备了InfiniBand高速网络连接和千兆以太网连接，带宽高，延迟低，实现了高效并行。在机器运行期间，我们做了大量技术工作，保证了机器可用性和利用率。系统安装了REDHAT操作系统，编译软件安装有intel系列的编译器，并行软件有intelMPI和OpenMPI等，方便用户编译不同的并行程序。同时安装了常用的科学计算软件，如vasp, gromacs, octopus, siesta等等，并根据用户的需求安装相应的软件。这些软件和编译工具都写成module供用户方便使用。</p> <p>The platform includes 36 computing nodes. Each computing node has two Intel XeonE5645 CPUS (six-cores, 2.4GHz), one RAM (24GB) and one drive (250G). 3T hard disk storage is also installed. The interconnecting communication uses high-speed infiniband network and gigabit ethernet. The operating system is REDHAT, with intel compilers, and IntelMPI and OpenMPI to support parallel programming. Popular scientific softwares, including vasp, gromacs, octopus and siesta, have been installed.</p>
低维量子结构制备	
磁控溅射仪 Magnetron Sputtering	<p>提供制备各种金属 (Au、W、Ti、Al、Cu等)、氮化物、氧化物等薄膜材料，可以根据要求，调节各种工艺参数如溅射功率、衬底温度、沉积厚度等，所制备薄膜可用于各种器件的电极层、功能层等。</p> <p>Deposit different thin films such as metal, nitride and oxide films</p>
等离子体增强化学气相沉积仪PECVD	<p>通过气体反应制备各种氮化物、氧化物、碳化物等薄膜材料，所制薄膜可用于各种微系统电极钝化层或传感器与执行器的结构层；成膜范围直径大于200mm；成膜厚度小于1μm。</p> <p>Fabricate different thin films such as nitride, oxide and carbide films by gas reaction</p>

晶体样品表面抛光机 Crystal surface polishing machine	获得0.3 μm 级别的晶体表面平整度
超高真空激光分子束外延系统 The ultra-high vacuum laser molecular beam epitaxy system	可提供多种氧化物单晶薄膜制备，并实现原位金属电极沉积。
紫外臭氧清洗机 UVO Cleaner Model 42-220	<p>紫外臭氧清洗机的低压汞灯能同时发射波长253.7nm和184.9nm的紫外光，紫外光能将臭氧分解成氧气和活性氧，臭氧会不断的生成和分解，活性氧原子不断的生成。253.7 nm光能与多数活化的有机物（即碳氢化合物）发生氧化反应，生成挥发性气体逸出物体表面，从而彻底清除了粘附在样品表面上的有机污染物。这种方法能有效清除硅、砷化镓、石英、蓝宝石、玻璃、云母、陶瓷和金属表面的有机污染物。</p> <p>Low pressure mercury vapor lamp can irradiate UV light with wavelength of 253.7 nm and 184.9 nm simultaneously. Atomic oxygen is generated and ozone is formed when molecular oxygen is dissociated by UV light. 253.7 nm radiation is absorbed by most hydrocarbons and also by ozone. The products of this excitation of contaminant molecules react with atomic oxygen to form simpler, volatile molecules which desorb from the surface. The method is effective of removing organic contaminants from silicon, gallium arsenide, quartz, sapphire, glass, mica, ceramics and metals.</p>
高空间分辨率观测	
JEM-2010F场发射高分辨透射电子显微镜 Transmission Electron Microscope	<p>固体材料结构和成分分析，性能指标：点分辨率0.19 nm，线分辨率0.14 nm，EELS能量谱分辨率0.7 eV，EDS能量分辨率136 eV。另外配有自制的扫描探针-透射电镜联用样品台，可用于原位测量低维材料或材料微区的电学、光学和光电转换特性。</p> <p>Function: structure and composition characterization. Performance: Point resolution is 0.19 nm, Line resolution is 0.14 nm, EELS energy resolution is 0.7 eV, EDS energy resolution is 136 eV.</p>

<p>原子力显微镜 Atomic Force Microscope</p>	<p>型号：Veeco Multimode。功能：主要用于表面成像和力曲线测量。性能：扫描范围$10\mu\text{m} \times 10\mu\text{m} \times 2.5\mu\text{m}$；样品尺寸$15\text{mm} \times 15\text{mm} \times 6\text{mm}$；噪声水平$< 0.4\text{\AA}$。 Model: Veeco Multimode. Function: mainly used for surface imaging and force measurements in the range of Nano-Newton to Pico-Newton. Performance: scanning size is $10\mu\text{m} \times 10\mu\text{m} \times 2.5\mu\text{m}$, the sample size is $15\text{mm} \times 15\text{mm} \times 6\text{mm}$, and the noise $< 0.4\text{\AA}$.</p>
<p>超快共焦扫描近场显微镜 Ultrafast confocal scanning near-field optical microscope</p>	<p>主要用于表面样品的显微镜下原位AFM,SNOM,CONFOCAL的光谱测量及成像；新纳米尺度光学、电学、力学高分辨检测研究；拓扑绝缘体/复杂氧化物/单分子等量子器件的表面分析；DNA测序研究中光学原位信号快速读取；单根纳米线、量子点、生物单分子器件动力学过程的瞬态光谱成像研究等。</p>
<p>自旋分辨扫描隧道显微镜 Spin resolved scanning tunneling microscope</p>	<p>该系统具备分子束外延 - 样品清理 - 扫描隧道显微镜的联合功能，可实现针尖替换、针尖极化处理、长距离进针、样品定位、原位蒸镀、可控磁场、低温射频信号放大等开展电子自旋共振实验所必需的关键功能。可具备自旋极化探针制备设备，可实现钨针尖的局部快速高温淬火和磁性材料的原子层蒸镀。STM原位具备微型超导电磁线圈，可实现磁场强度和温度的实时监控，可控磁场范围为0-200高斯。</p>
<p>反射高能电子衍射谱仪 Reflection High-Energy Electron Diffraction</p>	<p>纳米尺度的表面实验经常要用到的高纯度和高清洁度的单晶金属和半导体样品。只有在一个非常新鲜和清洁的表面，我们才有可能去识别和探测人工沉积的单个分子或者纳米结构。RHEED是进行晶体外延生长、精确测定表面结晶状态以及表面氧化、还原过程等的有效分析手段。利用它，我们可以清楚地知道单晶表面的形貌和表面原子的周期排列结构。</p>
<p>低温扫描隧道显微镜 LT STM</p>	<p>可提供室温或低温(液氮温度77K或液氦温度4K)下金属或半导体样品表面原子级成像和形貌分析，并可利用锁相放大技术进行低温下扫描隧道谱dI/dV等测量。</p>
<p>光电混合低温扫描隧道显微镜 LT-STM combined with optical detective components</p>	<p>可以在超高真空的条件下，对半导体或金属单晶或者薄膜等样品进行清洁和生长，并在原位对处理后的样品进行测量，测量温度有室温（300K）、液氮（77K）和液氦（LHe）等三种选择。仪器可以测量样品的表面形貌，并对表面的人工纳微结构进行局域测量。仪器还集成了扫描隧道谱仪，可以对局域测量样品的电子态。</p>
<p>多自由度谱学观测</p>	
<p>光致发光测试系统（PL）</p>	<p>提供光致发光光谱、吸收谱、反射谱和光致发光激发谱的测试,光源为无臭氧Xe灯，激发200-950 nm，最佳在紫外光波段，发射200-950 nm，最佳在可见光波段，带宽0-30 nm，采用计算机可以连续调整。</p>

<p>太赫兹光谱系统EKSPLA T-SPEC series real-time terahertz spectrometer</p>	<p>获得时间分辨THz超快光谱，全自动XY二维扫描成像，激发-探测</p>
<p>能量-动量二维解析的高分辨电子能量损失谱仪 High Resolution Electron Energy Loss Spectroscopy with Two- Dimensional Energy and Momentum Mapping (2D-HREELS)</p>	<p>高分辨电子能量损失谱 (HREELS) 可以测量电子的带边结构、声子和表面等离激元等准粒子及其各向异性特征，是探索表面低维体系中新原理、新性质的不可替代的重要方法。本实验室研制的HREELS谱仪将半球形电子能量分析器与新型单色电子源相结合，能够高效率的测得动量、能量二维的电子能量损失谱图。而且本仪器具备和角分辨光电子能谱仪的兼容性，可以同时给出电子能带与声子等准粒子分布的本征数据。新型HREELS谱仪是研究材料表面电子与晶格相互作用、低维纳米结构表面等离激元衰减特性等的强大工具。</p>
<p>多功能表面分析系统 (包含变温STM, XPS和电子能量损失谱仪 (EELS))</p>	<p>仪器集成了变温扫描隧道显微镜 (STM)，X射线光电子能谱 (XPS)，高分辨电子能量损失谱 (HREELS)。STM可以为所内外课题组提供在室温及液氮温度下 (10-77K) 半导体和金属晶体或薄膜表面形貌的测量，获得样品局域的结构信息。也可以通过XPS测量样品的电子态等信息。此外还提供HREELS测量样品的表面声子振动，等离激元等信息。</p>
<p>视频光学接触角测量仪 Vedio-based Contact Angle Measuring Instruments</p>	<p>主要用于测量固体表面各种液体的接触角；测量液体的表面张力；测量固体的表面能。微量注射单元可以单独使用，用来产生不同体积的液体，经过测试，能稳定地产生0.5 μL到20 μL的液体。附带的CCD照相系统可以拍摄到液滴等其他实验现象的侧面变化视频。本仪器安装有控温和湿度控制附件，可以实现-10°C到150°C温度范围内和相对湿度2%到环境湿度的测量。</p>
<p>X射线光电子能谱仪 X-ray photoelectron spectrometer</p>	<p>仪器的功能：X光电子能谱。主要用于表面物理实验室各课题组提供的样品分析。仪器配有单色Al靶，离子枪和低能电子中和枪。本仪器只能对无磁的固体材料进行定性和半定量的表面分析，可探测样品的表面元素、价态，研究材料的电子结构。样品含导体、半导体，氧化物，无机物和不易在真空中挥发的有机物等。目前仪器中无样品加热和冷却功能。</p>
<p>运输性质测量</p>	
<p>半导体器件分析仪 Semiconductor Device Analyzer Station</p>	<p>型号：Agilent B1500A。功能：用于电子器件的 IV、CV、脉冲 IV 及快速 IV 测量，可对器件、材料、半导体、有源/无源元件以及任意电气器件进行各种电气表征和评测。具有 Windows 7、EasyEXPERT 软件借助先进的图形用户界面 (GUI)，可执行数据可恢复的器件表征。性能：I/V 测量精度可达0.1fA/0.5μV, 并配有多种电学测量插口。 Model: Agilent B1500A. Function: mainly used for measurement of semiconductor parameters and the related electrical properties. Performance: I/V measurement resolution 0.1 fA / 0.5 μV, and it has multi-slot configuration that supports the related electrical measurements.</p>

Concept 50 宽频介电谱仪 Broad-Band Dielectric Spectrometer	NOVOCONTROL的介电谱仪通过与Agilent高频分析仪的完美结合达到极宽的频率范围，能灵敏地测量极低电导率和极低损耗的材料（可达到 10^{-5} 分辨率）。NOVOCONTROL不但可提供完整的电介质参数测量系统，也可根据客户的需求提供相应的部件，例如宽频电介质转换器、样品架、控制和分析软件等。
LCR测量仪 LCR Meter	大范围测量频率、电压和电流，测试仪的基本精度是 $[Z(\text{阻抗值}) \times \text{测量值}] \times \pm 0.05\%$ 测量频率40 Hz 到 200 kHz, 测量电压5 mV 到 5 V, 测量电流10 mA 到 50mA
液He低温恒温器 Liquid Helium cryostat	获得液氦低温和恒温变温物理环境，提供光学窗口适合于光学测量
太阳能电池I-V测试系统 Solar I-V Test Platform	<p>包括Oriel 94021A型太阳光模拟器和Oriel PVIV-1A型I-V测试平台。提供各种太阳能电池光电转换效率表征。测试光强可在0到100mW/cm²调整，光谱范围覆盖400 nm到1100 nm，与太阳光匹配度为A级，时间空间稳定性达到B级。91150V型参比电池可以标定辐照区域的光强。测试平台包括源表，可以扫描太阳能电池I-V曲线，自带软件能够准确快捷地读出效率值。</p> <p>太阳光模拟器中的氙灯发出的光，经过内部的光学系统（包括反射镜、光学积分器、光谱滤镜和准直系统），均匀地照射在测试台上的太阳能电池表面，模拟太阳光在标准条件下以48.2度入射角穿过大气的情况，输出的电流、电压信号由数字源表精确测量，并由计算机软件迅速记录。</p> <p>A solar simulator (Oriel 94021A), PVIV test station (source meter, and labview 2.0 software) and a calibrated reference cell (91150V) are included. Light generated from xenon lamp goes through inside optical system (including ellipsoidal reflector, optical integrator, spectral correction filter and collimating lens), irradiating uniformly on the solar cell's surface, mimicking sun light passing through atmosphere at 48.2° zenith angle (relative to normal line of terrestrial surface) under standard condition. Output photocurrent and photovoltage are measured precisely by source meter and recorded by labview 2.0 software.</p>
低温强磁场电输运测试系统 Low temperature high field electrical transport measurement system	<ul style="list-style-type: none"> ● 低温强磁场环境下的电输运 <ul style="list-style-type: none"> ◎ 直流、交流电导 ◎ 微分电导 ◎ 霍尔电导 ◎ 其他电输运测试 ● 变温范围1.8K-320K ● 磁场扫描范围：± 9T，磁场方向手动调节 ● 电阻测量范围：μΩ-GΩ ● 共32根测量引线
低温光电测试系统 Low temperature opto-electronic measurement system	<ul style="list-style-type: none"> ● 低温电输运测试 ● 变温范围1.8K-400K ● 电阻测量范围：μΩ-TΩ ● 10根单芯测量线 ● 5根同轴线

实验室其他设备

仪器名称	简介
管式炉热CVD生长系统 Lindberg-blue-M 1200 °C Tubular Furnace Thermal CVD System	型号：Lindberg-blue-M 1200 °C。功能：管式炉热CVD生长系统主要用于CVD控制生长轻元素纳米结构材料，包括C纳米管、B-C-N纳米管、BN纳米管、石墨烯等。 Model: Lindberg-blue-M 1200 °C. Function: the tubular furnace thermal CVD system is mainly used for the controlled CVD growth of light-element based nanoscale materials and architectures, including C, B-C-N and BN system nanotubes, graphene and its BN and B-C-N analogues.
脉冲电子束沉积系统 PED	主要用于制备多晶硅、氧化物、氮化物等薄膜材料 Fabricate polycrystalline silicon, oxide films
荧光光谱仪 FluoroMax-4 spectrofluorometer	主要用于测量荧光 Measure fluorescence
Coherent超快激光器系统 Ultrafast Laser System	型号：Micra, RegA9000。功能：产生超快激光。 性能：重复频率250kHz，时间宽度85fs，功率1.3mW。 Model：Micra, RegA9000. Function: Ultrafast Pulses Generation. Performance: Repetition rate is 250kHz, pulse duration is 85fs, Output Power is 1.3mW.
光参量放大器OPA Optical Parametric Amplifier	型号：Coherent OPA9400, 9450。功能：产生可见以及红外频段可调波长的超快激光源。性能：信号光从480nm至700nm可调；闲频光从930nm到2300nm可调。 Model：Coherent OPA9400, 9450. Function: Generating wave width tunable ultrafast pulses in visible and infrared spectral ranges. Performance: a signal beam tunable from 480-700 nm, and an idler beam tunable from 930-2300 nm.
光谱仪 Optical Spectrometer	型号：Horiba iHR 320/550 功能：测量谱线不同波长位置强度。 性能：iHR320 焦长：320mm; F数：f/4.1;分辨率：0.06nm/mm。iHR550 焦长：550mm;F数：f/6.4;分辨率：0.025nm/mm。光谱色散：1.34nm/mm。 Model：Horiba iHR 320/550. Function: Measure properties of light over a specific portion of the electromagnetic spectrum. Performance: iHR320 Focal Length: 320mm; Aperture: f/4.1 ; Resolution: 0.06nm/mm; Spectral Dispersion: 1.34 nm/mm. iHR 550 Focal Length: 550mm; Aperture: f/6.4 ; Resolution: 0.025nm/mm; Spectral Dispersion: 1.34 nm/mm.

仪器名称	简介
矢量网络分析仪AV36580A Vector network analyzer	AV36580A矢量网络分析仪具有强大的测量功能：可用于对滤波器，放大器，天线，电缆，有线电视分接头等射频元件的性能测量。具备Windows操作系统；误差校准和时域功能；具有对数幅度、线性幅度、驻波、相位、群延时、Smith圆图、极坐标等多种显示格式；提供多种校准方式，提供频响、单端口、响应隔离、增强型响应、全双二端口校准；具有Windows操作平台和局域网功能，并能够多通道显示；具有USB接口、LAN网口、GPIB接口、标准并口、VGA接口，彩色液晶显示。可快速、精确地测量被测件S参数的幅度、相位和群延迟特性，具备高效、强大的误差修正能力。
超高真空-低温强磁场扫描隧道显微镜-分子束外延生长联合系统 UHV low temperature and high magnetic field scanning tunneling microscope-molecular beam epitaxy system	真空： 5×10^{-11} Torr；STM工作温度：2.5 K-80 K；磁场：0-8特斯拉 Vacuum: 5×10^{-11} Torr, STM working temperature: 2.5 K-80 K, magnetic field: 0-8 Tesla
超高真空低温扫描隧道显微镜-分子束外延联合系统UHV LT STM-MBE Ultrafast confocal scanning near-field optical microscope	精确控制氧化物薄膜外延生长；表面形貌表征；原位输运测量 Epitaxial oxide films can be precisely controlled; characterization of surface morphology; in situ transport measurement
超高真空室温扫描隧道显微镜-分子束外延-俄歇联合系统STM-MBE-Auger UHV(ultra-high vacuum)-STM(scanning tunneling microscope)-MBE(Molecular beam epitaxy) combination system	有序氧化物薄膜制备；表面的成分分析；电子结构研究 Fabrication of ordered oxide films; surface composition analysis; electronic structure study
电子能量损失谱仪系统 EELS UHV-MBE system	高真空中原位样品制备；表面声子和振动谱研究；表面等离激元研究 UHV in situ sample fabrication; surface phonon and vibration spectrum study; surface plasmon study
多功能光电子能谱仪系统 XPS-UPS	清洁样品制备、金属和氧化物薄膜的制备；样品原位化学信息分析；电子结构研究 Preparation of clean samples (e.g. metal and oxide films); in situ chemical analysis of samples; electronic structure study

2013-2014年新增设备介绍：

1. 太赫兹光谱系统 (EKSPLA T-SPEC series real-time terahertz spectrometer)

Wide spectral range up to 3.5 THz (116 cm^{-1})

Excellent spectral resolution better than 2.5 GHz (0.08 cm^{-1})

High power S/N ratio $>106:1$ at 0.4 THz

Real-time data acquisition up to 10 spectra/s

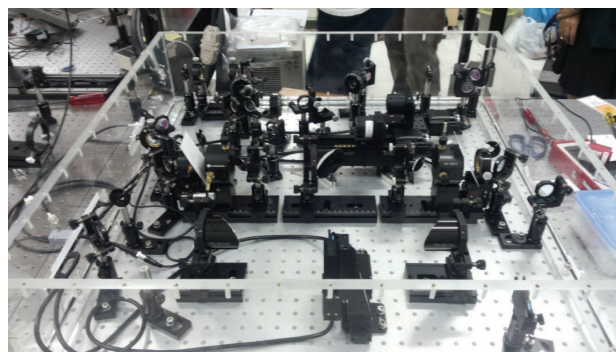
“No bearing” design of fast delay line – virtually unlimited lifetime

Transmission and reflection modes

High spatial resolution THz imaging

Complete PC control

User-friendly software for transmission or/and absorption measurements, imaging



2. 超快共焦扫描近场显微镜 (Ultrafast confocal scanning near-field optical microscope)

在蔡司显微镜平台上实现SNOM, AFM及Raman功能。可实现提供精确悬臂定位和快速对齐的同步悬臂和样品观察；具有光纤探针近场扫描模式；具有探针增强扫描模式；具有共焦拉曼成像能力，以及标准光学模式，如透射、反射和荧光；配有EMCCD。

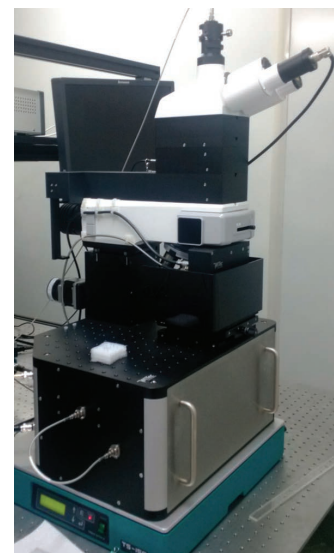
激发激光：532nm, 30mW。

SNOM空间分辨率： $<100\text{nm}$ 。

共焦显微镜空间分辨率： $<200\text{nm}$ for x,y, $<500\text{nm}$ for z。

样品台扫描精度： $<10\text{nm}$ at x,y,z方向；

光谱仪测量范围： $270\text{nm}-1200\text{nm}$ ，分辨率 0.062nm (1200 l/mm)



3. 能量/动量二维解析的高分辨电子能量损失谱仪

该谱仪使用半球形电子能量分析器与多通道板电子倍增探测器实现对电子信号的二维高效探测，在保证高分辨率的前提下可将动量分辨测量的效率提高一个数量级；在不延长测量时间的前提下将动量空间的采样密度提高三个数量级，更好地发挥出谱仪高分辨率的优势；而且具备和角分辨光电子能谱仪的兼容性，可以同时给出电子能带与声子等准粒子分布的本征数据。其超高真空系统的本底压强达到 3×10^{-10} mbar；分析室具有双层金属屏蔽，内部剩余磁场小于2 mG；样品台具备三维平动、三维转动调节自由度，同时具有液氮到室温的控温功能；谱仪激发电子束的能量线宽好于0.67 meV，角度分布小于 0.08° ，保证了设计指标的的实现，即能量分辨率好于1 meV，动量（角度）分辨率好于 0.8° 。

The energy/momentum two-dimensionally resolved HREELS (2D-HREELS) employs the hemispherical electron energy analyzer and the multiple channel plate (MCP) to detect the 2D electron signals efficiently and sensitively. Therefore it possesses higher efficiency of momentum-resolved measurements by an order of magnitude than conventional spectrometers without deteriorating the resolution of energy or momentum. Also it enhances the density of sampling points in momentum space by three orders of magnitudes than conventional spectrometers without extending the measurement time. Additionally, the 2D-HREELS is totally compatible with angle-resolved photoelectron spectroscopy (ARPES), being able to provide the intrinsic data on both electrons and phonons with high precision in E and k space. The base pressure of the ultrahigh vacuum system is 3×10^{-10} mbar; the double-layered metal shield of the analysis chamber ensures the residual magnetic field being lower than 2 mG. The sample stage is attached on a six-dimension manipulator with temperature controlled between liquid helium temperature and room temperature. The energy width of the primary electron beam can be better than 0.67 meV with the spread angle smaller than 0.08° , achieving the energy and momentum resolutions (1 meV and 0.8° , respectively).



4. 超高真空激光分子束外延系统UHV(ultra-high vacuum)-STM(scanning tunneling microscope)-MBE(Molecular beam epitaxy) combination system

配备一级差分的高能电子衍射仪，本底真空达到 5×10^{-10} mbar；样品台具备三维平动、二维转动调节自由度；衬底可以直接通过电流加热，也可以利用近红外激光加热，并通过红外测温仪监测控温；系统每次生长可以安装5种靶材并原位切换，每个靶在生长中还可以沿x/y垂直方向精密控制平动以改善溅射与沉积的均匀性。

The ultra-high vacuum laser molecular beam epitaxy system is equipped with a reflective high-energy electron diffractometer. The base pressure is 5×10^{-10} mbar. The sample stage has three-dimensional translation and two-dimensional rotation degrees of freedom. The sample can be heated either by direct current or IR laser. The temperature is monitored by an IR pyrometer. Five targets can be loaded and switched in situ. During the growth the target is moved along x/y axis to improve the uniformity of laser ablation.

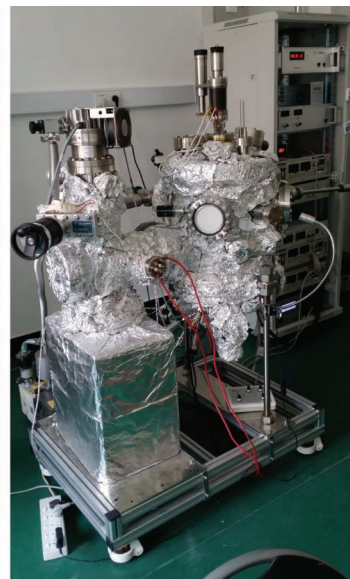
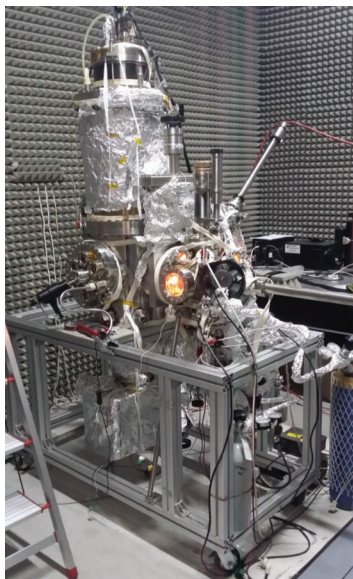


5. 超高真空低温扫描隧道显微镜-分子束外延联合系统UHV-MBE system

该系统是完全自主研发的高性能低温STM/STS联合MBE系统，本底真空为 1×10^{-10} Torr，STM可在室温、液氮以及液氦温度下稳定工作，噪音水平可以达到fA量级，并且可以与原位光谱测量系统集成应用。

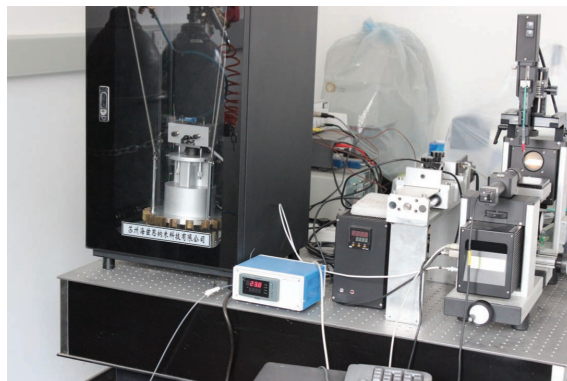
6. 超高真空分子束外延系统UHV-MBE system

自行设计和制作，配备有数字控温蒸发源、束流监测仪和高能电子衍射仪（RHEED），用于高质量单晶薄膜的分子束外延生长。



7. 视频光学接触角测量仪Dataphysics OCA20

测量接触角、液体表面张力，固体表面能；惰性气体保护；可在 $-15^{\circ}\text{C} \sim 150^{\circ}\text{C}$ 且 $0.1^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 精确控制测试样品温度。



8. X射线光电子能谱仪

仪器配有单色化的Al靶，X射线束斑从200微米到900微米可调。最佳能量分辨率约0.5 eV (Ag3d5/2)。仪器还配有离子枪和低能电子中和枪。本仪器能对无磁固体材料（包括导体、半导体，氧化物，无机物和不易在真空中挥发的有机物等）进行定性和半定量的表面分析，可探测样品的表面元素、价态，研究材料的电子结构。仪器目前无样品加热和冷却功等其它功能。

X-ray spot size with Monochromated X-ray source (AlK) varies from 200 μm to 900 μm . Ultimate energy resolution is about 0.5 eV defined as the full width at half maximum (FWHM) measured from pure metal Ag 3d5/2 peak. The spectrometer is equipped with ion gun used for surface cleaning and a low energy electron gun for surface charge neutralization. The spectrometer is helpful to detect elements, chemical states as well as the electronic structures. The samples can be any of solid materials without magnetism and volatility in vacuum including metals, semiconductors, oxides, inorganic and organic matter. The spectrometer has no sample heater and cooler so far.



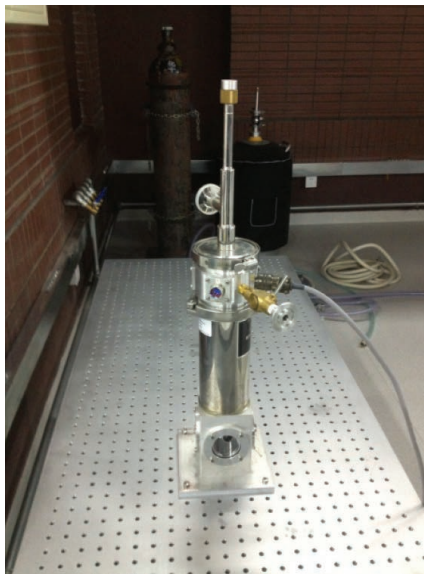
9. 低温强磁场电输运测试系统Low temperature high field electrical transport measurement system

- 低温强磁场环境下的电输运
 - ◎ 直流、交流电导
 - ◎ 微分电导
 - ◎ 霍尔电导
 - ◎ 其他电输运测试
- 变温范围1.8K-320K
- 磁场扫描范围： $\pm 9\text{T}$ ，磁场方向手动调节
- 电阻测量范围： $\mu\Omega$ -G Ω
- 共32根测量引线



10. 低温光电测试系统Low temperature opto-electronic measurement system

- 低温电输运测试
- 变温范围1.8K-400K
- 电阻测量范围： $\mu\Omega$ -T Ω
- 10根单芯测量线
- 5根同轴线



08 荣誉和奖励

获奖情况

职工获奖情况

姓名	所获荣誉
郭沁林	中国科学院朱李月华优秀教师奖 (2013) 基金委
王文龙	优秀青年科学基金 (2013)
白雪冬	科技部中青年科技创新领军人才 (2013) 中国真
郭建东	空科技青年创新奖 (2014)
陈 岚	基金委优秀青年科学基金 (2013)
孟 胜	中科院物理所科技新人奖 (2014)
孟 胜	2014Elsevier中国高被引学者 (物理及天文)

研究生获奖情况

◆ 中国科学院大学2012-2013学年优秀学生

三好学生：魏家科、鲁年鹏、张慧敏、周智、李文涛、邱静岚、朱重钦

优秀毕业生：焦扬

◆ 中国科学院物理研究所2013年度所长奖学金优秀奖

鲁年鹏 周智 朱重钦

◆ 中国科学院物理研究所2013年度所长奖学金表彰奖

王立芬 魏家科 李晓敏 于同旭 欧云波 张慧敏 胡颖 田义超 吴艳玲

李文涛 冯宝杰 邱静岚 马薇 张帆 黄永峰

◆ 2013年研究生国家奖学金

冯宝杰 (博士)

◆ 中国科学院大学2013-2014学年优秀学生

三好学生：李晓敏、于同旭、张慧敏、胡颖、李文涛、钟青、张帆

优秀毕业生：王立芬

- ◆ 中国科学院物理研究所2014年度所长奖学金优秀奖
张慧敏 胡颖 张帆
- ◆ 中国科学院物理研究所2014年度所长奖学金表彰奖
关佳其 彭俊平 欧云波 李文涛 钟青 邱静岚 付会霞 王逸非 黄永峰 高飞
李晓敏 齐阔 魏家科 于同旭 李来来 田义超 吴艳玲
- ◆ 2014年研究生国家奖学金
朱重钦（博士） 黎文彬（硕士）
- ◆ 2014年度朱李月华优秀博士生奖
朱重钦（博士）
- ◆ 第三届“首都大学生科技创新作品与专利成果展示推介会”创新金奖
胡颖

专利情况

受理号	专利名称	发明人
201310484579.9	一种在透射电镜中原位变温测量光谱的装置	杨是贇、王恩哥、田学增、许智、白雪冬
201410068708.0	一种微机械器件的载荷疲劳性能测试系统	杨是贇、王恩哥、田学增、曾敏、许智、白雪冬
201410122907.5	一种用于电分解水制氢的催化剂及其制备方法	曾敏、王文龙、王浩、赵冲、齐阔、魏家科、田学增、杨是贇、白雪冬
201310163003.2	一种扫描隧道显微镜扫描头	宫会期、王劲川、孙丽欢、董立、颜世超、谢楠、单欣岩、郭阳、陆兴华
201410051811.4	一种氮化硼纳米孔传感器及其制造方法	周智、胡颖、单欣岩、陆兴华
201410527668.1	一种纳米孔中瞬态电流的补偿方法和补偿电路	胡颖、周智、单欣岩、陆兴华
ZL 2011104477622	一种MBE同质外延生长SrTiO ₃ 薄膜的方法	杨芳、汪志明、冯加贵、郭建东
201410654425.4	一种超疏水功能材料	孟胜、黄永峰

09 相关报道

研究简报一：

单层硅烯的低温动态相变及超导电性研究取得进展

硅与碳同属于元素周期表的IV族元素，理论工作表明，硅烯具备与石墨烯类似的狄拉克型电子结构，其布里渊区同样有六个线性色散的狄拉克锥。由此，很多在石墨烯中发现的新奇量子效应，都可以在硅烯中找到相对应版本。而且，硅烯还具备石墨烯没有的一些优势，例如，硅烯的非共面结构使得硅烯具有更强的自旋轨道耦合，能在狄拉克点能打开更大的能隙，从而实现可观测的量子自旋霍尔效应。硅烯还被认为是二维拓扑绝缘体，其能带结构能被外加的电场和磁场调制，出现量子反常霍尔态、谷极化金属态（valley-polarized metal phase）、拓扑相变等新奇量子现象。硅烯有着与石墨烯相似的电子结构和电学性质，也可应用于以前构想的基于石墨烯的器件中，此外，硅烯可以更好地与目前的硅技术相融合，更有利于大规模集成电路的生产。

2012年初，中科院物理所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）表面室SF09组吴克辉研究员、陈岚副研究员等第一次在Ag(111)表面上利用分子束外延方法生长出了硅烯，观测到单层硅烯在Ag(111)上表现为 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 的蜂巢状结构，同时验证了该结构具有Dirac型电子态（PRL 109, 056804(2012)；Nano Lett. 12, 3507(2012)）。此外，有报导在ZrB₂和Ir(111)表面上生长出的硅烯也具有 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 的重构结构。由于 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 的蜂巢状结构是一种非公度结构，一直缺乏完美的模型去解释其原子结构和Dirac电子态的来源。

近期，表面室SF09组吴克辉研究员、陈岚副研究员等进一步发现了硅烯的 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 蜂巢状结构在低温下会发生自发对称破缺，展现出两种镜像对称的三角形结构，相同结构的三角形晶格会形成大面积的晶畴，相邻晶畴之间会形成

清晰的畴界。该相变行为展示出硅烯和石墨烯的不同，同时为理论理解这一结构提供了新思路。对此，中科院物理所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）表面室SF10组孟胜研究员、李晖副研究员、博士生丁子敬等对该体系进行了细致的理论研究。他们认为硅烯与银衬底的作用应该介于范德华弱作用力和化学吸附强作用之间，而传统DFT计算方法对这类非化学键作用的描述并不准确。为此他们使用近年来发展的范德华修正密度泛函方法计算硅烯的重构结构，发现硅烯在低温下自发形成两种镜像对称且能量简并的 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 三角形结构。这两个三角形低温相之间的转换势垒小于30meV每原子，这意味着微小的热扰动都能导致两个低温相之间会发生快速自由转变，使得在较高温度下STM扫描只能看到两种低温相的叠加形态，即 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 的蜂巢状结构。这项工作非但完美解释了硅烯的非公度 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 重构，而且指出这种相与衬底作用较弱，近似于自由硅烯，能更好的保持硅烯本身独特的物理特性。更特别的是与以往理论预言硅烯的 1×1 蜂巢结构相比， $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 重构相有着更大的翘曲程度，这使得其电子结构中除了保持Dirac锥外，在Dirac点处还会打开一个比较大的能隙（150meV），这无疑对硅烯在电子器件中的应用极为有利。硅烯结构的复杂性也揭示了通过结构改性来调控硅烯电子结构的可能性。

该工作发表在Phys. Rev. Lett. 110, 085504 (2013)。参与这些工作并做出重要贡献的还包括冯宝杰、邱静岚等研究生以及程鹏博士后。

硅烯的奇特之处不止于此。最近，表面室SF09组吴克辉研究员、陈岚副研究员和博士生冯宝杰通过低温扫描隧道谱研究硅烯的电子结构时发现，在4K温度下硅烯的费米面处有一个约70meV的能隙。该能隙相对费米能级对称，在能隙边界处有明显的相干峰，且该能隙随着温度升高有明显的变小趋势，直至40K时完全消失。其变化特征与超导能隙极为吻合，在排除了其它几种可能性后，他们初步认为该能隙是由硅烯在低温下的超导态产生的，超导转变温度在35K-40K之间。这个发现如果被证实，将是硅烯研究领域的里程碑式发现。该论文在arXiv上张贴后，引起了国际上的很大反响，目前已经发表在Appl. Phys. Lett. 102, 081602(2013)。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201303/t20130326_3804944.html

研究简报二：

揭示表面浸润的微观机制：晶格是否影响水的浸润性？

水的浸润现象在物理、生物、化学、工业等各个领域都发挥着重要作用，比如人工降雨、蛋白质折叠等。浸润一般发生在固体表面。理解浸润性质与界面结构之间的关系是理解表面浸润的关键。近期理论和实验工作均表明室温下“水层可以是疏水的”，这种奇异现象无法用传统的杨氏方程解释。上个世纪五十年代人们用晶格匹配的材料作晶核促进人工降雨，但此后一系列实验似乎显示表面晶格对冰成核无显著影响直到今天，固体表面与冰的Ih相晶格常数匹配时是否有助于水的浸润和成核仍有争议。此外，固体晶格影响界面水层结构，水界面层结构与液滴整体的浸润性之间关系的微观图像仍然欠缺。

近期，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）表面实验室SF10组孟胜研究员等用经典分子动力学模拟方法系统地研究了水在不同晶格常数的固体fcc（111）表面的浸润性质。他们发现对疏水表面水平拉伸 $\pm 3\%$ 时，水在表面的浸润性变化很小。而对亲水表面拉伸 $\pm 3\%$ 时，水在界面的浸润角会有非常大的变化。特别地，浸润角并不是随着表面晶格常数单调变化，而是在表面晶格常数与体相水的O—O距离在界面的投影相等时，水滴浸润角最小。进一步分析界面水层的结构发现，当表面晶格常数与体相水的O—O距离的界面投影相等时，界面致密水层的微观结构会被破坏，从而更接近体相水的特征。而在疏水表面，表面晶格基本不改变界面水层的结构。该工作证明了表面晶格常数、界面水的结构、表面浸润性三者密切相关，为以后进一步从微观上理解和调节材料表面的浸润性奠定了基础。相关结果发表在【Phys. Rev. Lett. 110, 126101 (2013)】上。

上述研究工作由博士生朱重钦、博士生黄永峰、李晖副研究员、内布拉斯加大学林肯分校曾晓成教授与孟胜研究员共同完成，得到了科学院水基础科学项目、基金委、科技部。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201304/t20130418_3822994.html

研究简报三：

微纳体系二次谐波信号形状共振的物理机制研究取得重要进展

对称性破缺体系蕴含着丰富的物理内容，其中二次谐波产生（SHG）等非线性光学探测是一个重要的研究手段，它只在对称性破缺处产生，且只对界面和表面的数个原子层敏感。发展超快的表面界面SHG弱信号探测技术对于研究光子学中的非线性光学问题具有重要的意义。尽管纳米光子学一直以来被认为是经典光学的自然延续，但是随着光子学的发展，纳米尺度的非线性光学特性出现了一些新奇的物理现象。近期国际上不少研究小组的实验研究结果表明纳米体系的几何形状对其非线性光学信号有非常强烈的影响，特定的优化形状（在面积相同的情况下）可以导致两个数量级的SHG信号增强。然而，直至目前，国际上对于这形状共振效应的物理机制的认识尚不完全清楚，甚至存在误区。中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）的表面物理国家重点实验室SF05组赵继民副研究员近期发展了SHG弱信号探测技术和2fs的亚脉宽时间分辨技术。他与光物理重点实验室李志远课题组（L01组）合作，从实验到理论充分地研究了形状在非线性和纳米光子学光学中的重要作用，指出在传统的非线性光学中默认的空间重叠在纳米体系未必自动实现，而是受形状的强烈调控。

赵继民和博士生王瑞在玻璃衬底上的金薄膜上制备了不同形状（由长宽比AR表征）的矩形亚波长孔阵列，由于对称性破缺，金膜表面（包括上下表面和孔的侧壁）的原子具有非零的二阶非线性极化率，在入射飞秒脉冲激光的激发下，产生二次谐波。相比之下，金膜内部的体原子具有中心反演对称性而没有SHG的响应。他们利用超快光谱研究中发展的SHG弱信号（小于基波的10-10倍）探测技术测得不同AR样品的SHG信号，结果发现在某个AR处SHG信号强度比其他的形状最多可增强两个数量级，实验结果与国际上其他研究组的结果一致。他们还采用精度提高为2fs的亚脉宽时间分辨技术直接测量了光速的减慢，发现各种几何形状的孔阵列都存在着一程度上的光慢效应，但是，它并不存在与几何形状紧密关联的变化规律。因此，光慢效应应该不是SHG几何形状共振的主要物理根源，这与此前文献普遍持有的观点相悖。

为了解决这个物理问题，李志远和博士生王本立等从标准的非线性光学严格耦合波方程出发，利用麦克斯韦方

程组求解了每个独立的纳米空气孔阵列对应的基频光(FW)和倍频光(SHW)对应的电磁波传输模式，获得了详细的性能参数，包括色散曲线，模态分布，衰减常数等。根据实际情况，采取了单模近似，建立了非线性耦合模理论，对其求解获得了关于SHG产生和辐射的形式简单的解析解。该理论第一次揭示了SHG信号强度与诸多物理因素的紧密联系，包括孔内基频光的耦合效率（该物理量与慢光效应有关系，但不是唯一的），基频光 - 倍频光的模式空间重叠因子和模式相位失配度，以及基频光和倍频光的传播衰减等因素，这些物理量和空气孔的几何形状密切相关。因此，形状共振效应就体现在这些物理量的贡献里面，而它们的贡献大小完全包括在了解析理论的表达式里面。解析理论和数值计算的综合结果表明，在某个AR值，SHG的信号强度确实有两个数量级以上的增强。另外，理论还发现，SHG最强值对应的AR数值与纳米孔的面积也是密切相关的。

针对纳米孔阵列SHG而发展的解析理论还能够很容易的拓展到其它非线性光学过程，对于设计纳米尺度的非线性光学器件具有重要的指导价值。以上工作将促进对于纳米体系非线性光子学各种复杂相互作用现象的理解和应用。详尽工作发表在近期的【Scientific Reports 3, 2358 (2013)】上。

上述工作得到了基金委、科技部和科学院的支持。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201308/t20130826_3918280.html

研究简报四：

大温区内恒电阻率单一固体

电阻是材料的一个重要物理性质。单一固体材料的电阻率通常是一个关于温度的复杂函数，电阻率随温度的动态变化范围可达数个数量级。在较大温区内电导率恒定的单一固体，不仅有重要的用途，其本身也是有趣的研究对象。恒定电阻率材料可广泛用于制备电子器件和电路中的精密电阻和标准电阻，此前都是通过材料结构设计或电路中的补偿机制得以实现的。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）表面物理国家重点实验室SF3组长期从事热稳定性很差的 Cu_3N 基薄膜材料的生长和物性研究。2006年纪爱玲博士、李超荣教授和曹则贤研究员首次在 $\text{Cu}_3\text{NPd}_{0.238}$ 薄膜中观察到在5-245K大温区内的恒电阻率 (APL 89, 252120 (2006))。其可能的机理为杂质金属原子随机占据 Cu_3N 之立方单胞的中心位置，造成能隙的变窄直至出现能带重叠，导致半导体-半金属相变。这时载流子浓度和迁移率随温度的变化会发生相互补偿，从而实现较大温区内恒定的电阻率。最近，SF3组博士生鲁年鹏在纪爱玲副研究员、曹则贤研究员指导下，经过大量艰苦的努力，获得了不同程度掺杂的 Cu_3NM_x ($M = \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Au}$)薄膜，并观察到了大温区内恒电阻率现象。其中， $\text{Cu}_3\text{NAg}_{0.76}$ 样品的归一化电阻率在55 - 300K的范围内，方差仅为 8.0×10^{-4} 。研究结果发表在近期的Scientific Reports上(Scientific Reports 3, 3090 (2013))。

Cu_3N 是一种具有反 ReO_3 晶格结构的间接带隙半导体，传统上可以用作光记录材料，近年来也广泛用作锂离子电池的电极材料、碱性燃料电池的阴极催化材料及低阻磁隧穿结的阻拦层等。 Cu_3N 基固体中的Cu-N键较弱，因此具有很差的热稳定性，这为该类材料的合成和物性研究带来了极大的困难， Cu_3N 的性能参数，包括带隙、晶格常数、室温电阻率、分解温度等，都长期存在争议。SF3组针对该类材料的相关问题开展了系统的研究，第一个满足化学计量比的样品，第一张 Cu_3N 晶格照片等，都是SF3组获得的。此外，在 Cu_3N 薄膜生长过程中还观察到通过造山运动形成的海星状浮雕结构。

此项工作得到了科技部和国家自然科学基金委的支持。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201311/t20131108_3970006.html

研究简报五：

原位透射电镜方法揭示二硫化钼嵌锂诱导结构相变的原子机制

层状金属硫化物体系具有多变的原子配位结构和电子结构，电子和声子之间存在很强的相互作用。层间较弱的范德瓦尔斯力使得可以通过嵌入各种功能化的分子和离子来调控材料的性质。二硫化钼 (MoS_2) 及其插层化合物在很多方面具有重要的应用价值，例如制备催化剂、吸附剂、固体电解质、感应器、电致变色显示器以及二次锂离子电池等。因此 MoS_2 中的嵌入化学以及嵌入化合物的物理和化学性质在基础研究和实际应用中都受到高度关注。锂离子嵌入 MoS_2 中的过程在以往被描述为一种离子-电子转移的拓扑反应，金属锂（施主）中的电子转移到钼（受主）的最低未占据轨道即 d 轨道上。这种描述中受主只提供了受主位置和氧化还原中心，然而实际上嵌入反应同样会导致受主发生重要的结构和相转变。由于层间耦合、量子局域效应和对称性的改变等使得锂离子嵌入前后结构性质发生本质的变化。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）表面室 SF1 组多年来通过研制原位透射电镜中的扫描探针装置，开展定量纳米表征和新型器件机理研究。最近，该组博士生王立芬、许智副研、王文龙和白雪冬研究员基于原位透射电子显微镜 (in-situ TEM) 技术，在透射电镜中设计并搭建了以 MoS_2 纳米片为工作电极的锂离子半电池，在原子尺度原位实时观察到 MoS_2 纳米片中嵌锂导致的两种相变过程。

首次锂化过程中，第一次相变对应的是锂离子的嵌入反应过程，由于电子的共嵌入，金属 Mo 的配位结构发生变化，由三菱柱配位转变为八面体配位，相应空间群由 $P6_3/m$ 转变为 $P-3m1$ ，产生 2H-1T 的相转变，锂离子嵌入在层间 S-S 的四面体配位中心处。本征 2H 结构的 MoS_2 为半导体性，锂化后的 1T 结构对应的电子结构为金属性，由于低维金属的不稳定性，二维平面内出现了超晶格从而产生电荷密度波 (Charge Density Wave)。原位动态过程研究发现这一相转变过程遵循剪切机制 (Shear Mechanism)，即锂离子的嵌入导致 MoS_2 中原子层之间发生相对滑移，造成二维平面内的剪切应力。多于 1 摩尔的锂离子嵌入时，1T- LiMoS_2 被分解为金属 Mo 网格和 Li_2S ，即发生第二次相变。该工作首次在实验上原位观察到 MoS_2 中锂离子嵌入发生的相转变，上述结构性质与 MoS_2 纽扣电池的放电曲线特征一一对应，对层状 MoS_2 纳米材料储锂机制和工作机理有个直接清晰的认识。相关研究结果发表在 *J. Am. Chem. Soc.* 136, 6693–6697 (2014) 上。

这一工作得到了国家自然科学基金委、科技部和中国科学院的资助。

相关工作链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201405/t20140523_4125581.html

研究简报六：

发展原位透射电镜技术表征离子输运动力学过程

离子输运是物理、化学和生命科学研究的一个基本过程，其性质对储能、催化和阻变存储等器件性能有重要的影响。在实验上高分辨表征离子输运过程和表界面电化学反应对揭示器件工作机理和开发新型器件具有重要的意义。中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）表面室SF1课题组多年来致力于原位透射电镜-扫描探针联合技术的开发与纳米表征研究。利用原位透射电镜（in-situ TEM）方法可以将纳米器件置入电镜内对器件工作的动态过程进行原位高分辨观测表征，研究器件的工作机理。最近，他们通过优化扫描探针的机械和电子学设计方案，改善仪器的性能，提高了观测的稳定性和分辨率，在离子输运动力学及其相关的阻变存储器机理研究方面取得新进展。

阻变存储器（RRAM）因其具有低功耗、高集成度、低写入电压、可3D集成等诸多优点，有潜力成为下一代非易失性存储器。它主要是利用某些薄膜材料在电激励的作用下会出现不同电阻状态（高、低阻态）的转变现象来进行数据的存储。RRAM器件一般具有“金属—介质—金属”的三明治结构。这种三明治结构的绝缘介质层可以是二元或者多元的金属氧化物，或者是硫属化合物，以及有机化合物等。根据在绝缘体层传导的离子不同，又将RRAM分成阳离子型存储器与阴离子型存储器。离子传输引起导电物质迁移从而形成导电通道，这是被广泛接受的模型，但是对于离子输运和导电通道形成的动力学过程目前仍然缺少直接的实验证据。

在过去的几年里，SF1课题组利用原位透射电镜方法研究了金属氧化物和硫化物中氧离子、金属离子的电迁移和电极界面氧化还原反应过程，以及这些过程导致的阻变效应（JACS 132, 4197 (2010); ACS Nano 4, 2515 (2010); APL 99, 113506 (2011); JAP 111, 114506 (2012), etc.），这些工作是阻变存储器机理研究的有益探索。最近，他们开展了Ag/SiO₂/p-Si体系的阻变机理研究，在透射电镜内原位观测Ag纳米颗粒的生长、迁移的动力过程及其伴随的电致阻变效应。针对一个独立的SiO₂中包埋的Ag颗粒进行观察，在电场下银颗粒逐渐收缩，沿电场前方有小颗粒析出并逐渐长大，同时刚生长的颗粒前方又开始有新的小颗粒析出。该颗粒充当“中继站”的作用，其后方的颗粒物质传递过来，同时又输送给前方颗粒使其逐渐长大，沿着电场方向依次进行，递推前移。其物理过

程是，银颗粒表面在电场下产生极化，沿电场方向的两侧表面分别呈现正和负极性，即一个金属颗粒表现为双极性，当极化强度足够大时，在正负电极处发生氧化还原反应，即正极一侧氧化生成银离子，电场驱动其迁移，负极一侧又将传输过来的银离子还原。银离子在电化学势作用下发生迁移，并和氧化还原反应同时进行，形成了边消耗边生长的逐步移动过程。从能带的角度给出了离子输运动力学过程的物理图像，还进行了有限元方法模拟计算，指出这些银颗粒作为双极性电极需要满足的临界尺寸，与实验结果一致。这项研究应用自行研制的原位透射电镜仪器表征了固体介质中金属离子输运及其伴随的电化学传质过程，对深入理解离子型阻变存储器机理具有重要意义。该工作是由SF1组博士生田学增、许智副研、王文龙和白雪冬研究员等完成的，相关结果发表在近期的Advanced Materials 26, 3649 (2014) 上。

这项工作得到了国家自然科学基金委、科技部和中国科学院的资助。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201407/t20140703_4148565.html

研究简报七

二维格子缩放对称性的研究进展

几何变换包括镜面反映、滑移、转动和缩放等变换。在考虑空间格子的几何变换时会涉及到镜面反映、滑移和转动，缩放对称性则鲜有提及。伽利略早已注意到，一般几何结构中不存在缩放对称性。可是，面对着共有17种不同空间群的二维格子和230种不同空间群的三维格子，人们会问在这些几何结构里真的不存在缩放对称性吗？正方格子沿两个垂直方向以相同因子缩放会保持为正方格子，或者三角格子沿某个 $\langle 01 \rangle$ 方向三倍放大后还是三角格子（这个缩放只能进行一次），这些是平庸的缩放变换。人们更感兴趣的是单向缩放对称性：沿某个方向，以某个因子缩放，几何结构会保持其特性不变，并且这样的缩放可以无限进行下去。如何去找寻几何点阵的单向缩放对称性呢？

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室(筹)SF3组的曹则贤研究员和廖龙光博士(已毕业)长期研究准周期结构的几何问题。2013年他们找到了12次准周期结构的单一团簇覆盖,推翻了12次准周期结构不存在单一团簇覆盖的结论(J. Phys. A: Math. Theor. 46, 245205 (2013))。最近,他们研究了函数 $y = \arcsin(\sin(2\pi nx))$ (其中整数 n 是变量, x 是参数)的性质,发现当参数 x 取白银分割数 $\lambda = \sqrt{2} - 1$ (白金分割数 $\mu = 2 - \sqrt{3}$)时,取恰当的水平轴与垂直轴尺度比例,函数图像是近似的8次(12次)准周期结构。实际上,它是两套近似的正方格子(三角格子)套构而成的Moiré花样。取其中的一套近似正方格子(三角格子)加以研究,发现当水平轴与垂直轴的比例趋于零时,近似的正方格子(三角格子)变成了严格的正方格子(三角格子)。此时,水平轴就提供了一个正方格子(三角格子)具有缩放对称性的方向。由此得出的结论是,正方格子(三角格子)在过任一格点,沿和邻边成 22.5° (15°)的方向上,具有缩放对称性,缩放因子为 $3 - 2\sqrt{2}$ ($7 - 4\sqrt{3}$)。相关内容发表在Scientific Reports 2014上。

在一特定方向上正方格子(三角格子)缩放对称性的发现,打破了几何点阵单向缩放对称性研究的坚冰。自然我们接着会问,是否还有更多的单向缩放对称性存在?曹则贤研究员发现,将正方格子(三角格子)用Gauss (Eisenstein)整数加以表示,则缩放对称性的研究变为证明Gauss (Eisenstein)整数所代表的矢量经缩放变换后保持Gauss (Eisenstein)整数的特性,由此发现正方格子存在无穷多的单向缩放对称性:过任一格点,沿和邻边成 θ 角($\tan \theta = (\sqrt{k^2 + 4} - k)/2$, $k=1, 2, 3, \dots$)的方向上,正方格子具有缩放对称性,缩放因子为 $\tan^2 \theta$ 。中, $k=2$ 对应白银分割数的情形; $k=1$ 对应的缩放对称性的方向由 $\tan \theta = (\sqrt{5} - 1)/2$ 决定,而这个数是神奇的黄金分割数。相关文章在审稿中。

相当多的物理模型是建立在三角格子和正方格子上的,一些物理问题本身也具有三角格子和正方格子的对称性。三角格子和正方格子单向缩放对称性的发现,也许对相关物理问题意味着什么,希望能够引起理论物理同行们的注意。考虑到黄金分割数出现在一维Ising模型的激发态质量比中,Hard-Hexagonal模型的Critical fugacity中,以及与Bell不等式之Hardy验证有关的最大Hardy概率中,则建立在三角格子和正方格子上的物理问题之某个特定物理量与白银分割数、白金分割数或者黄金分割数挂钩,应该不是令人惊讶的事情。

相关链接: http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201408/t20140827_4192973.html

“复杂材料在低维或对称性破缺环境中的功能调控” 国际研讨会在物理所召开

由物理所-美国路易斯安纳州立大学国际合作团队主办的“复杂材料在低维或对称性破缺环境中的功能调控”国际研讨会 (Workshop on Functionality of Complex Materials in an Environment of Reduced Dimensionality or Broken Symmetry) 于07月18日至22日在物理所召开。

物理所副所长方忠研究员致开幕词。他向与会的专家学者表示热烈欢迎，并表示物理所将以此次国际研讨会为契机，继续为海内外研究人员提供交流合作的平台。本次研讨会的主要议题包括：复杂材料低维结构的设计与制备、表面/界面拓扑量子态的构造与表征、多自由度耦合在表面/界面的特殊行为以及界面结构设计对复杂材料体系宏观性能的调控作用等。参会代表介绍了相关领域的最新研究进展，进行了深入交流和热烈讨论，并分别参观了表面物理国家重点实验室和纳米物理与器件实验室，为未来学术交流合作奠定了基础。

物理所-路易斯安纳州立大学国际合作团队的美方负责人Ward Plummer教授总结指出，复杂材料表面/界面的研究需要多种实验与理论方法的支持，同时也为这些方法的发展提供了重要的机遇，本次研讨会就多个议题展开了充分的讨论和交流，取得了圆满成功。Plummer教授还详细回顾了研讨会的背景和组织过程，并对他本人的团队与物理所在复杂材料微观调控方向上多年来的合作给予了高度评价。

这次会议延续2012年6月由物理所国际合作中心主办的“氧化物界面最新研究进展研讨会”，来自北美、欧洲、新加坡、沙特阿拉伯和国内的十七位专家做了主题报告。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/snxw/201308/t20130808_3910400.html

“第四届国际硅烯大会”在物理所召开

6月11日至12日，由中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）国际合作研究中心主办的“第四届国际硅烯大会”（The 4th International Meeting on Silicene）在物理所成功举办。

6月11日，大会在M楼236会议室拉开序幕。大会主席吴克辉研究员致开幕词，对参会的专家学者表示欢迎，并希望此次大会能为该领域研究人员提供交流平台和合作契机。研讨会由物理所的吴克辉研究员、戴希研究员、高鸿钧研究员、中佛罗里达大学（University of Central Florida）的Abdelkader Kara教授一同组织，邀请到硅烯领域来自国外的十五位专家，来自中国的九位专家做主题报告，介绍最新研究进展。与会者还就相关问题进行了交流和讨论，会场气氛热烈，热点不断，反应了国际硅烯研究领域的最新进展。

此次会议人才济济，国际上绝大多数硅烯领域的研究组均参与了会议。来自国外的专家包括巴黎第十一大学（University of Paris Sud）的Hamid Oughaddou、Andrew Mayne，北陆先端科学技术大学院大学（Japan Advanced Institute of Science and Technology）的Antoine Fleurence，南加州要塞军事学院（Citadel Military College of South Carolina）的Lok C. Lew Yan Voon，艾克斯-马赛大学（Aix-Marseille Université）的Guy Le Lay、Bernard Aufray、Haik Jamgotchian，卧龙岗大学（University of Wollongong）的Yi Du，来自中山大学（Natl Sun Yat Sen University）的W. F. Tsai，柏林工业大学（Technical University of Berlin）的Patrick Vogt，意大利国家研究委员会（Consiglio Nazionale delle Ricerche-ISM）的Paola De Padova，荷兰屯特大学（University of Twente）的Bene Poelsema；法国同步辐射（French synchrotron）的Azeddine Bendounan；圆周理论物理研究所（Perimeter Institute for Theoretical Physics）的Ganapathy Baskaran；荷兰屯特大学MESA+纳米技术研究所（MESA+Institute for Nanotechnology）的Frank Wiggers；来自国内的专家包括北京理工大学的姚裕贵，大连理工大学的赵纪军，浙江大学的皮孝东，北京大学的吕劲，清华大学的倪军，物理所的陈岚、王业亮、李晖、冯宝杰。

硅烯是由纯硅构成的类似石墨烯的单层结构，理论还表明硅烯具备与石墨烯类似的Dirac型电子结构，其布里渊区同样有六个线性色散的Dirac锥。因而理论预言硅烯也会具有和石墨烯类似的奇异量子效应。同时，作为与半导体硅工业兼容的材料，其应用前景不言而喻。在实验上，2012年物理所吴克辉研究组及来自法国、日本的另两个研究组同时报道了在实验室成功获得硅烯。受此鼓舞，国际上关于硅烯的研究呈现突然的指数增长的趋势。而针对硅烯研究中取得的突破、面临的困难、以及国际合作的开展而召开国际硅烯方面的研讨会显得十分必要。

此前，由Abdelkader Kara教授发起的国际硅烯会议，已经举办过三届。但此前的会议规模过小，实际上都仅是在一些欧洲的国际会议内作为一个分会来举办。由于目前硅烯研究领域的迅速扩大，经国际同仁的讨论，将第四届硅烯会议在北京由中科院物理所来举办会议。本次会议的举办成功，也是国际上第一次在硅烯研究领域的独立盛会，对硅烯领域的发展起到了十分有益的推动作用。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/snxw/201406/t20140619_4140243.html

10 发表文章

发表文章目录/Publications List

- 1 Xuezheng Tian, Lifeng Wang, Xiaomin Li, Jiake Wei, Shize Yang, Zhi Xu, Wenlong Wang, and Xuedong Bai, Recent Development of Studies on the Mechanism of Resistive Memories in Several Metal Oxides, **SCIENCE CHINA-PHYSICS, MECHANICS & ASTRONOMY** 56, 2361 (2013).
- 2 Xiangcheng Sun, Kai Sun, Yongqing Wang, Xuedong Bai, Caiyun Chen, and Bo Cui, Scale-up synthesis, Structure Characterization and Electrochemical Characteristics of C-LiFePO₄ Nanocomposites for Lithium Ion Rechargeable Batteries, **INTERNATIONAL JOURNAL OF ELECTROCHEMICAL SCIENCE** 8, 12816 (2013).
- 3 Lifeng Wang, Zhi Xu, Shize Yang, Xuezheng Tian, Jiake Wei, Wenlong Wang, and Xuedong Bai, Real-Time in situ TEM Studying the Fading Mechanism of Tin Dioxide Nanowire Electrodes in Lithium Ion Batteries, **SCIENCE CHINA-TECHNOLOGICAL SCIENCES** 56, 2630 (2013).
- 4 Min Zeng, Wenlong Wang, and Xuedong Bai, Preparing Three-Dimensional Graphene Architectures: Review of Recent Developments, **CHINESE PHYSICS B** 22, 098105 (2013).
- 5 Muhong Wu, Xiao Li, Ding Pan, Lei Liu, Xiaoxia Yang, Zhi Xu, Wenlong Wang, Yu Sui, and Xuedong Bai, Synthesis of Nitrogen-Doped Single-Walled Carbon Nanotubes and Monitoring of Doping by Raman Spectroscopy, **CHINESE PHYSICS B** 22, 086101 (2013).
- 6 Qingli Huang, Fan Li, Yun Gong, Jianheng Luo, Shize Yang, Yanhong Luo, Dongmei Li, Xuedong Bai, and Qingbo Meng, Recombination in SnO₂-Based Quantum Dots Sensitized Solar Cells: The Role of Surface States, **JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C** 117, 10965 (2013).
- 7 Xiaoxia Yang, Zixuan Guan, Min Zeng, Jiake Wei, Wenlong Wang, and Xuedong Bai, Facile Synthesis of Large-Area Ultrathin Hexagonal BN Films via Self-Limiting Growth at the Molten B₂O₃ Surface, **SMALL** 9, 1353 (2013).
- 8 Lei Zhao, Yejun Qiu, Jie Yu, Xianyu Deng, Chenglong Dai, and Xuedong Bai, Carbon Nanofibers with Radially Grown Graphene Sheets Derived from Electrospinning for Aqueous Supercapacitors with High Working Voltage and Energy Density, **NANOSCALE** 5, 4902 (2013).

- 9 Kaihui Liu, Xiaoping Hong, Muhong Wu, Fajun Xiao, Wenlong Wang, Xuedong Bai, Joel W Ager, Shaul Aloni, Alex Zettl, Enge Wang, and Feng Wang, Quantum-Coupled Radial-Breathing Oscillations in Double-Walled Carbon Nanotubes, **NATURE COMMUNICATIONS** 4, 1375 (2013).
- 10 Liao Longguang, Zhang Wenbin, Yu Tongxu, Cao Zexian, A Self-similar Transformation for A Dodecagonal Quasiperiodic Covering with T-clusters, **APPLID PHYSICS A** 46, 245205 (2013).
- 11 Liao longguang, Zhang Wenbin, Yu tongxu, Cao Zexian, A Single Cluster Covering for Dodecagonal Quasiperiodic Ship Tiling, **CHINESE PHYSICS LETTERS** 30, 026102 (2013).
- 12 Ji Ailing, Lu Nianpeng, Gao Lei, Zhang Wenbin, Liao Longguang, Cao Zexian, Electrical Properties and Thermal Stability of Pd-doped Copper Nitride Films, **JOURNAL OF APPLIED PHYSICS** 113, 043705 (2013).
- 13 Lu Nianpeng, Liao Longguang, zhang Wenbin, Yu tongxu, Ji Ailing, Cao Zexian, Growth of Nano-and Microcrystalline Silicon Thin Films At Low Temperature By Pulsed Electron Deposition, **JOURNAL OF CRYSTAL GROWTH** 375, 67 (2013).
- 14 Lu Nianpeng, Ji ailing, Cao Zexian, Nearly Constant Electrical Resistance over Large Temperature Range in Cu_3NM_x (M =Cu, Ag, Au) Compounds, **SCIENTIFIC REPORTS** 3, 3090 (2013).
- 15 Wenbing Zhang, Tongxu Yu, Longguang Liao, Zexian Cao, Ring Formation From A Drying Sessile Colloidal Droplet, **AIP ADVACNES** 4, 102109 (2013).
- 16 Huang Rao, Du yun, Ji Ailing, Cao Zexian, Time-resolved Photoluminescence from Si-in-SiNx/Si-in-SiC Quantum well-dot Structures, **OPTICAL MATERIALS** 35, 2414 (2013).
- 17 Zhi Zhou, Ying Hu, Hao Wang, Zhi Xu, Wenlong Wang, Xuedong Bai, Xinyan Shan & Xinghua Lu, DNA Translocation through Hydrophilic Nanopore in Hexagonal Boron Nitride, **SCIENTIFIC REPORTS** 3, 3287 (2013).
- 18 Ben-Li Wang, Rui Wang, R. J. Liu, X. H. Lu, Jimin Zhao & Zhi-Yuan Li, Origin of Shape Resonance in Second-Harmonic Generation from Metallic Nanohole Arrays, **SCIENTIFIC REPORTS** 3, 2358 (2013).

- 19 Yanan Wang, Zhihua Su, Wei Wu, Shu Nie, Nan Xie, Huiqi Gong, Yang Guo et al., Resonance Raman Spectroscopy of G-line and Folded Phonons in Twisted Bilayer Graphene, **APPLIED PHYSICS LETTERS** 103, 123101 (2013).
- 20 XIE Nan, GONG Huiqi, ZHOU Zhi, GUO Xiao-Dong, YAN Shi-Chao, SUN Qian et al., Visualization of a Maze-like Reconstruction of Graphene on Copper Surface at the Atomic Scale, **CHINESE PHYSICS LETTERS** 30(5), 056802 (2013).
- 21 GUO Xiao-Dong, DONG Li, GUO Yang, SHAN Xin-Yan, ZHAO Ji-Min, LU Xing-Hua, Detecting Larmor Precession of a Single Spin with a Spin-Polarized Tunneling Current, **CHINESE PHYSICS LETTERS** 30(1), 017601 (2013).
- 22 Shuai Wang, Shuming Liu, Jiandong Guo, and Qinlin Guo, Surface Electronic Structure and Morphology of Silver on Iron Oxide Films, **SURFACE SCIENCE** 607, 124 (2013).
- 23 Yuanyuan Tang, Huajun Qin, Kehui Wu, Qinlin Guo, and Jiandong Guo, The Reduction and Oxidation of Fe₂O₃(0001) Surface Investigated by Scanning Tunneling Microscopy, **SURFACE SCIENCE** 609, 67 (2013).
- 24 Yuanyuan Tang and Jiandong Guo, Strong Localization Across the Metal-insulator Transition at the Ag/Si(111)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)-R30° Interface, **FRONTIERS OF PHYSICS** 8, 44 (2013).
- 25 Jiagui Feng, Xuetao Zhu and Jiandong Guo, Reconstructions on SrTiO₃(111) Surface Tuned by Ti/Sr Deposition, **SURFACE SCIENCE** 614, 38 (2013).
- 26 Xuetao Zhu, Colin Howard, Jiandong Guo, and Michael El-Batanouny, Electron-Phonon Coupling in the Surface of Topological Insulators, **RECENT RESEARCH DEVELOPMENTS IN SURFACE SCIENCE, TRANSWORLD RESEARCH, INDIA** (2013).
- 27 Shuming Liu, Shuai Wang, Wentao Li, Jiandong Guo, and Qinlin Guo, Water Dissociation on Magnetite (001) Films, **JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C** 117, 14070 (2013).
- 28 Zhiming Wang, Fengmiao Li, Sheng Meng, Jiandi Zhang, E. W. Plummer, Ulrike Diebold, and Jiandong Guo, Strain-Induced Defect Superstructure on the SrTiO₃(110) Surface, **PHYSICAL REVIEW LETTERS** 111, 056101 (2013).
- 29 Shuming Liu, Shuai Wang, Wentao Li, Jiandong Guo, and Qinlin Guo, Growth and Electronic Structure of Ag on Polar MgO(111) Films, **RSC ADVANCES** 3, 18916 (2013).
- 30 Fang Yang, Zhenzhong Yang, Wentao Li, Fengmiao Li, Xuetao Zhu, Lin Gu, H. D. Lee, S. Shubeita, C. Xu, T. Gustafsson, and Jiandong Guo, Dielectric and Insulating Properties of SrTiO₃/Si Heterostructure Controlled by Cation Concentration, **SCIENCE CHINA PHYSICS, MECHANICS & ASTRONOMY** 56, 2402 (2013).

- 31 Lan Chen, Hui Li, Baojie Feng, Zijing Ding, Jinglan Qiu, Peng Cheng, Kehui Wu and Sheng Meng, Spontaneous Symmetry Breaking and Dynamic Phase Transition in Monolayer Silicene, **PHYSICAL REVIEW LETTERS** 110, 085504 (2013).
- 32 Baojie Feng, Hui Li, Cheng-Cheng Liu, Tingna Shao, Peng Cheng, Yugui Yao, Sheng Meng, Lan Chen and Kehui Wu, Observation of Dirac Cone Warping and Chirality Effects in Silicene, **ACS NANO** 7, 9049 (2013).
- 33 Lan Chen, Baojie Feng, and Kehui Wu, Observation of A Possible Superconducting Gap in Silicene on Ag(111) Surface, **APPLID PHYSICS LETTERS** 102, 081602 (2013).
- 34 Huajun Qin, Ying Jiang, Guanhua Zhang, and Kehui Wu, Interaction of Surface and Interface Plasmons in Extremely Thin Al Films on Si(111), **APPLID PHYSICS LETTERS** 102, 081602(2013).
- 35 Y. Jiao, F. Zhang, M. Graetzel, and S. Meng, Structure-property Relation in All-organic Dye Sensitized Solar Cells, **ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS** 23, 424 (2013).
- 36 J. Feng, Y. Jiao, W. Ma, Md. K. Nazeeruddin, M. Graetzel, S. Meng, First Principles Design of Dye Molecules with Ullazine Donor for Dye Sensitized Solar Cells, **JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C** 117, 3772 (2013).
- 37 J. Bang, Z. Wang, F. Gao, S. Meng, and S. B. Zhang, Suppression of Nonradiative Recombination in Ionic Insulators by Defects: Role of Fast Electron Trapping in TI-doped CsI, **PHYSICAL REVIEW B** 87, 205206 (2013).
- 38 F. Gao, Z. J. Ding, and S. Meng, Three-dimensional Metal-intercalated Covalent Organic Frameworks for Near-ambient Energy Storage, **SCIENTIFIC REPORTS** 3, 1882 (2013).
- 39 Fan Zhang, Feng Shi, Wei Ma, Fei Gao, Yang Jiao, Hui Li, Jingchuan Wang, Xinyan Shan, Xinghua Lu, and S. Meng, Controlling Adsorption Structure of Eosin Y Dye on Nanocrystalline TiO₂ Films for Improved Photovoltaic Performances, **JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C** 117, 14659 (2013).
- 40 Yang Jiao, Wei Ma, and S. Meng, Quinoid Conjugated Dye Designed for Efficient Sensitizer in Dye Sensitized Solar Cells, **CHEMICAL PHYSICS LETTERS** 586, 97 (2013).
- 41 Chongqin Zhu, Hui Li, X.C. Zeng, E. G. Wang, and S. Meng, Quantized Water Transport: Ideal Desalination through Graphyne-4 Membrane, **SCIENTIFIC REPORTS** 3, 3163 (2013).
- 42 Wei Ma, Yang Jiao, and S. Meng, Modeling Charge Recombination in Dye-sensitized Solar Cells Using First-principles Electron Dynamics: Effects of Structural Modification, **PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS** 15, 17187 (2013).
- 43 J. Bang, S. Meng, Y.-Y. Sun, D. West, Z. Wang, F. Gao, and S. B. Zhang, Regulating Energy Transfer of Excited Carriers and the Case for Excitation-induced Hydrogen Dissociation on Hydrogenated Grapheme, **PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF THE SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA** 110, 908 (2013).

- 44 G. A. Tritsarlis, E. Kaxiras, S. Meng, E. G. Wang, Adsorption and Diffusion of Lithium on Layered Silicon for Li-ion Storage, **NANO LETTERS** 13, 2258 (2013).
- 45 C. Q. Zhu, H. Li, Y. F. Huang, X. C. Zeng, and S. Meng, Microscopic Insight into Surface Wetting: Relations Between Interfacial Water Structure and the Underlying Lattice Constant, **PHYSICAL REVIEW LETTERS** 110, 126101 (2013).
- 46 Shize Yang, Xuezheng Tian, Lifeng Wang, Jiake Wei, Kuo Qi, Xiaomin Li, Zhi Xu, Wenlong Wang, Jinmin Zhao, Xuedong Bai, and Enge Wang, In-situ Optical Transmission Electron Microscope Study of Exciton Phonon Replicas in ZnO Nanowires by Cathodoluminescence, **APPLIED PHYSICS LETTERS** 105, 071901 (2014).
- 47 Lifeng Wang, Donghua Liu, Shize Yang, Xuezheng Tian, Guangyu Zhang, Wenlong Wang, Enge Wang, Zhi Xu, and Xuedong Bai, Exotic Reaction Front Migration and Stage Structure in Lithiated Silicon Nanowires, **ACS NANO** 8, 8249 (2014).
- 48 Kaihui Liu, Xiaoping Hong, Sangkook Choi, Chenhao Jin, Rodrigo B. Capaz, Jihoon Kim, Wenlong Wang, Xuedong Bai, Steven G. Louie, Enge Wang, and Feng Wang, Systematic Determination of Absolute Absorption Cross-section of Individual Carbon Nanotubes, **PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF THE SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA** 111, 7564 (2014).
- 49 Jing Zhang, Hua Yu, Wei Chen, Xuezheng Tian, Donghua Liu, Meng Cheng, Guibai Xie, Wei Yang, Rong Yang, Xuedong Bai, Dongxia Shi, and Guangyu Zhang, Scalable Growth of High-Quality Polycrystalline MoS₂ Monolayers on SiO₂ with Tunable Grain Sizes, **ACS NANO** 8, 6024 (2014).
- 50 Jiake Wei, Zhi Xu, Hao Wang, Xuezheng Tian, Shize Yang, Lifeng Wang, Wenlong Wang, and Xuedong Bai, In-situ TEM Imaging of the Anisotropic Etching of Graphene by Metal Nanoparticles, **NANOTECHNOLOGY** 25, 465709 (2014).
- 51 Chong Zhao, Zhi Xu, Hao Wang, Jiake Wei, Wenlong Wang, Xuedong Bai, and Enge Wang, Carbon-Doped Boron Nitride Nanosheets with Ferromagnetism above Room Temperature, **ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS** 24, 5985 (2014).
- 52 Guibai Xie, Rong Yang, Peng Chen, Jing Zhang, Xuezheng Tian, Shuang Wu, Jing Zhao, Meng Cheng, Wei Yang, Duoming Wang, Congli He, Xuedong Bai, Dongxia Shi, Guangyu Zhang, A General Route Towards Defect and Pore Engineering in Graphene, **SMALL** 10, 2280 (2014).
- 53 Lifeng Wang, Zhi Xu, Wenlong Wang, and Xuedong Bai, Atomic Mechanism of Dynamic Electrochemical Lithiation Processes of MoS₂ Nanosheets, **JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY** 136, 6693 (2014).

- 54 Xuezheng Tian, Shize Yang, Min Zeng, Lifan Wang, Jiake Wei, Zhi Xu, Wenlong Wang, and Xuedong Bai, Bipolar Electrochemical Mechanism for Mass Transfer in Nanoionic Resistive Memories, **ADVANCED MATERIALS** 26, 3649 (2014).
- 55 Xuezheng Tian, Lifan Wang, Jiake Wei, Shize Yang, Wenlong Wang, Zhi Xu, and Xuedong Bai, Filament Growth Dynamics in Solid Electrolyte-based Resistive Memories Revealed by in Situ TEM, **NANO RESEARCH** 7, 1065 (2014).
- 56 Feng Yang, Xiao Wang, Daqi Zhang, Juan Yang, Da Luo, Ziwei Xu, Jiake Wei, Jianqiang Wang, Zhi Xu, Fei Peng, Xuemei Li, Ruoming Li, Yilun Li, Meihui Li, Xuedong Bai, Feng Ding, and Yan Li, Chirality-specific Growth of Single-walled Carbon Nanotubes on Solid Alloy Catalysts, **NATURE** 510, 522 (2014).
- 57 Yunlong Zhao, Jiangang Feng, Xue Liu, Fengchao Wang, Lifan Wang, Changwei Shi, Lei Huang, Xi Feng, Xiyuan Chen, Lin Xu, Mengyu Yan, Qingjie Zhang, Xuedong Bai, Hengan Wu, and Liqiang Mai, Self-adaptive Strain-relaxation Optimization for High-energy Lithium Storage Material through Crumpling of Graphene, **NATURE COMMUNICATIONS** 5, 4565 (2014).
- 58 Peifeng Li, Qingliang Liao, Shize Yang, Xuedong Bai, Yunhua Huang, Xiaoqin Yan, Zheng Zhang, Shuo Liu, Pei Lin, Zhuo Kang, and Yue Zhang, In Situ Transmission Electron Microscopy Investigation on Fatigue Behavior of Single ZnO Wires under High-Cycle Strain, **NANO LETTERS** 14, 480 (2014).
- 59 Lei Zhao, JieYu, Wenjun Li, Shuguang Wang, Chenglong Dai, Junwei Wu, Xuedong Bai, and Chunyi Zhi, Honeycomb Porous MnO₂ Nanofibers Assembled from Radially Grown Nanosheets for Aqueous Supercapacitors with High Working Voltage and Energy Density, **NANO ENERGY** 4, 39 (2014).
- 60 Zhiwen Shi, Chenhao Jin, Wei Yang, Long Ju, Jason Horng, Xiaobo Lu, Hans A. Bechtel, Michael C. Martin, Deyi Fu, JunqiaoWu, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Yuanbo Zhang, Xuedong Bai, EngeWang, Guangyu Zhang, and Feng Wang, Gate-dependent Pseudo Spin Mixing in Graphene/boron Nitride Moiré Superlattices, **NATURE PHYSICS** 10, 743 (2014).
- 61 Lei Liu, David A. Siegel, Wei Chen, Peizhi Liu, Junjie Guo, Gerd Duscher, Chong Zhao, Hao Wang, Wenlong Wang, Xuedong Bai, Kevin F. McCarty, Zhenyu Zhang, and Gong Gu, Unusual Role of Epilayer-substrate Interactions in Determining Orientational Relations in Van Der Waals Epitaxy, **PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF THE SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA** 111, 16670 (2014).
- 62 Jonathan Garel, Chong Zhao, Ronit Popovitz-Biro, Dmitri Golberg, Wenlong Wang, and Ernesto Joselevich, **NANO LETTERS** 14, 6132 (2014).

- 63 Chao Zhang, Wei Tian, Zhi Xu, Xi Wang, Jiangwei Liu, Song-Lin Li, Dai-Ming Tang, Dequan Liu, Meiyong Liao, Yoshio Bando, Dmitri Golberg, Photosensing Performance of Branched CdS/ZnO Heterostructures as Revealed by in Situ TEM and Photodetector Tests, **NANOSCALE** 6, 8084 (2014).
- 64 Cao zexian, Intermediate Sp-hybridization for Chemical Bonds in Nonplanar Covalent Molecules of Carbon, **CHINESE PHYSICS B** 23, 063102 (2014).
- 65 Zhengshi Chang, NanJiang, Guanjun Zhang, Zexian Cao, Influence of Penning Effect on the Plasma Features in a Non-equilibrium Atmospheric Pressure Plasma Jet, **JOURNAL OF APPLIED PHYSICS** 115, 103301 (2014).
- 66 Jun Hu, Zexian Cao, Water Science on the Molecular Scale: New Insights into the Characteristics of Water, **NATIONAL SCIENCE REVIEW** 1, 179 (2014).
- 67 Liao Longguang, Cao Zexian, Directional Scaling Symmetry of High-symmetry Two-dimensional Lattices, **SCIENTIFIC REPORTS** 4, 6193 (2014).
- 68 Yanan Wang, Zhihua Su, Wei Wu, Shu Nie, Xinghua Lu, Haiyan Wang, Kevin McCarty, Shin-shem Pei, Francisco Robles-Hernandez, Viktor G Hadjiev, Jiming Bao, Four-fold Raman Enhancement of 2D Band in Twisted Bilayer Graphene: Evidence for a Doubly Degenerate Dirac Band and Quantum Interference, **NANOTECHNOLOGY**, 25, 335201 (2014).
- 69 Ying Hu, Zhi Zhou, Xinyan Shan, Xinghua Lu, Detection and Analysis of DNA Recapture through a Solid-state Nanopore, **CHINESE SCIENCE BULLETIN** 59(35), 4953-4959(2014).
- 70 曹凝, 金鹏, 王占国, 陆兴华, 姚冠辉, 詹文山, 深紫外固态激光光源前沿装备研制, **中国科学院院刊**, 29, 507 (2014).
- 71 ZHOU Zhi, HU Ying, SHAN Xin-Yan, LU Xing-Hua, Raman Spectrum of Epitaxial Graphene Grown on Ion Beam Illuminated 6H-SiC (0001), **CHINESE PHYSICS LETTERS** 31(11), 116801 (2014).
- 72 L. B. Liao, Q. H. Zhang, Z. H. Su, Z. Z. Zhao, Y. N. Wang, Y. Li, X. X. Lu, D. G. Wei, G. Y. Feng, Q. K. Yu, X. J. Cai, Jimin Zhao, Z. F. Ren, H. Fang, F. Robles-Hernandez, S. Baldelli and Jiming Bao, Efficient Solar Water-splitting Using a Nanocrystalline CoO Photocatalyst, **NATURE NANOTECHNOLOGY** 9, 69 (2014).
- 73 Shaofeng Ge, Xuefeng Liu, Xiaofen Qiao, Qinsheng Wang, Zhen Xu, Jun Qiu, Ping-Heng Tan, Jimin Zhao, Dong Sun, Coherent Longitudinal Acoustic Phonon Approaching THz Frequency in Multilayer Molybdenum Disulphide, **SCIENTIFIC REPORTS** 4, 5722 (2014).
- 74 Fei Sun, Rui Wang, C. Aku-Leh, H. X. Yang, Rui He, and Jimin Zhao, Double Charge Ordering States and Spin Ordering State Observed in a RFe₂O₄ System, **SCIENTIFIC REPORTS** 4, 6429 (2014).
- 75 Wentao Li, Shuming Liu, Shuai Wang, Qinlin Guo, and Jiandong Guo, The Roles of Reduced Ti Cations and Oxygen Vacancies in Water Adsorption and Dissociation on SrTiO₃(110), **JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C** 118, 2469 (2014).

- 76 Jiehui He, Liqun Jiang, Jinglan Qiu, Lan Chen and Kehui Wu, Growth of Atomically Flat Ultra-Thin Ag Films on Si(111) by Introducing a $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ga Buffer Layer, **CHINESE PHYSICS LETTERS** 31, 128103(2014).
- 77 Ya Feng, Baojie Feng, Zhuojin Xie, Wenbin Li, Xu Liu, Defa Liu, Lin Zhao, Lan Chen, Xingjiang Zhou, Kehui Wu, Observation of a Flat Band in Silicene, **CHINESE PHYSICS LETTERS** 31, 127303(2014).
- 78 Huixia Fu, Jin Zhang, Zijing Ding, Hui Li, and S. Meng, Stacking-dependent Electronic Structure of Bilayer Silicene, **APPLIED PHYSICS LETTERS** 104, 131904 (2014).
- 79 Wei Ma, Yang Jiao, and S. Meng, Predicting Energy Conversion Efficiency of Dye Solar Cells from First Principles, **JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C** 118, 16447 (2014).
- 80 Wei Ma, Fan Zhang, and S. Meng, Dye-sensitized Solar Cells: Atomic Scale Investigation of Interface Structure and Dynamics, **CHINESE PHYSICS B** 23, 086801 (2014).
- 81 H. W. Yang, H. R. Zhang, Y. Li, S. F. Wang, X. Shen, Q. Q. Lan, S. Meng, R. C. Yu, B. G. Shen, J. R. Sun, Anomalous Magnetism in Strained $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ Epitaxial Films ($0 < x < 0.5$), **SCIENTIFIC REPORTS** 4, 6206 (2014).
- 82 Y. H. Yu, L. M. She, H. X. Fu, M. Huang, H. Li, S. Meng, and G. Y. Cao, Kondo Effect Mediated Topological Protection: Co on Sb(111), **ACS NANO** 8, 11576 (2014).
- 83 C. Q. Zhu, Hui Li, and S. Meng, Transport Behavior of Water Molecules through Two-dimensional Nanopores, **JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS** 141, 18C502 (2014).
- 84 L. Pan, G. Liu, H. Li, S. Meng, L. Han, J. Jie, B. Chen, A. Platero-Prats, W. Lu, X.D. Zou, R. W. Li, A Resistance-Switchable and Ferroelectric Metal-Organic Framework, **JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY** 136, 17477 (2014).
- 85 F. Zhang, W. Ma, Y. Jiao, J. C. Wang, X. Y. Shan, H. Li, X. H. Lu, and S. Meng, Precise Identification and Manipulation of Adsorption Geometry of Donor- π -Acceptor Dye on Nanocrystalline TiO_2 Films for Improved Photovoltaics, **ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES** 6, 22359(2014).
- 86 W. Wan, H. Li, H. Huang, S. L. Wong, L. Lv, Y. Gao, A. T. S. Wee, Incorporating Isolated Molybdenum(Mo) Atoms into Bilayer Epitaxial Graphene on 4H-SiC(0001), **ACS NANO** 8, 970 (2014).

中国科学院物理研究所

INSTITUTE OF PHYSICS CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

北京凝聚态物理国家实验室（筹）

BEIJING NATIONAL LABORATORY FOR CONDENSED MATTER PHYSICS

表面物理国家重点实验室

STATE KEY LABORATORY FOR SURFACE PHYSICS

地址：北京市海淀区中关村南三街8号 北京603信箱19分箱

邮政编码：100190

邮箱：surface@iphy.ac.cn

网址：<http://surface.iphy.ac.cn/>