

目录

CONTENTS

01

Preface

前言 / 01

02

Introduction

实验室概况 / 03

03

Group Annual Work Progress

课题组年度工作进展 / 11

04

International Cooperations and

Academic Exchanges

国际合作与学术交流 / 38

05

Selected Research Programs

部分科研项目 / 48

06

Recruitment and Training

人才引进及培养 / 49

07

Laboratory Equipments

实验室设备 / 61

08

Honors and Awards

荣誉和奖励 / 65

09

Publication List

发表文章 / 66

10

Brief Progress Reports

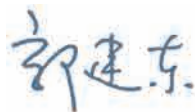
相关报道 / 76

01 前言

表面物理国家重点实验室坚持以发展表面低维量子结构的精确可控制备技术与新型高分辨率分析方法为基础，着眼于信息、能源等学科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。2017-2018年间，实验室在围绕二维材料、拓扑电子态、水溶液玻璃化转变、冰的高压稳定结构以及复杂氧化物及其异质界面新奇物理性质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114篇，其中*Nature* 1篇，*Nature* 子刊4篇，*Physics Review Letters* 7篇，*Journal of American Chemical Society* 1篇，*Nano Letters* 6篇，*Advanced Materials* 5篇；受邀在美国物理学会三月会议等国际重要学术会议上作邀请报告。2017年，吴克辉入选科技部创新人才推进计划中青年科技创新领军人才，在2018年获得基金委国家杰出青年基金项目支持。

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。2014年以来，实验室加快推进共享仪器建设，形成了集理论计算、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研究手段全面、完善的“低维量子结构表征与操纵平台”，包含27台/套大型仪器，在实验室内部共享并对外开放。在物理所2013年起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”项目中，表面实验室人员全面参与，负责了“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，为项目一期顺利完成贡献了重要力量，并将在项目二期工作中继续发挥作用。继2012年创办“Recent Progress in Oxide Interfaces”年度系列研讨会以来，实验室每年坚持主办量子材料低维结构方面的国际研讨会，吸引了这一新兴领域的众多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。实验室还一直坚持推动“表面科学论坛”和“物理半月谈”活动，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。在此谨向大家表示最衷心的感谢！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

2019年3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 instruments and controllable growth techniques with ultimate precision. During the year 2017-2018, series of significant progresses have been achieved in studies of two-dimensional materials, topological electron states, glassy transition of aqueous solutions, high-pressure stable phases of ice, films and heterointerfaces of transition metal oxides. More than 100 SCI papers were published, including 1 in *Nature*, 4 in *Nature subsidiaries*, 7 in *Physics Review Letters*, 1 in *Journal of the American Chemical Society*, 6 in *Nano Letters* and 5 in *Advanced Materials*. Several lab members were invited to present their works in the key international scientific conferences including the March Meeting of American Physics Society. The lab recruited several young talents in 2018: Dr. Miao Liu from UCLA, Dr. Nianpeng Lu from Tsinghua University, Dr. Baojie Feng from Hiroshima University, Dr. Lifan Wang from Argonne National Laboratory, and Dr. Cui Zhang from Institute of Applied Physics and Computational Mathematics. In 2017, Kehui Wu was awarded the “Leading Talents of Science and Technology Innovation”; In 2018, he was awarded the Distinguished Young Scholar of National Natural Science Fund. In 2018, Zexian Cao was awarded the Annual News Figure of Science in China – the Science Communicators.

The lab encourages original research explorations, while we are also making great efforts to organize teams for major national projects. Since 2014, we have made major progresses in establishing the shared network of instruments. A comprehensive instrument platform was established with 27 sets of equipment for material computation, fabrication of low-dimensional structures, high-resolution characterization, spectroscopy with multiple degrees of freedom, and electric transport measurements, etc. In the Strategic Priority Research Program (B) of the Chinese Academy of Sciences that the institute undertakes (2013-2018), “Topological States, Superconductivity, and Manipulation of Novel States of Matter”, 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”. We will continue playing important roles in the project in the next term. Following the first international workshop on oxide interfaces in IOP in 2012, we organize the series of the workshop annually. Worldwide experts in this emerging field have been attracted to exchange their latest progress and to initiate solid collaborations with IOP. To promote the exchange of scientific ideas, we organize the Surface Science Colloquium and the Semimonthly Forum on Physics. All these efforts have laid a solid foundation for our sustainable developments in the future.

We sincerely appreciate the tremendous helps and supports 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 bright future.



Director: Jiandong Guo
March, 2019

02 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 25 名，在站博士后 4 名，在读研究生 88 名。

实验室以物质表面和界面为主要研究对象，使用高精度原子尺度实验工具，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、功能调控与物理机制等方面的研究。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 / 界面各种新奇电子态、低维量子结构中的局域效应及其集体激发特性、以及相关的电子激发态超快动力学特征等。实验室设六个课题组，研究内容包括：

- 原位电子显微学与低维结构物性研究
- 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，包括主持财政部国家重大科研装备研制项目“超高时空分辨原位多尺度量子测量系统的研制”（项目负责人：白雪冬、许智）；主持中国科学院科研仪器设备研制重大项目“磁性氦原子散射谱仪的设计与搭建”（项目负责人：郭建东）；作为负责人承担国家重点研发计划及其多项子课题，以及基金委重点项目、面上项目等。

近五年来，实验室共发表文章 250 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：吴克辉 2017 年入选科技部创新人才推进计划中青年科技创新领军人才，曹则贤获得 2018 中

国科学年度新闻人物之科技传播者，朱学涛获得物理所 2018 年“科技新人奖”。2018 年，吴克辉获得基金委国家杰出青年基金项目支持。

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，着力搭建和谐一流的科研平台，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，10 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 25 regular staff members, 4 post doctors and 88 graduate students.

Our mission is to explore the fundamental aspects of novel phenomena at surfaces and interfaces, with a combination of atom-resolved experimental tools and first-principles calculations. Our research goal aims at 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, effects of the microstructure on macroscopic properties, and dynamic behaviors in excited electronic states. There are currently six research groups in the Lab:

- In-Situ Transmission Electron Microscopy and Properties of Low-dimensional Structures
- 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 and Electronic Properties of Low-dimensional Materials
- 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 Zhi Xu), the Key Project of Chinese Academy of Sciences – the Magnetic Helium Atom Scattering Spectroscopy (Primary Investigator: Jiandong Guo), and several other National Key Research and Development Programs of Chinese Ministry of Science and Technology, as well as the key projects of National Natural Science Fund of China.

Significant research progresses have been made in the Lab and have attracted lots of attention worldwide. During the past five years, we have published more than 250 papers in international peer-reviewed journals and filed tens of patents. Prizes and honorary have been awarded to Lab members, including the Leading Talents of Science and Technology Innovation (Kehui Wu, 2017), the Annual News Figure of Science in China – the Science Communicators (Zexian Cao, 2018), and the New Star Award of IOP (Xuetao Zhu, 2018). Kehui Wu was awarded the National Natural Science Fund for Distinguished Young Scholar in 2018.

It is our high priority to provide all members a first-class 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, ten have received National Distinguished 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 science and technology.

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：孟胜 研究员

Deputy Director: Prof. Sheng Meng

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

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 研究员 (院士)	Prof. Lijun WAN, Institute of Chemistry, CAS
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 教授 (院士)	Prof. Xinhe BAO, University of Science and Technology of China
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, Chinese Academy of Sciences
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)
2018 吴克辉 kehui Wu

 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

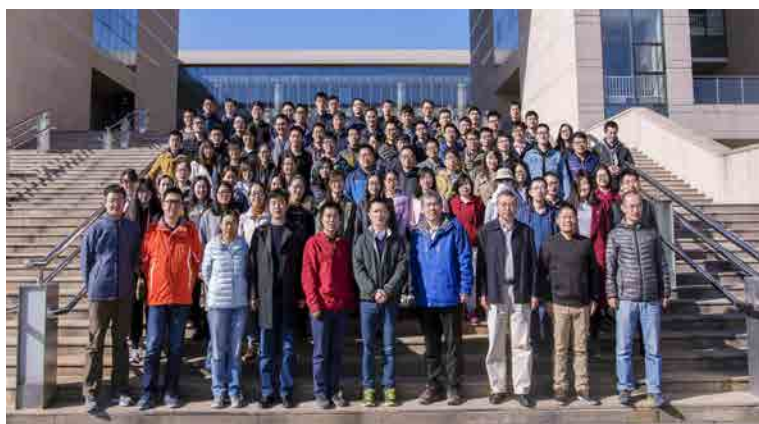
1999 张振宇 / 王恩哥 Zhenyu Zhang/Enge Wang
2001 施至刚 / 薛其坤 Zhigang Shi/Qikun Xue

 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

中国科学院“百人计划”入选者
CAS “100-talent” Program

1995	王恩哥	Enge Wang	
1998	曹则贤	Zexian Cao	
1998	薛其坤	Qikun Xue	(现在机构: 清华大学)
2000	贾金锋	Jinfeng Jia	(现在机构: 上海交通大学)
2002	夏 钊	Ke Xia	(现在机构: 北京师范大学)
2004	高世武	Shiwu Gao	(现在机构: 北京计算科学中心)
2004	吴克辉	Kehui Wu	
2005	郭建东	Jiandong Guo	
2009	陆兴华	Xinghua Lu	
2009	梁文杰	Wenjie Liang	
2009	孟 胜	Sheng Meng	
2014	王炜华	Weihua Wang	
2018	刘 淼	Miao Liu	
	鲁年鹏	Nianpeng Lu	
	冯宝杰	Baojie Feng	



2017 年研究生考核暨学术交流大会



2018 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

原位电子显微学与低维结构物性研究

In-Situ Transmission Electron Microscopy and Properties of Low-dimensional Structures

☑ 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及电子态调控

MBE Growth and Electronic Properties of Low-dimensional Materials

☑ 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

原位电子显微学与低维结构物性研究

In-Situ Transmission Electron Microscopy and Properties of Low-dimensional Structures

组长 /Leader:

白雪冬 Xuedong Bai

组员 /Group Members:

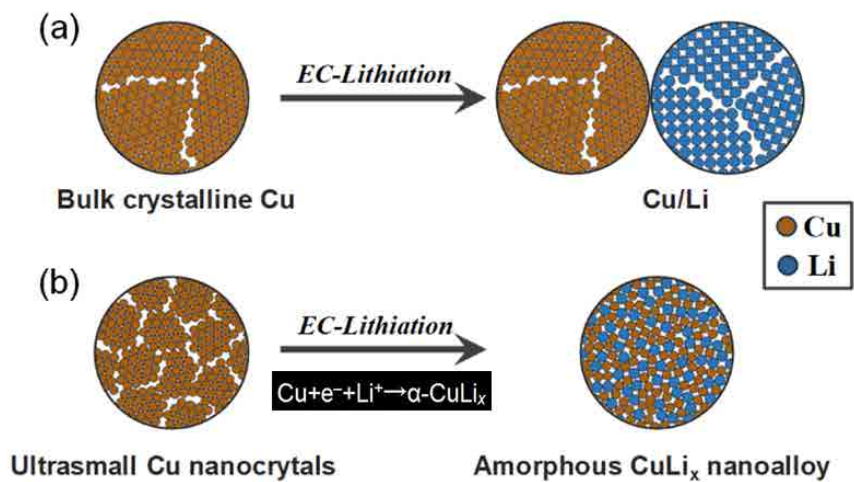
王文龙 Wenlong Wang 许智 Zhi Xu 尹彦 Yan Yin 王立芬 Lifen Wang

左勇刚 (博士后) Yonggang Zuo (Postdoctor)

王理 (博士后) Li Wang (Postdoctor)

Selected Scientific Results

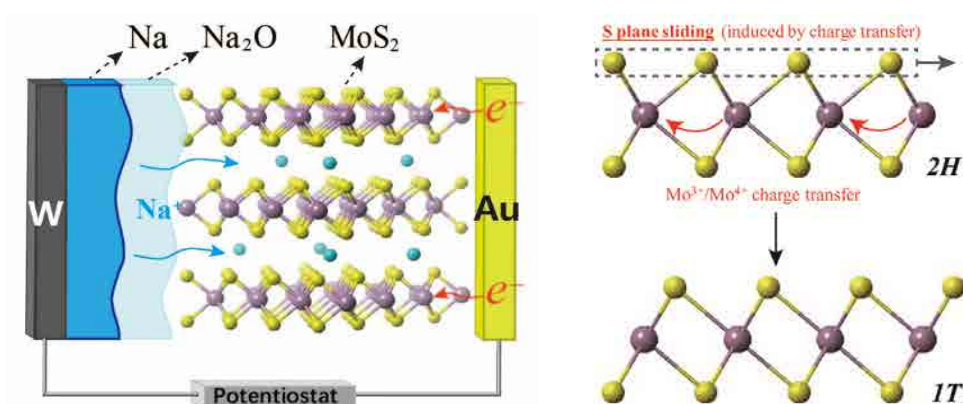
1. 发挥原位透射电镜方法具有构筑原型器件并可对微区动态变化过程进行原位实时观测表征的优势, 在 Cu-Li 互不固溶体系中首次发现了非晶合金化现象。研究表明, 在超小纳米尺度下, 混合热不再是 Cu-Li 体系能够发生合金化的决定性因素, 而纳米尺寸效应将发挥关键的调控作用。对超小 Cu 纳米颗粒而言, 由于表面能的显著增加所带来的反应活性的极大增强, 其电化学锂化和 CuLi_x 非晶合金相的形成将成为可能。这在一定程度上打破人们对其互不固溶特性的传统认识。此外, 在透射电镜中原位研究发现应力抑制的氧空位序动力学行为。相关结果发表在 Sci. Bull. 63, 1208 (2018) 上。



纳米尺寸效应调控 Cu-Li 固溶性质示意图。(a) 体材料 Cu 不会发生电化学锂化反应生成合金相。(b) 由于超小 Cu 纳米颗粒表面能显著增加, 导致发生电化学锂化, 生成 CuLi_x 非晶纳米合金。

人们对其互不固溶特性的传统认识。此外, 在透射电镜中原位研究发现应力抑制的氧空位序动力学行为。相关结果发表在 Sci. Bull. 63, 1208 (2018) 上。

2. 二硫化钼层状材料嵌钠动力学及相变机理研究利用原位透射电子显微学方法实时观测表征了钠离子嵌入二硫化钼的动力学过程, 并在原子尺度成像相变机理。碱金属嵌入是产生相变的一种方式, 采用钠离子嵌入二硫化钼使其产生相变, 并实时观测碱金属嵌入的动力学过程、相变的产生, 对于理解其相变机理具有重要意义。研究发现, 嵌入过程初期的中间相为 $2\text{H-Na}_{0.25}\text{MoS}_2$, 此中间相的特点是具有 $2 \times \sqrt{3}$ 的调制结构。进一步嵌钠实验发现二硫化钼发生相变, 即从 $2\text{H-Na}_{0.5}\text{MoS}_2$ 到 $1\text{T-Na}_{0.5}\text{MoS}_2$ 相变, 两种结构的特点都是 2×2 的调制结构。提出了一种新的相变机理, 即价间电荷转移是发生相变的主要原因。相关结果发表在 Adv. Mater. Inter. 4, 1700171 (2017) 上。



利用原位透射电镜技术，实时观测二硫化钼嵌入钠离子动态过程。发现嵌入过程初期为中间相 $2H\text{-Na}_{0.25}\text{MoS}_2$ ，具有 $2 \times \sqrt{3}$ 调制结构；进一步嵌钠发生从 $2H\text{-Na}_{0.5}\text{MoS}_2$ 到 $1T\text{-Na}_{0.5}\text{MoS}_2$ 相变，均为 2×2 调制结构；提出了价间电荷转移是发生相变的主要原因。

1. As a typical immiscible binary system, copper (Cu) and lithium (Li) show no alloying and chemical intermixing under normal circumstances. We show that, based on in-situ TEM technique, when decreasing Cu nanoparticle sizes into ultrasmall range, the nanoscale size effect can play a subtle yet critical role in mediating the chemical activity of Cu and therefore its miscibility with Li, such that the electrochemical alloying and solid-state amorphization will occur in such an immiscible system. This unusual observation was accomplished by performing in-situ studies of the electrochemical lithiation processes of individual CuO nanowires inside a transmission electron microscopy (TEM). Real-time TEM imaging unveils that there is a critical grain size (ca. 6 nm), below which the nanocrystalline Cu particles can be continuously lithiated and amorphized. And the strain-inhibited oxygen vacancy formation and migration in complex oxides has been also found by in-situ TEM.

2. As enabled by the real-time atomic scale imaging of in-situ electron microscopy, the mechanism of the phase transition has been investigated. The 2H to 1T phase transition of MoS_2 can be induced by intercalation with alkali metals, associated with transformation of its electronic and structural orders. We point out an intermediate phase $2H\text{-Na}_{0.25}\text{MoS}_2$ with $2 \times \sqrt{3}$ superstructure. The phase transition occurs from $2H\text{-Na}_{0.5}\text{MoS}_2$ to $1T\text{-Na}_{0.5}\text{MoS}_2$, where the ratio of Mo^{3+} and Mo^{4+} is 1:1 and intervalence charge transfer (IVCT) between the two ions should not be neglected. Based on this viewpoint we propose that the IVCT plays an important role in the formation of the phase transition.



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

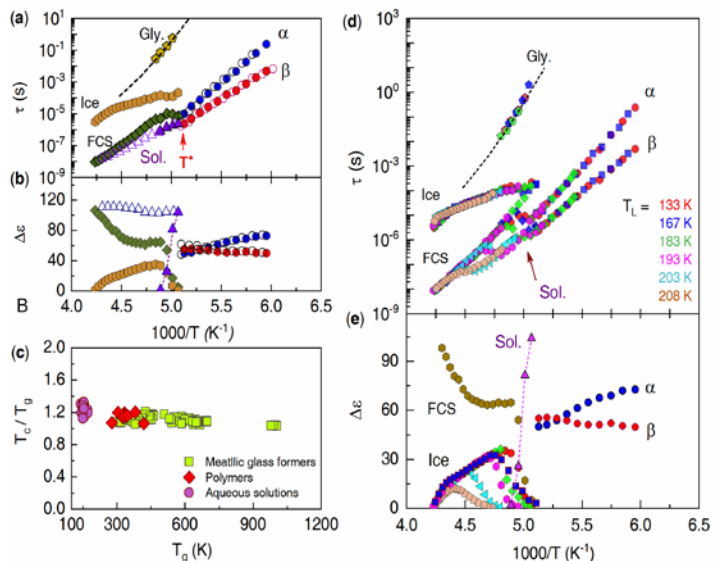
组员 /Group Members:

纪爱玲 Ailing Ji 王强 Qiang Wang 张凌云 Lingyun Zhang 鲁年鹏 Nianpeng Lu

Selected Scientific Results

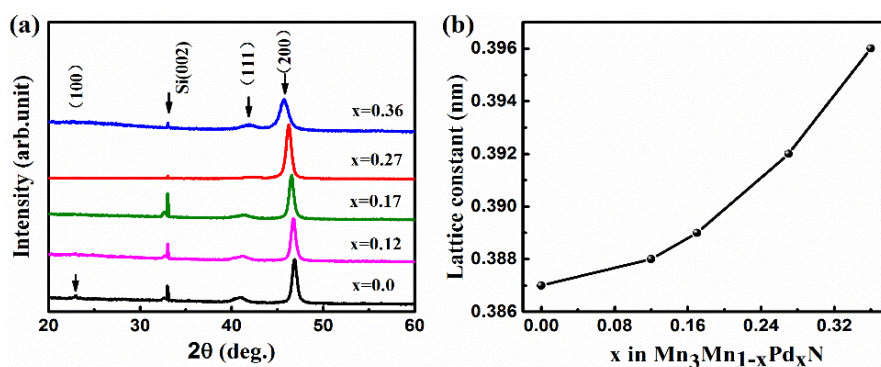
1. 水的冷结晶常见于中等浓度水溶液的升温或于深过冷长时间保温过程。该类型水溶液由密排水合溶质和位于其间的受限水组成。结合水和受限水极易玻璃化。这是生物组织低温保护的优选条件。但在随后的连续升温阶段，或在深过冷状态长时间保温，部分水分子会发生晶化，俗称冷结晶。目前人们对水、甚至包括金属玻璃体系和聚合物冷结晶的认识主要局限于冷结晶发生后的生长动力学。但对于水冷结晶发生所需水溶液热力学和动力学，以及结构特征等条件的认识尚属于起步阶段。冷结晶机理的揭示能帮助我们理解和调控水冷结晶温度和晶化量；帮助寻找或设计更为有效的抑制水冷结晶发生的低温保护剂。同时，不谈水冷结晶是低温保存领域着重考虑的问题之一，特殊环境中水结晶机理研究本身就是一个非常重要的课题。在 2017-2018 期间，我们揭示了水冷结晶发生的水溶液浓度范围及其特点；提出了简单而有效的量化参与冷结晶水分子数的实验方法；发现结合水和受限水分子取向弛豫间的协同性在触发水冷结晶过程中的关键作用；实验揭示部分小分子水溶液水冷结晶其间部分溶质的完全脱水和后续的水合过程。该结果为结合水直接参与水冷结晶提供了实验证据。而高水含量稀溶液中的结合水通常被定义为非凝固水；实验并统计发现水、金属玻璃体系和聚合物的冷结晶温度与各自的玻璃化温度间存在普适性关系。

(a)(b) 甘油水溶液（水质量分数为 0.4）介电弛豫时间在降温（空心图标）和升温（实心图标）过程与温度关系。当温度升至 T^* ，水溶液由低温区的、两弛豫过程转变为一个弛豫过程，结合水和受限水的介电弛豫差别消失，水冷结晶发生。水冷结晶温度窗口内 τ_{Gly} 的出现和消失揭示部分溶质分子的完全脱水和随后水合过程。(c) 不同组分弛豫行为的协同性是触发变温冷结晶过程的先决条件。这一结果对于水、金属玻璃体系和聚合物冷结晶行为具有普适性。后两者的弛豫出现的温度均约为 $1.2T_g$ 。(d)(e) 水冷结晶行为具有热历史历程依赖性。但主要不同来自所经历的最低温度是否低于 T^* 。



2. 利用射频磁控溅射法制备了一系列结晶质量较好的 $\text{Mn}_3\text{Mn}_{1-x}\text{Pd}_x\text{N}$ 反钙钛矿结构化合物薄膜，在保证结晶度的情况下，金属 Pd 掺杂浓度 x 达到 0.36。所有薄膜均具有 [100] 择优取向。随着掺杂浓度 x 的提高，晶格发生膨胀，晶格结构常数变大，引入的 Pd 原子极可能替代 Mn_3MnN 反钙钛矿晶格结构中的顶点 MnI 原子。随着 Pd 含量的提高，

该薄膜发生了金属-半导体转变行为，且整个过程中薄膜材料的电阻率数值仍保持在一个数量级。另外，在该类薄膜中还发现了正磁阻效应。

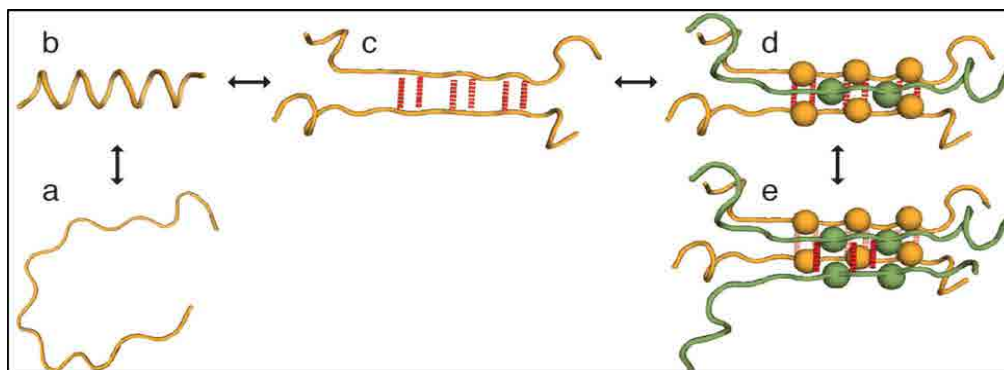


(a) $\text{Mn}_3\text{Mn}_{1-x}\text{Pd}_x\text{N}$ 薄膜的 XRD 图谱；(b) 薄膜的晶格常数随掺杂浓度 x 的变化。

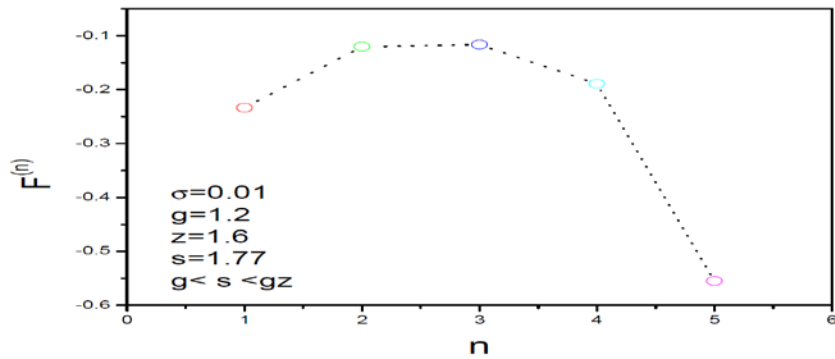
3. 许多神经元退化疾病（如阿兹海默症、亨廷顿症、朊病毒）都是与蛋白质聚集成淀粉状纤维相关联。在体内这种线状蛋白聚集需要以十年数量级来记，这样就直接地阻止了在生理条件下对其进行研究。体外的实验记录会给出非常宽泛的各种聚集路径，这是因为实验的时候利用高浓度或极端的 pH，但是这样的实验外推的结果是很难确定在生理条件下的主要路径和时间的标尺。目前的计算技术是不能提供对这种现象的理论理解，这是因为现在的全原子分子模拟只能在毫秒量级。基于目前的研究状况，统计模型与解析方法可以对这样蛋白质体系长时间演化行为做一些预言和寻求这种体系形成的机制，最近两年我们在老年痴呆症早期形成的统计理论取得了进展。

一维的体系没有尺寸依赖的表面能，而在体外的蛋白质纤维却表明有与成核相关的动力学存在，为此提出了新的统计模型。发现了聚合物动力学是在于成核的通量尽量避免自由能的鞍点，继而建造了包括构型熵、主链的氢键以及侧链相互作用的三维模型去计算成核速率与浓度的关系。利用非平衡统计理论发展了在溶液条件下的二维以及三维聚合物的成核速率公式。

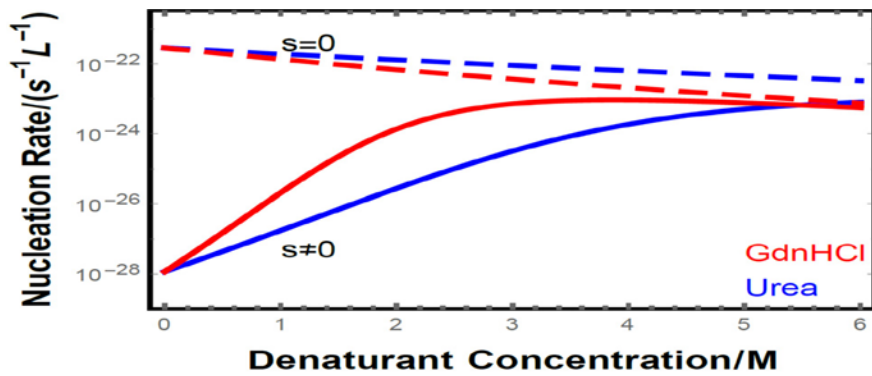
研究了基于折叠了的蛋白质的淀粉状的纤维成核的理论，然后扩展了这个理论到包括折叠片的低聚物，利用对氢键的能量、拉链相互作用、形成第二个结构的构型熵的估计，计算了这些态的自由能。继而发展了修正的经典成核理论去计算单体、二聚体、三聚体的成核速率，这些成核速率是非单调依赖于变性剂浓度的，这个事实反映了失去稳定的纤维和获得浓度增加的未折叠单体之间的竞争关系。这一理论还可以被推广计算异质体的成核速率以及可以讨论第二次成核的路径问题。



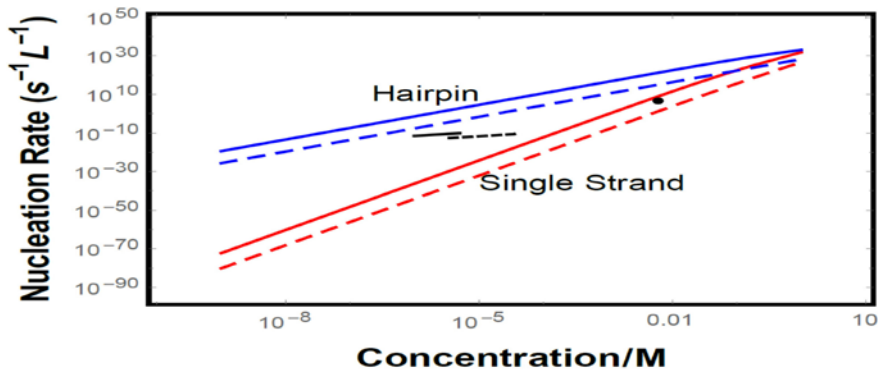
分子聚集成核的理论模型



不同的分子数聚集所具有的自由能



成核速率与变性剂浓度的关系



成核速率与发夹分子和单链分子浓度的关系

1. Cold-crystallization of water refers to the icing process appearing upon thawing or long-time annealing devitrified or deeply supercooled aqueous solutions with medium concentrations. In these solutions, bulk-like water disappears and water comprises hydration water and confined water surrounded by closely compacted hydrated solutes, wherein these two kinds of water can easily vitrify upon cooling even at slow rates. This is a preferred condition for cryoprotection of biological tissues. However, in the subsequent thawing process or after a long-time annealing at deeply supercooled states, crystallization of some water molecules usually appears, commonly defined as cold-crystallization. By far, our understanding of cold-crystallization of water, and even of metallic glass formers and polymers is mainly limited to the growth kinetic. Regretfully, the studies about the dynamic and thermodynamic properties of solutions as well as their

local structural characteristics for triggering cold-crystallization are obviously insufficient. Revealing cold crystallization mechanism can help us understand and even control the temperature and the level of cold-crystallization of water; develop more efficient cryoprotectants to inhibit the occurrence of cold-crystallization of water. During 2017–2018, we revealed the concentration zone of cold crystallization of water. A simple but accurate method for quantifying the amount of cold-crystallized water was proposed. We found that the synergy of reorientational relaxation between hydration water and confine water plays a decisive role in triggering non-isothermal cold-crystallization of water. Moreover, an intermediate process, i.e., a complete dehydration and then full rehydration of some molecule solutes, was observed during the precipitation of cold-crystallized ice. This experimental result confirms the crystallization of hydration water in medium-concentrated solutions, strongly different from the traditionally suggested non-crystallization of hydration water in water-rich solutions. Additionally, an almost constant ratio of cold-crystallization temperature to the glass transition temperature universal for aqueous solutions, metallic glass formers and polymers was observed.

2. Thin films of antiperovskite $\text{Mn}_3\text{Mn}_{1-x}\text{Pd}_x\text{N}$ with x up to 0.36 were grown by reactive magnetron co-sputtering method. All the deposits exhibit a [100] preferential orientation, with the lattice constant slightly enlarged in samples with ever more Pd atoms partially substituting the MnI atoms in Mn_3MnN matrix. The replacement of MnI atoms in antiperovskite structure by Pd atoms, besides reducing the saturation magnetization, also invokes a metal-semiconductor transition which occurs remarkably at a comparable resistivity level. Moreover, a positive magnetoresistance was observed in samples of a high Pd content.

3. Many diseases, such as Alzheimer's, Huntington's, and prion diseases, are associated with the formation of filamentous protein aggregates. The timescale for aggregate formation in vivo is on the order of decades which prevents direct studies of aggregation formation under physiological conditions. As a result, in vitro protocols typically accelerate the aggregation kinetics using high concentrations or harsh conditions like elevated temperature or extreme pH. These experiments have revealed a wide variety of aggregation pathways, and it is not clear how to extrapolate these results to identify the dominant pathways and timescales under physiological conditions. Current computational techniques are unable to provide this insight as they are unable to access even the accelerated timescales of the in vitro systems and are insufficiently sensitive to the large phase space of pH, salts, temperature and additives. On the other hand, mass action models are capable of predicting long time behavior, but lack the resolution to provide insight into sequence effects. In recent two years we have developed a microscopic model of the assembly process that we will refine to describe perturbations in primary structure, the mechanism of nucleation, and explain the transitions between the various assembly pathways.

As pseudo-1D systems fibrils do not have a size dependent surface energy, which renders classical nucleation theories inapplicable. Previous theories have suggested two mechanisms for nucleation limited behavior: the lateral association of molecules in the direction perpendicular to the fibril axis, and the intramolecular extension in the initial aggregate core. We have developed a more general model for fibril

nucleation. By taking appropriate limits we are able to determine how the nucleation transition state depends on the various interaction parameters and variables like protein concentration and solution conditions. We found that the dynamics of polymer rearrangement made it very unlikely for nucleation to succeed along the lowest free-energy trajectory, meaning that most of the nucleation flux avoids the free-energy saddle point. We used these results to construct a three-dimensional model for amyloid nucleation that accounted for conformational entropy, backbone H bonds, and side-chain interactions to compute nucleation rates as a function of concentration.

We then extended the theory to include oligomers, and calculated the free energy of these states using estimates for the energies of H-bonds, steric-zipper interactions, and the conformational entropy cost of forming secondary structure. We used a modified version of classical nucleation theory to compute the nucleation rate of fibrils from a supersaturated solution of monomers, dimers, and trimers. The nucleation rate has a nonmonotonic dependence on denaturant concentration, reflecting the competing effects of destabilizing the fibril and increasing the concentration of unfolded monomers. We estimated heterogeneous nucleation rates, and discussed the application of our model to secondary nucleation.

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 单欣岩 Xinyan Shan

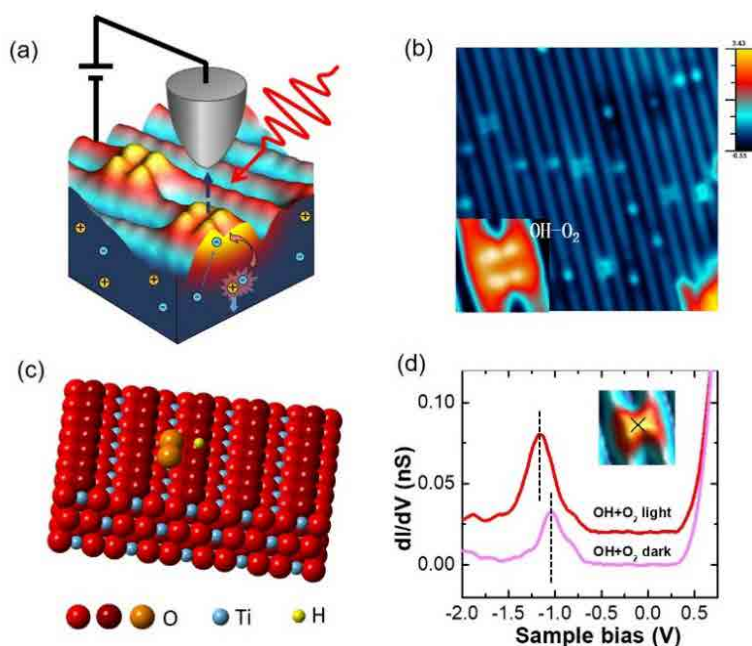
吴艳玲 (博士后) Yanling Wu (Postdoctor)

Selected Scientific Results

1. 探测到单个缺陷能级受激光调控的性质:

TiO₂ 对于光催化, 光水解等方面具有重要的应用前景。因此, 研究 TiO₂ 在激光激发情况下其电子态密度的变化、表面典型缺陷的局域影响、激发态的时间特性等性质, 对于从机理上理解其相互作用具有重要的意义。通过提升 Photo-STM 的稳定性, 以及增加测量带宽等技术改进, 我们可以在较强激光聚焦于针尖-样品结的情况下稳定的实现原子分辨形貌成像, 以及稳定的 dI/dV 谱测量, 并且通过扫描时间延迟获得隧穿电流随脉冲激光到达时间的演变曲线。

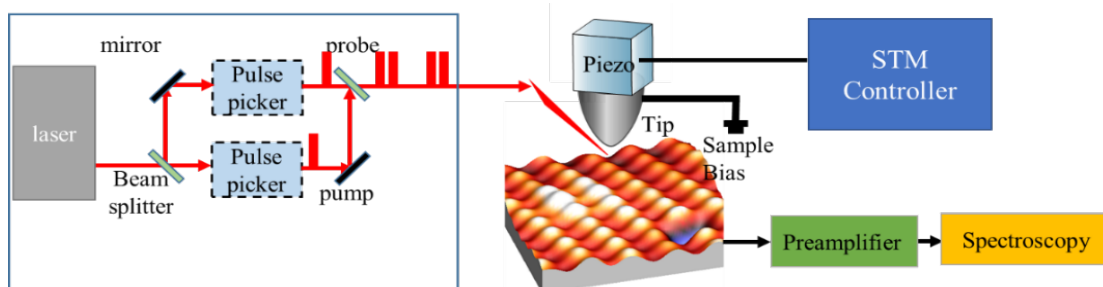
由于 1.65eV 的激光能量低于 TiO₂ 的 band gap, 因此该过程初步理解为双光子吸收, 即脉冲峰值处的高能量激光以双光子吸收的方式将 TiO₂ 的电子从价带激发到导带, 再从导带相应的能量位置逐渐弛豫到导带底, 或通过对对应偏压的隧穿电流导走。考虑到激发过程几乎是瞬时发生 (时间小于 10fs), 而隧穿电流也几乎是瞬时发生, 因此这个过程中真正主导弛豫的机制为导带激发电子的弛豫寿命。那么, 通过调节偏压, 使费米面处于 TiO₂ 导带的不同位置, 反复测量其时间演变曲线, 即可得到激发电子在各个能量上的弛豫寿命。上图展示了弛豫时间常数随偏压变化的测量结果, 其变化趋势和 TiO₂ 的导带态密度具有相关性。态密度越高, 寿命越短, 当偏压大于 4V 之后, 其弛豫时间已经和 Ag 样品测量结果相当 (25fs), 展现出更多的金属性。考虑到隧穿电流的空间局域性, 可以针对特定的单个分子或者表面缺陷进行测量, 我们在 TiO₂ 表面的典型缺陷处进行了态密度受激光调制的研究。通过改进 STS 谱测量系统, 我们提高了测量带宽, 并缩短了测量时间, 使系统能够在较大激光功率辐照的情况下稳定重复的获得态密度谱。下图是 TiO₂ 表面的典型区域, 右下方的四瓣结构 (初步判断) 为氧缺陷吸附了羟基及氧气分子形成的复合结构。在这种结构上, 我们测量得到了 -1.0eV 位置的缺陷态 (上图中的黑色



曲线)，作为对比，在干净的钛链上该能量没有明显的态（上图中最底部的灰线）。当加入 810nm 的激光辐照于针尖样品结时，缺陷态发生了明显的变化，随着激光功率的增加，能量发生了位移并且变强。用 color map 展示了此缺陷态的变化，可以看出明显的位移。与此同时，钛链上在这个能量为止仍然没有明显的态。初步推测，该局域化的缺陷态受到激光调制的现象应与电子态密度的瞬态占据度变化有关。该工作发表在：Physical Review B 98, 081402(R)(2018)。

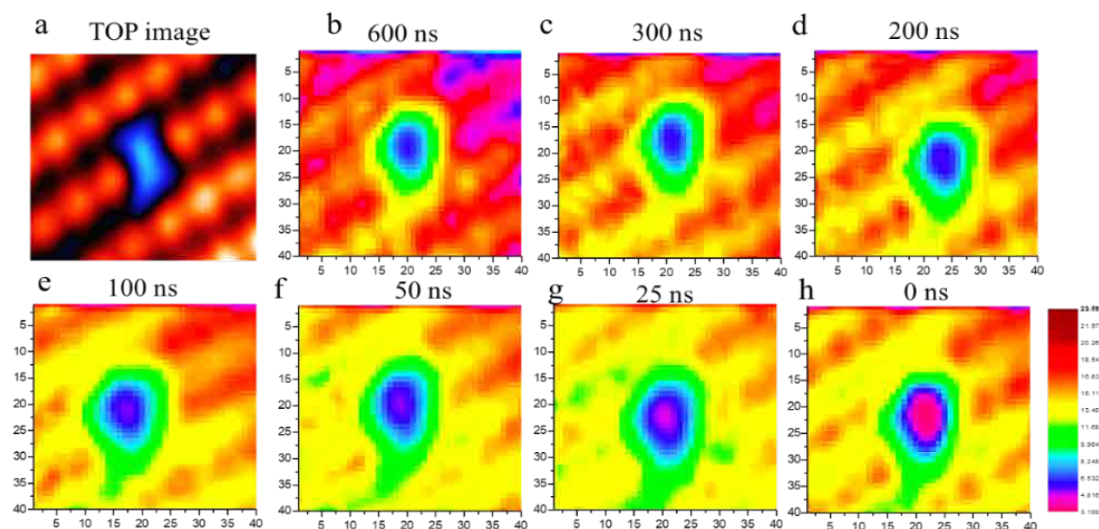
2. 探测到单个缺陷的动力学弛豫过程，并实现动力学过程的原子级空间分辨：

利用时间分辨的扫描隧道显微镜，我们对砷化镓表面及砷空位缺陷上光激发载流子的超快动力学过程进行了探测。通过对电子态密度随时间演变的数据进行分析，得出砷空位加快载流子的复合速率。结合不同偏压、不同位置、不同波长对载流子寿命的影响及能带弯曲理论，解释了空穴湮灭受到两种因素的影响，分别是针尖的隧穿电子和缺陷局域态。

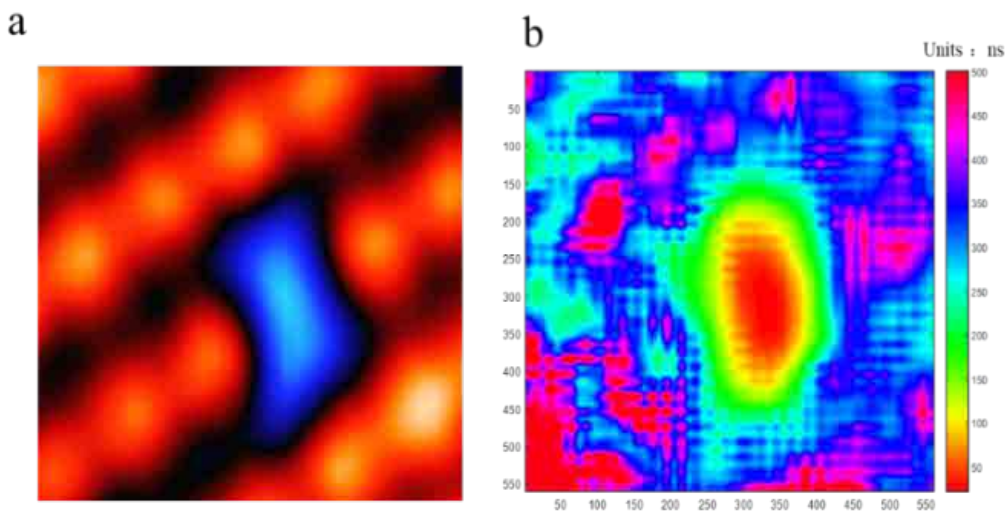


研究发现，砷化镓表面砷空位缺陷处载流子动力学特征时间显著短于晶体表面的特征时间。通过对特定能量的微分电导成像，获得了具有原子分辨的超快时间过程动画。通过光压效应解释了半导体中光生载流子动力学特征时间测量的原理。

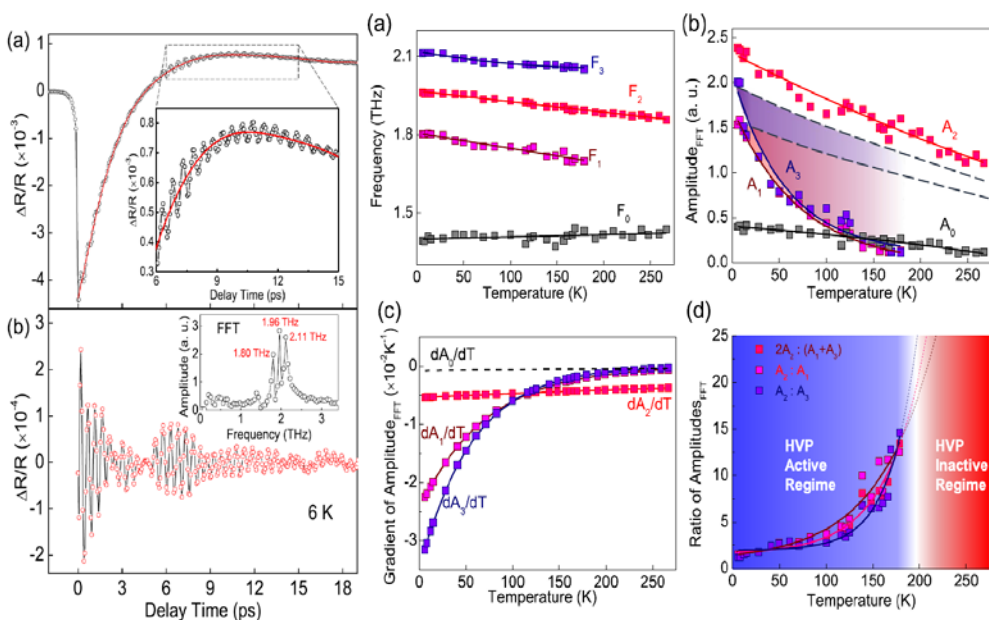
为更细致地研究砷空位缺陷对载流子动力学过程的影响，特别是其空间对称性，我们测量了微分电导随脉冲延时变化的特征时间的空间分布情况。测量区域如下图（a）所示。在不同的激光脉冲延时下，我们对微分电导成像。脉冲延时从 1000 ns 逐渐缩短到 0 ns，总共 20 幅图像，下图（b-h）显示了其中的七幅图像。随着激光脉冲延时的缩短，砷化镓表面（缺陷外围）的微分电导逐渐降低，时间零点处达到最低。而缺陷处的微分电导在延时到 200 ns 以内才开始有明显变化，显示了较短的特征时间。



为获得空间每一点载流子动力学过程的特征时间，我们对不同时间延迟的微分电导谱图进行了数据处理。通过软件程序计算出空间个点微分电导随脉冲延时变化的特征时间并成像，如下图所示。由此可清晰看到，特征时间的空间分辨率到达亚原子量级，缺陷和载流子的相互作用是一个局域效应，其影响仅在缺陷处，影响范围大约 1.5 nm。还可以看到，缺陷上特征时间的分布与缺陷形貌并不完全重合，呈现约 30° 夹角，初步猜测这主要是因为受到了缺陷电子态分布的影响。

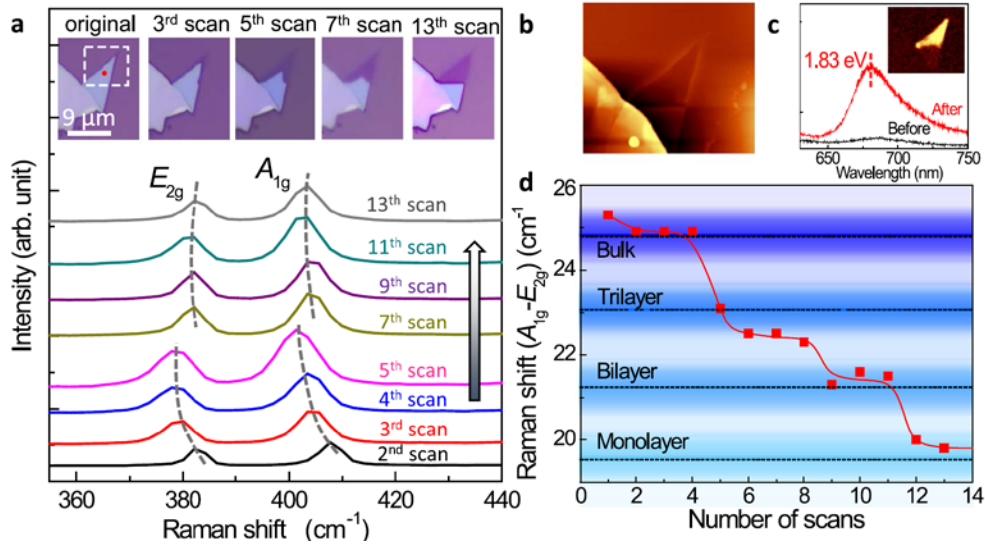


3. 我们在拓扑金属材料 Cd_3As_2 中观察到了 3 支频率分别为 1.80, 1.96, 以及 2.11 THz 的相干态声子，并在低温下观察到了声子拍频现象。随着温度的升高，声子拍频现象减弱乃至消失。我们的结果表明温度对这类量子材料的拓扑性质存在很大的影响。该工作发表在 PRB 95, 235108 (2017)。



左侧 (a) Cd_3As_2 6 K 下的超快动力学及相干态声子，(b) 减去电子动力学背底的声子，可看到拍频，FFT 结果可以看到 3 个频率成分。右侧 (a)(b)(c) 各频率分量的频率、振幅、振幅对温度的导数的温度依赖，(d) 各频率振幅比例的温度依赖。

4. 我们使用超快激光在二维 (2D) 量子材料 MoS_2 中实现了原子层精度的厚度和图形化控制。通过测量和计算，确定了其基本的物理机制是与温度有关的 MoS_2 晶格蒸发。我们的研究为基于二维层状量子材料的三维器件制造奠定了基础。该工作发表在 *Scientific Reports* 7, 15538 (2017)。



通过调整曝光时间逐层控制厚度。(a) 层数对扫描次数的依赖 (拉曼光谱)。每次扫描的激光功率为 1.5 mW, 曝光时间 0.2 s。插图显示了第 3 次、第 5 次、第 7 次和第 13 次激光扫描前后的图形。(b) 第 13 次扫描后的 AFM 图像。(c) 激光扫描前后的荧光光谱。插图: 第 13 次扫描后, 在 1.8 eV (690 nm) 发射光子能量下的光致发光映射图像。(d) 激光扫描次数与拉曼峰间距 (E_{2g} 和 A_{1g} 模式之间, 标记层厚度) 的关系。



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

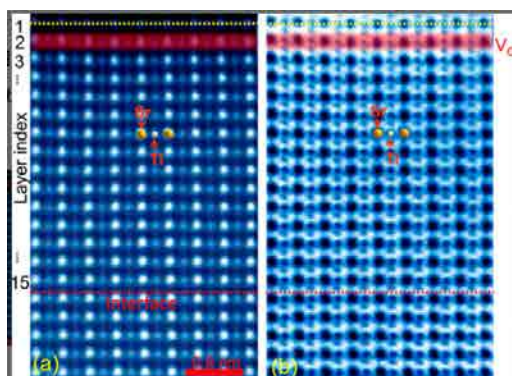
组员 /Group Members:

孙牧 Mu Sun 王炜华 Weihua Wang 杨芳 Fang Yang 朱学涛 Xuetao Zhu

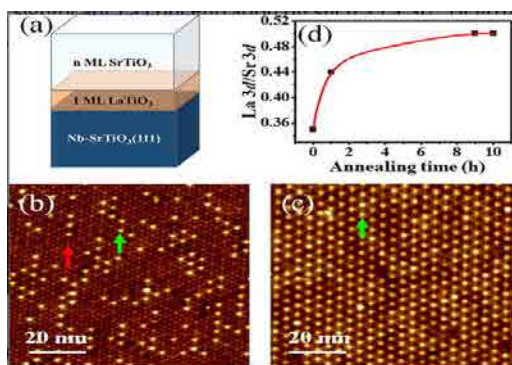
孟梦 (博士后) Meng Meng (Postdoctor)

Selected Scientific Results

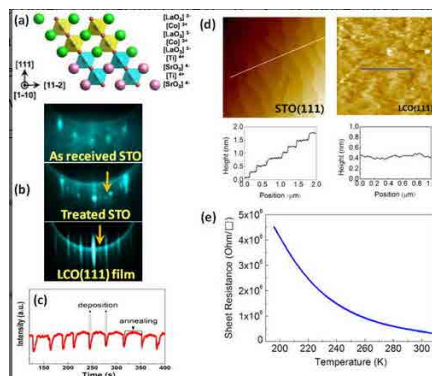
1. 研究了 $\text{SrTiO}_3(110)$ 表面氧空位迁移的动力学过程, 发现氧空位被局限于近表层的几个元胞层内, 形成了类似半导体掺杂的金属性二维电子体系。



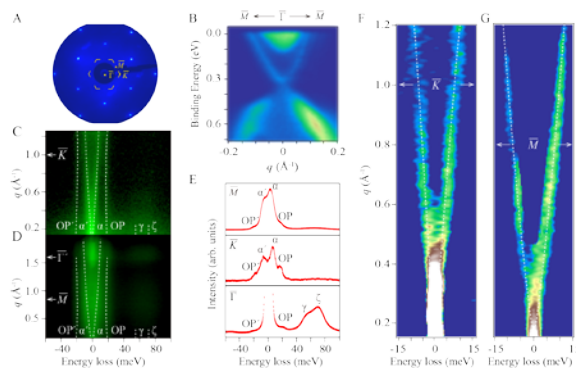
2. 研究了 $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3(111)$ 极性不连续界面的稳定性, 发现强极性表面倾向于通过不同价态元素替代降低极性, 从而使重构表面更加稳定, 因此在强极性表面外延生长弱极性薄膜容易获得原子级明锐的界面, 而在弱极性表面外延生长强极性薄膜氧则容易发生严重的元素互扩散。



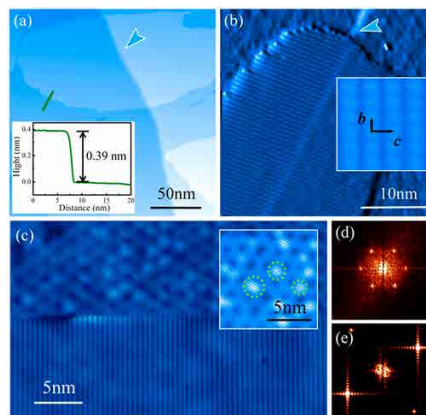
3. 发展了脉冲激光溅射生长极性氧化物薄膜与超晶格的控制方法, 通过制备重构衬底表面并在生长中保持重构来实现二维生长, 并通过暂停生长退火使得生长温度尽量降低, 从而提高异质界面明锐程度, 由此获得了高质量的 $\text{LaCoO}_3/\text{SrTiO}_3(111)$ 超晶格。



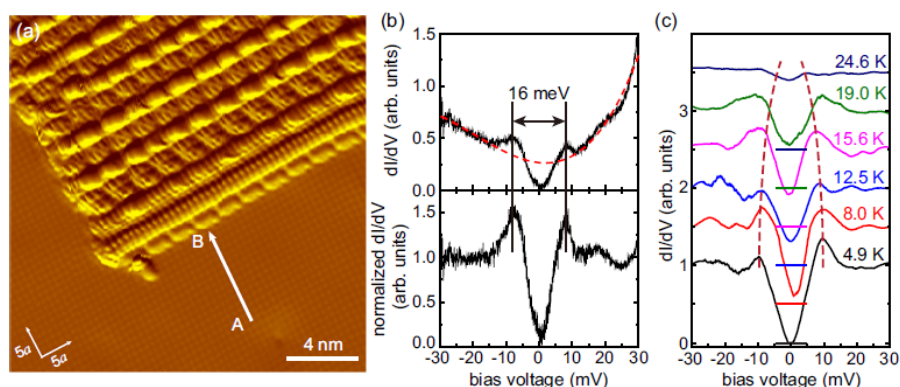
4. 在三维拓扑绝缘体表面发现了一支来自狄拉克电子的声学等离激元，其色散关系在一个很大的动量范围呈现出几乎线性的行为，不依赖于晶格的周期性，而且呈现出弱衰减特性，说明拓扑保护对集体模式也是适用的。



5. 在 SiC 表面的石墨烯上生长出 Te 超薄膜，呈体相 b-c 面结构；随薄膜层厚增加，其带隙由单层的 0.92 eV 逐渐减小至体相的 0.33 eV；在单层 Te 薄膜边缘与石墨烯的界面上还存在明显的能带弯曲。进一步在原子层精度控制了 SiC 表面石墨烯的厚度，从而可靠调控了外延生长 Te 薄膜受衬底电子掺杂作用的强弱。利用横跨石墨烯台阶生长的单层 Te 薄膜获得了具有连续晶格的同质 p-n 结，并利用 STS 直接观测到结区的能带弯曲。



6. 对超导增强的 FeSe/SrTiO₃ 界面体系，利用半导体性有机分子作为电子施主 / 受主控制其电荷密度，实现了对超导态的纯电荷的开关调控，并由分子的选择性吸附行为指出超导态形成与电子浓度的关系。还利用高分辨率电子能量损失谱仪详细研究了体系表面声子的色散，发现其不随 FeSe 薄膜厚度有明显变化，说明 FeSe 声子对界面超导增强没有直接贡献；并且结合理论计算指出 FeSe 内部反铁磁耦合的存在，很可能是体相超导的配对机制。



1. We studied the diffusion kinetics of oxygen vacancies (VOs) on SrTiO₃(110) surface. It was found that VOs were confined within few layers beneath the topmost surface, forming a metallic two-dimensional electron system that mimics the n -doping cases of semiconductors.

2. We studied the LaTiO₃/SrTiO₃(111) interface with polar discontinuity. It is revealed that the surface with strong polarity tends to introduce substitutions of element with different valence to reduce the polarity and enhance the reconstruction stability. As the consequence, it is relatively easy to obtain the atomically sharp interface by epitaxy of films with weak polarity on the substrate with strong polarity, while there would be serious chemical intermixing at the interface between the film with strong polarity and the substrate with weak polarity.

3. We developed the control technique of the growth of polar oxide films and superlattices with pulsed laser deposition. By preparing the substrate surface in reconstruction and keeping the reconstruction on the film surface all through the growth, the two-dimensional growth is enabled. Moreover, by introducing annealing period to the interrupted growth, the growth temperature is lowered and the interface sharpness is improved. By this method, high-quality LaCoO₃/SrTiO₃(111) superlattice is obtained.

4. We observed an acoustic plasmon originated from the Dirac electrons on the surface of a three-dimensional topological insulator. Regardless the lattice periodicity, it disperses linearly in a broad momentum range and exhibits surprisingly slow decay. It is indicated that the topological protection can be applied to the collective mode of electrons in the edge states.

5. We grew Te ultra-thin films on graphene/SiC in the bulk b - c plane. The band gap of the film decreases with increasing thickness, from 0.92 eV for the monolayered film to 0.33 eV for the bulk form. We further observed the significant band bending at the interface between monolayered Te and graphene. By controlling the thickness of graphene layers on SiC with atomic precision, we modulated the electron doping effect of the substrate. We further obtain an in-plane p - n junction with homogeneous monolayer Te at the step edge of graphene. The in situ STS mapping directly visualizes the band bending of the junction.

6. For the FeSe/SrTiO₃ interface with superconductivity enhancement, we used semiconducting molecules as electron donors/acceptors to modify its charge density. The pure electronic on/off tuning of

superconductivity was realized. The selective adsorption behaviors demonstrate the correlation between electron density and the superconductivity. We also investigated the surface phonons of the FeSe/SrTiO₃ system with high-resolution electron energy loss spectroscopy. It is revealed that the dispersions are independent on the FeSe film thickness, suggesting that the lattice dynamics of FeSe do not contribute to the interface superconductivity enhancement directly. Combined with first-principle calculations, we found that the antiferromagnetic correlation in FeSe plays the key role in the superconductivity of the bulk material.



SF09

低维量子材料的分子束外延及电子态调控

MBE Growth and Electronic Properties of Low-dimensional Materials

组长 /Leader:

吴克辉 Kehui Wu

组员 /Group Members:

陈岚 Lan Chen 程鹏 Peng Cheng 冯宝杰 Baojie Feng

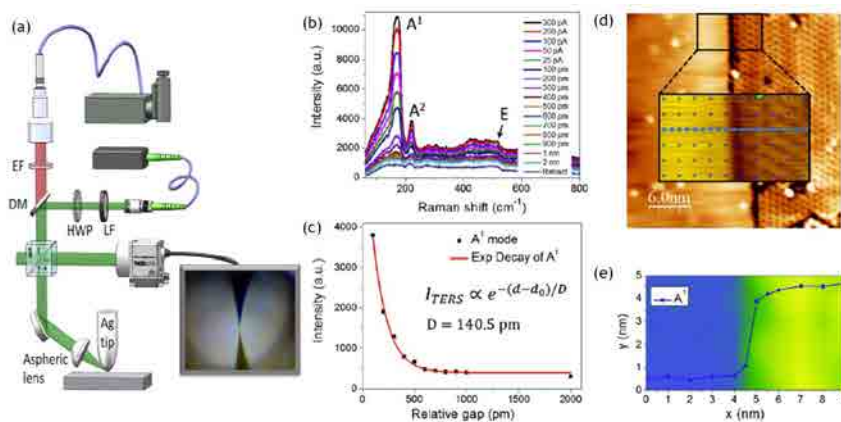
Selected Scientific Results

新型二维原子晶体材料及其特殊的物理化学性质是当前一个前沿热点研究方向。二维材料丰富多彩的电子态和物理效应，以及基于二维材料的人工结构的组合的无限可能性为构筑未来新型电子器件提供了新的机遇。我们研究组在过去的两年时间里继续致力于新型二维材料的探索与研究，在多种二维材料的制备与电子态研究方面取得了突破性的进展。

1. 高性能低温 STM-TERS 系统的自主搭建及其在新型二维材料上的成功应用：

近年来发展的超高真空 STM 针尖增强拉曼技术 (TERS)，通过使用超高真空 STM 针尖对局域 Raman 信号的增强作用，极大地增强了 Raman 光谱的能力，使得拉曼技术在单分子、纳米科学等领域发挥更加突出的作用。然而，把拉曼光谱和低温超高真空 STM 结合起来，实现高性能的 TERS 系统有很多困难要克服。目前，国际上只有三个小组实现了低温超高真空下的 TERS。

在自行研制的高性能低温 STM 构架的基础上，我们于 2017 年完成了全自主设计的低温 STM-TERS 系统的搭建，实现了高性能的 TERS 光谱的采集，其横向空间分辨率达到 0.5nm，增强因子达到 10^9 ，超过目前国际上的最好记录。利用这套系统，我们对新型二维材料硅烯的局域振动性质进行了原位的研究。硅烯的 TERS 光谱表现出随针尖和样品间距离指数的衰减关系，并且 TERS 对于硅烯的振动模式具有很强的选择性，只有 A1 和 A2 振动峰被极大的增强，而高频处的 E 模式却没有明显增强。



(a) 自主设计的低温 STM-TERS 系统光路示意图。(b) 在硅烯表面测得的不同针尖样品距离下的 TERS 谱，从中可以看出 TERS 对于硅烯的振动模式具有很强的选择性，只有 A1 和 A2 振动峰被极大的增强，而高频处的 E 模式却没有明显增强。通过第一性原理的计算，这种选择性增强效应揭示了单层硅烯的拉曼模式的物理起源。(c) 硅烯的 TERS 光谱表现出随针尖和样品间距离指数的衰减关系。(d) 硅烯的 STM 形貌图。(e) A1 峰的 TERS 强度 mapping 图，从中可以看出其横向空间分辨率可以达到 0.5nm。

频处的 E 模式却没有明显增强。通过 TERS 对不同拉曼模式的选择性增强效应, 利用第一性原理计算, 深入揭示了单层硅烯的拉曼模式的物理起源。此外, 利用 TERS 的超高分辨本领, 我们还研究了硅烯中缺陷、边界、应力区域的局域振动光谱, 澄清了以往研究中对这些局域结构与振动峰之间关系的认识。这个工作是首次利用 TERS 在原子尺度上揭示二维材料的局域振动特征, 表明 TERS 可以作为研究二维新材料的物性的一种强大的工具。论文发表在 *Phys. Rev. Lett.* 119, 196803(2017) 上。

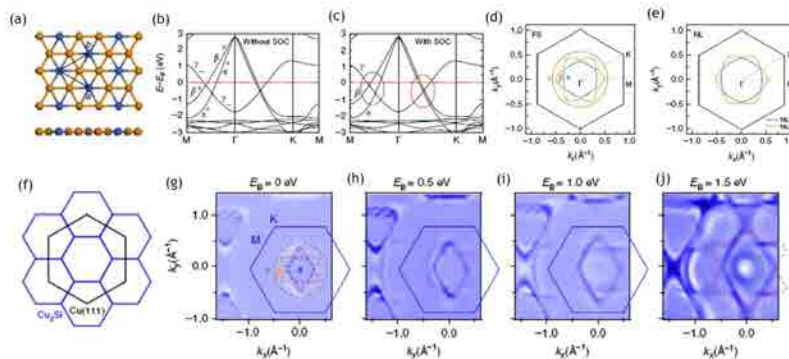
采用针尖增强拉曼光谱 (TERS) 和非接触原子力显微镜的手段, 从实验上发现了在 Ag (110) 表面上硅自发组装形成的一维纳米线结构是一种纯粹由五元环的硅组成的结构。利用 TERS 测量该纳米线的振动谱, 发现其系列谱峰与五元环结构模型完全吻合, 而与此前人们推测的六元环结构不符。采用高分辨的非接触原子力显微镜, 直接观察到了纳米线中的五元环结构。该工作发现了揭示了五元环结构在低维硅体系中的重要作用, 也为后续的研究提供了一种典型的纯粹的五元环体系, 也可能在将来的硅电子器件中找到应用的价值。论文发表在 *Nano Letters*, 18, 2937(2018) 上。

2. 首次在实验上验证二维“节线”(node-line) 拓扑半金属:

“拓扑半金属”是不同于“拓扑绝缘体”的一类全新的拓扑电子态, 它类似“三维的拓扑表面态”, 被认为是拓扑态可能取得实际应用的突破点之一。根据能带在费米面处的交叉点在晶格动量空间的分布, 拓扑半金属可以分为拓扑狄拉克半金属、外尔半金属和“节线”(Node-Line) 半金属。其中, 在拓扑节线半金属中, 能带的交叉点在晶格动量空间形成连续的闭合曲线。在这种表面平带 (flat band) 中引入电子关联效应或超导配对, 将有望实现分数拓扑态或高转变温度超导等新物态。那么二维的节线半金属是否存在呢? 理论预言, 单层的蜂窝状晶格, honeycomb-kagome 晶格, 以及单层的过渡族金属-五族化合物都有可能存在节线半金属费米子, 但是寻找真正的节线半金属费米子材料具有很大的挑战性。

单层 Cu_2Si 薄膜由 Cu 原子形成的蜂窝状晶格和 Si 原子形成的三角形晶格相互交错形成, 利用 MBE 的制备方法将 Si 原子蒸镀到 Cu (111) 单晶表面可以形成高质量的单层 Cu_2Si 薄膜。通过高分辨 ARPES 的测量发现, Cu_2Si 单层薄膜的等能面呈现为三个以 Γ 点为中心的六边形、六角星形和圆形, 分别与理论计算中的 α 、 β 和 γ 能带相对应。其中 γ 能带线性地穿过 α 、 β 能带, 形成了两个以 Γ 点为轴心的 Dirac nodal lines, 并且受镜面反演对称性的保护。进一步利用偏振光发现了 α 、 γ 能带与 β 能带具有相反的极性, 与理论计算完全吻合, 给出了单层 Cu_2Si 薄膜节线半金属拓扑非平庸属性的直接实验证据。该结果不仅将 Dirac nodal lines 的概念由三维拓展至二维, 同时为实现纳米尺度的新型拓扑量子器件提供了一种新的可能途径。

这是国际上首个关于二维节线半金属的实验工作。该结果发表于 *Nature communications* 8: 1007 (2017)。

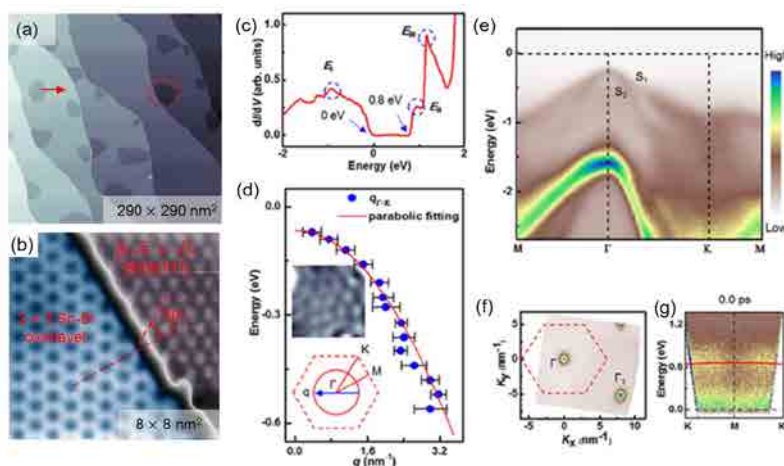


(a) Cu_2Si 的结构模型图。(b-c) 分别在未考虑和考虑自旋轨道耦合情况下, 理论计算得到 Cu_2Si 的能带结构。(d-e) 理论计算得到的 Cu_2Si 在费米面处和费米面以下 1.0eV 处的等能面。(f) Cu_2Si 和 Cu(111) 表面的布里渊区示意图。(g-j) 由 ARPES 实验得到的 Cu_2Si 在不同能量处的等能面。

3. 基于半导体 Si(111) 表面的单层 Sn₂Bi 蜂窝结构的生长和性质测量:

近年来, 二维蜂窝状材料的发展有目共睹, 从半金属的石墨到半导体的黑磷、过渡金属硫族化合物再到绝缘体的氮化硼, 二维蜂窝状材料已经成为一个丰富完善的大家族, 其独特的原子排布构型会带来狄拉克费米子、高载流子迁移率、量子自旋霍尔效应、谷极化等多种新奇的电子性质。

利用分子束外延生长技术, 我们采用依次生长 Sn 和 Bi 的方法在 Si(111) 表面实现了一种基于半导体表面的双元素二维体系 Sn₂Bi 单层薄膜的制备。该薄膜具有大面积高质量的稳定蜂窝状结构, 同时有很强的自旋轨道耦合和非对称的电子空穴载流子特性。扫描隧道谱 (STS) 的测量表明该体系有 0.8 eV 左右的能隙, 而准粒子干涉的测量表明占据态具有明显的近自由空穴载流子的特征。通过角分辨光电子能谱 (ARPES) 测量, 确认了近自由空穴表面态来自于表面二维 Sn-Bi 结构。除此之外, 时间分辨光电子能谱发现导带底为几乎无色散的平带 (Flat band)。该研究成果发表在 Physical Review Letters 121, 126801 (2018), 并得到了编辑推荐 (Editor's Suggestion)。



(a)(b) 利用分子束外延生长技术, 采用依次生长 Sn 和 Bi 的方法在 Si(111) 表面制备的双元素二维体系 Sn₂Bi 单层薄膜, 该薄膜具有大面积高质量的稳定蜂窝状结构。(c) 扫描隧道谱 (STS) 的测量表明该体系有 0.8 eV 左右的能隙。(d) 准粒子干涉的测量表明占据态具有明显的近自由空穴载流子的特征。(e) 通过角分辨光电子能谱 (ARPES) 测量, 确认了近自由空穴表面态来自于表面二维 Sn-Bi 结构。(f) (g) 时间分辨光电子能谱发现导带底为几乎无色散的平带 (Flat band)。

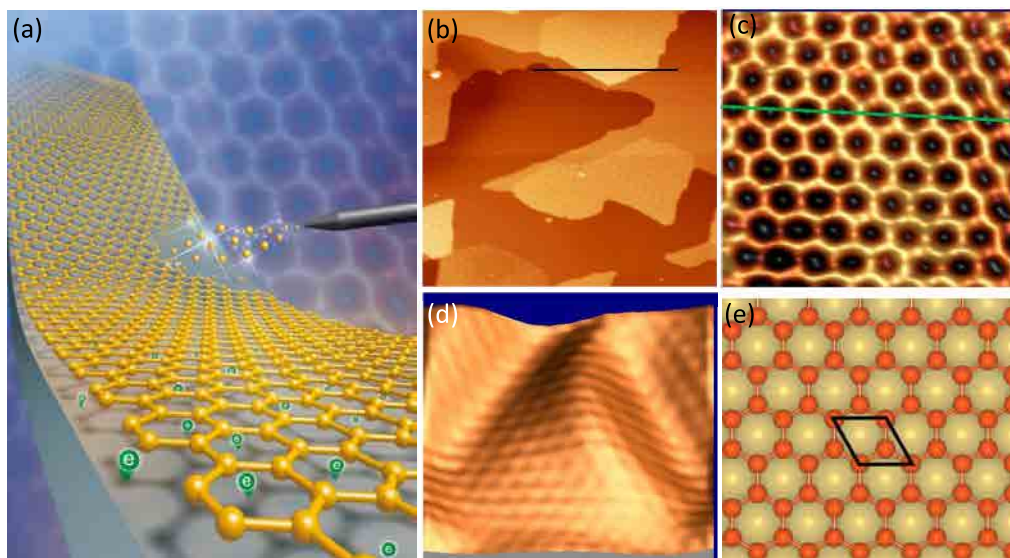
4. 蜂窝状结构硼烯薄膜的成功制备:

硼烯是指由硼元素构成的二维平面结构, 其存在的可能性一直受到理论研究者的强烈关注。2015 年, 我们研究组率先利用超高真空分子束外延 (MBE) 直接进行单原子层构筑的方法, 在 Ag(111) 衬底上获得了这种理论期待已久的单层硼烯, 并发现了硼烯的多种相结构。然而, 蜂窝状结构的硼烯仍然强烈的吸引着研究者的目光。独特的二维六角蜂窝状结构天然赋予了硼烯狄拉克锥的能带结构, 同时作为超导材料二硼化镁的组成单元, 蜂窝状的硼单原子层甚至有可能实现单层硼烯的超导。

基于上述原因, 我们开创性地采用了单晶 Al(111) 作为基底, 通过制备条件的精确控制, 最终成功地制备出了蜂窝状结构的硼烯薄膜。利用高分辨的扫描隧道显微镜观察到了硼烯完美的六角蜂窝状结构, 晶格周期为 0.29nm, 与理论预言中自由状态下硼烯薄膜的 0.3nm 晶格周期接近。由于局域应力的存在, 硼烯薄膜还呈现出具有较大周期的三角形周期性起伏结构, 但这并不影响硼烯本身的蜂窝状晶格。同时这种蜂窝状结构在跨越衬底的台阶时也保持了连续不间断的特点, 为硼烯的单层平面蜂窝状结构提供了又一有力佐证。虽然以往的理论计算表明蜂窝状结构的硼烯并不能稳定存在, 但是在单晶 Al(111) 基底上却成功地实现了这一结构的单层硼烯, 说明了 Al(111) 作为基底起到了十分重要的作用。通过第一性原理的计算, Al(111) 基底向硼烯薄膜的单个硼原子具有接近 1 个电子的电荷转移, 有效地解决了硼原子在

形成蜂窝状结构的过程中电子缺失的现象，对于蜂窝状结构的硼烯的稳定存在起到了至关重要的作用。

该工作已在 Science Bulletin 2018 年第 5 期以“Boron can form a purely honeycomb 2D structure”为题作为封面文章报道。



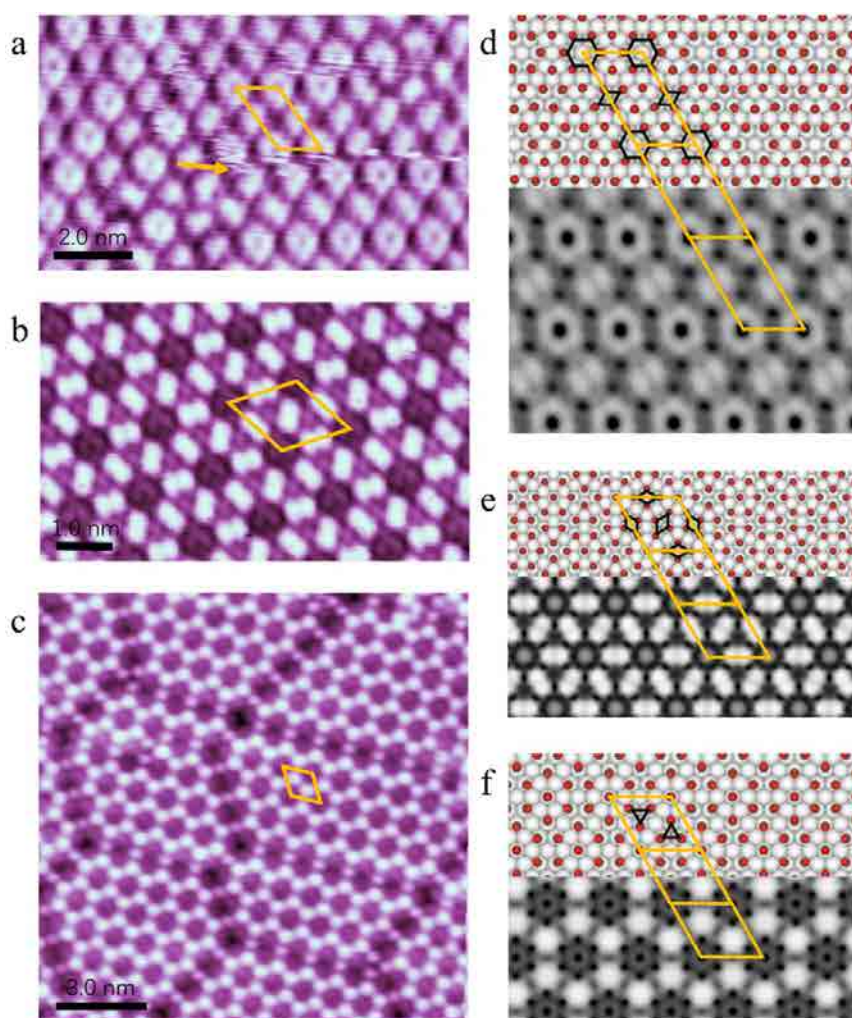
(a) 利用超高真空分子束外延 (MBE) 的制备方法在 Al(111) 衬底上制备出蜂窝状结构硼烯的示意图 (Science Bulletin 封面图); (b)(c) (d) Al(111) 衬底上硼烯薄膜的扫描隧道显微镜 (STM) 图, 其中 d 图显示出三角形的周期性起伏结构; (e) Al(111) 衬底上硼烯薄膜的原子结构模型图。

5. 二维体系中高密度液晶态到低密度晶态的反常相变:

二维状态下的分子晶体具有许多新奇的物性。相比于原子晶体中原子间的相互作用为共价键等强的相互作用, 分子晶体之间的相互作用更为复杂, 如氢键、dipole-dipole 相互作用等。由于晶体的性质主要与原子 / 分子间相互作用有关, 分子晶体往往展现出较奇特的物理现象。同时维度的降低也给分子晶体带来了全新的量子特性。但在实验上, 如何找到真正的二维分子晶体为标准研究对象, 进而实现其物性的测量, 是一个较大的挑战。

最近, 我们课题组在二维分子晶体方面取得了突破, 在 Cu(111) 表面实现了高密度的单层 CO 分子吸附, 形成了二维 CO 分子体系, 并发现了由高温下高密度二维液晶态向低温下低密度二维晶态的反常相变。我们利用 STM 研究了 CO 分子在 Cu(111) 表面上的吸附, 发现 CO 分子在较低密度下形成的重构。提高 CO 的覆盖度后, 在液氮温度下表面出现两种相 (相和相), 其中相由 CO 的四聚体构成, 为长程有序的 Kagome 晶格; 相由 CO 的四聚体和六聚体构成, 是短程有序的密堆结构。这两种相时刻处在互相转化过程中, 而且相中的 CO 四聚体和六聚体也在不断互相转化。这种液氮温度下的二维 CO 体系, 既有有序排列, 又有易流动性, 可以被看成二维的液晶态。当降到液氮温度, 整个二维 CO 体系转变为长程有序的蜂窝状晶格 (相), 由 CO 的三聚体组成。同时我们发现, 相比于相和相, 相中的 CO 密度有显著降低。这种从高温到低温的相变后密度反而降低的反常现象, 与传统的 Langmuir 吸附理论相悖。我们利用改进的二维分子晶态模型, 给出了这种高温下高密度二维液晶态向低温下低密度二维晶态的反常相变的理论描述, 认为这种相变是由二维分子体系的熵所驱动, 其预测的相变温度与实验相吻合。

该项工作首次在实验上观察到了二维分子晶体的反常热力学行为, 表明了二维分子体系有着较为奇特的物理现象, 在未来的研究工作中, 可以更多地对分子体系进行关注。相关研究结果目前发表在 Nature Communications 9, 198 (2018)。



(a) (b) 分别对应于在 77K 温度下共存且能相互转化的 CO 液态晶体相和。(c) 和相降温到 5K 后相变得到的新的 CO 固体晶体相。(d)–(f) 分别对应、和相理论计算的原子结构模型和 STM 模拟图像。各图中的平行四边形和菱形分别表示各个相的原胞。

More recently, novel two dimensional (2D) materials have become the focus of intense research in condensed matter physics, since they exhibit wealth of remarkable properties and unusual physical phenomena. By virtue of these exotic characters, novel 2D materials can potentially serve as a promising platform for fundamental research and potential applications. During the past two years, our group concentrate on searching for new 2D materials. A series of spectacular advances in realization of 2D sheet materials have been made in our lab. Based on successful fabrication, unique properties of these 2D sheet materials have also been revealed.

1. Low-temperature, ultrahigh-vacuum tip-enhanced Raman spectroscopy combined with molecular beam epitaxy for in situ two-dimensional materials' studies.

Tip-enhanced Raman spectroscopy (TERS), which combined with the scanning probe microscopy (SPM) and Raman spectroscopy, processes the spatial resolution and the capability to access chemical

information with ultrahigh sensitivity. It is a powerful tool to study the photon, phonon, electron, plasmon and their interactions, to characterize the nanostructures and nanoptical properties at atomic scale. Based on a home-build low-temperature scanning tunneling microscopy (STM) and MBE union system, we develop the high performance LT-UHV-TERS system. A signal enhancement factor as high as 109 and a TERS spatial resolution of 0.5 nm have been achieved by using silicene on Ag(111) as a prototypical system. As such, we were able to distinguish the vibrational signatures of different monolayer silicene phases, which are different only in the buckling direction of the Si-Si bonds. Moreover, the TERS enhancement is phonon mode selective, which helps us to clarify the origins of the Raman peaks of silicene. The subnanometer spatial resolution also makes it possible to distinguish the Raman signatures from defects and domain boundaries in silicene. This work paves the way to employ TERS as a universal, high-sensitive local tool to study emerging new 2D materials. The paper is published in Phys. Rev. Lett. 119, 196803(2017).

The atomic structures of self-assembled silicon nanoribbons and magic clusters on Ag(110) substrate have also been studied by tip-enhanced Raman spectroscopy (TERS) combined with a high-resolution noncontact atomic force microscopy (nc-AFM). Pentagon-ring structures in Si nanoribbons and clusters have been directly visualized. The vibrational fingerprints of individual Si nanoribbon and cluster retrieved by subnanometer resolution TERS confirm the pentagonal nature of both Si nanoribbons and clusters. This work demonstrates that Si pentagon can be an important element in building silicon nanostructures, which may find important applications for future nanoelectronic devices based on silicon.

The paper is published in Nano Letters, 18, 2937(2018).

2. Experimental realization of two-dimensional Dirac nodal line fermions in monolayer Cu_2Si

Topological nodal line semimetals, a novel quantum state of materials, possess topologically nontrivial valence and conduction bands that touch at a line near the Fermi level. The exotic band structure can lead to various novel properties, such as long-range Coulomb interaction and flat Landau levels. Recently, topological nodal lines have been observed in several bulk materials. However, in two-dimensional materials, experimental research on nodal line fermions is still lacking.

Based on combined theoretical calculations and ARPES measurements, 2D Dirac nodal line fermions are discovered in monolayer Cu_2Si , which is composed of a honeycomb Cu lattice and a triangular Si lattice. We synthesized monolayer Cu_2Si by directly evaporating atomic Si on Cu(111) in an ultrahigh vacuum and performed high resolution ARPES to measure its band structures. The Dirac nodal lines in Cu_2Si form two concentric loops centered around the Γ point and are protected by mirror reflection symmetry. Our results establish Cu_2Si as a platform to study the novel physical properties in two-dimensional Dirac materials and provide opportunities to realize high-speed low-dissipation devices. The paper is published in Nat. Comm. 8, 1007(2017).

3. Binary Two-Dimensional Honeycomb Lattice with Strong Spin-Orbit Coupling and Electron-Hole Asymmetry

Two-dimensional (2D) materials consisting of heavy atoms with particular arrangements may host exotic

quantum properties. One intriguing direction is novel 2D binary materials composed of heavy elements, with strong spin-orbit coupling (SOC) effects and crystallized in a honeycomb lattice – a fascinating model lattice displaying exotic quantum effects, such as spin-valley coupling, Ising ferromagnetism, and quantum spin (anomalous) Hall effects.

Based on MBE method, we fabricated a unique 2D semiconducting binary compound, a Sn_2Bi atomic layer on Si(111), in which hexagons are formed by bonding Bi with a triangular network of Sn. Because of the unique honeycomb configuration, the heavy elements, and the energy-dependent hybridization between Sn and Bi, 2D Sn_2Bi not only shows strong spin-orbit coupling effects but also exhibits high electron-hole asymmetry: Nearly free hole bands and dispersionless flat electron bands coexist in the same system. By tuning the Fermi level, it is possible to preserve both nearly free and strongly localized charge carriers in the same 2D material, which provides an ideal platform for the studies of strongly correlated phenomena and possible applications in nanodevices.

The paper is published in Phys. Rev. Lett. 121, 126801 (2018).

4. A purely honeycomb graphene-like borophene is successfully fabricated on Al(111):

Seeking for low-dimensional boron allotropes has attracted considerable interest in the past decades and tremendous theoretical works predict the existence of monolayer boron. In 2015, our research team successfully synthesized 2D borophene sheet on silver surface, which is exhibiting the predicted triangular lattice with hexagonal holes. Therefore, a challenging question is that whether it is possible to prepare a borophene monolayer with a pure honeycomb lattice. Honeycomb borophene is predicted to host Dirac fermions and thus intriguing electronic properties resembling other group IV elemental 2D materials. Additionally, a honeycomb 2D boron lattice may enable the superconductivity behavior.

Recently, we successfully prepared a purely honeycomb, graphene-like borophene, by using an Al(111) surface as the substrate and molecular beam epitaxy (MBE) growth in ultrahigh vacuum. Scanning tunneling microscopy (STM) images reveal perfect monolayer borophene with planar, non-buckled honeycomb lattice similar as graphene. Theoretical calculations show that the honeycomb borophene on Al(111) is energetically stable. Remarkably, nearly one electron charge is transferred to each boron atom from the Al(111) substrate and stabilizes the honeycomb borophene structure. This work vividly demonstrated that one can manipulate the borophene lattice by controlling the charge transfer between the substrate and the borophene. And the honeycomb borophene provides attractive possibility to construct boron-based atomic layers with unique electronic properties such as Dirac states, as well as to control superconductivity in boron-based compounds.

The paper is published in Science Bulletin 63, 282 (2018).

5. Abnormal phase transition between two dimensional high-density liquid crystal and low density crystalline solid phases:

Some two-dimensional liquid systems are theoretically predicted to have an anomalous phase transition due to unique intermolecular interactions. However, it has never been experimentally observed, to the best of

our knowledge. Here we report an entropy-driven phase transition between a high-density liquid crystal and low-density crystalline solid in a CO monolayer adsorbed on a Cu(111) surface.

We studied the absorption of CO on Cu(111) by MBE at low temperature and found two coexisted ordered structures formed on Cu(111) surface in the issue of full absorption. One of the two phases (named α phase) consists of hexagonal closed packed protrusions in large scale, while the other one (named β phase) adopts a long-range ordered, Kagome-like lattice with three rectangle protrusions in one unit cell. The structures at 77 K are quite dynamical, where α and β phases can be easily transformed into each other. When the sample is cooled from 77 K down to 5 K, the coexisting α and β phases are transformed into a new distinct phase (named γ phase), in which CO trimmers form a honeycomb lattice. The transition to γ phase is accompanied by a density decreasing, contradicting with the conventional principles of adsorption. Combined with first principle calculations, we find that repulsive dipole-dipole interactions between carbon monoxide molecules lead to this unconventional thermodynamics.

This finding of unconventional thermodynamics in two-dimensional carbon monoxide not only provides a platform to study the fundamental principles of anomalous phase transitions in two-dimensional liquids at the atomic scale, but may also help to design and develop more efficient copper-based catalysis.

The paper is published in Nature Communications 9, 198 (2018).



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

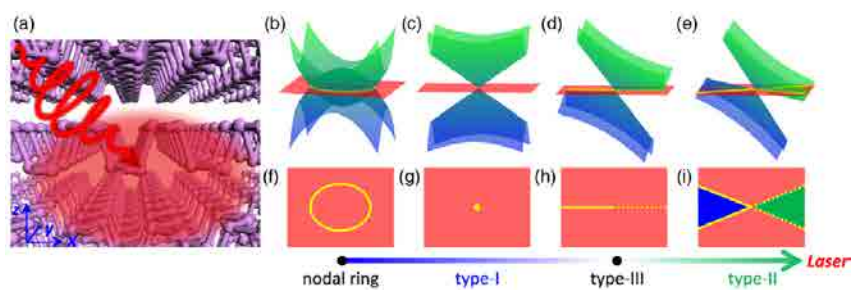
组员 /Group Members:

孙家涛 Jiatao Sun 刘淼 Miao Liu 张萃 Cui Zhang

Selected Scientific Results

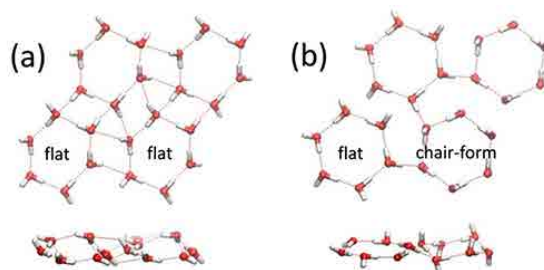
1. 黑磷的 Floquet 能带及其调控

超快激光与物质的相互作用引起人们的广泛关注。人们发现光与物质的相干耦合可以获得 Floquet 非平衡态，这种态无法通过常规的方法来得到。因此光场提供了一种调控平衡态下无法得到的状态的新方法。近期，我们发展了利用第一性原理计算和 Floquet 定理相结合的方法，研究了周期性光场下黑磷的非平衡特性。我们发现光场能够有效调控黑磷的 Floquet 态的拓扑性质，获得光场参数与非平衡拓扑性的相图，揭示了斯塔克效应是光场驱动黑磷发生拓扑相变的物理根源。相关结果发表在 Phys. Rev. Lett. 120, 237403 (2018)。



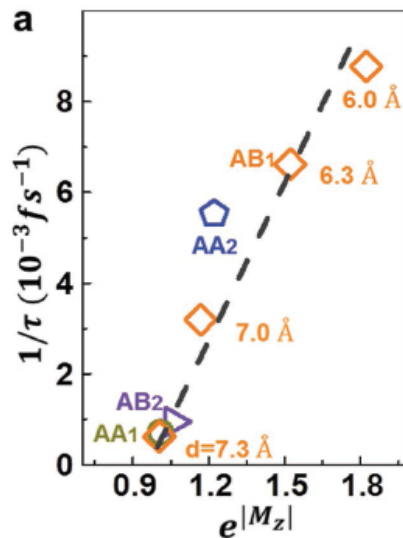
激光照射诱导黑磷中的拓扑相变

2. 发现疏水的石墨衬底上，由于水分子之间相互作用强度会超过衬底对水分子的吸附作用，从而形成一种由水分子六元环自组装而成的新的二维冰相，并且从理论上证实了这种单层冰的稳定性。这种新发现的自组装二维冰结构和高压下的三维稳定冰相 Ice-II 具有很大的相似性，证明了衬底能够对表面结构施加有效的“压强”。相关成果近日发表在 Phys. Rev. Lett. 121, 256001 (2018)。



(a) 自组装冰和 (b) ice-II 的结构对比

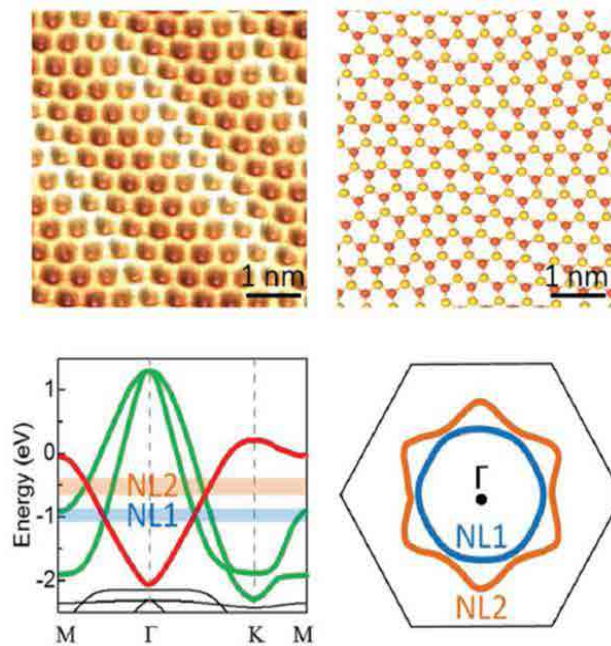
3. 第一性原理量子动力学揭示了 MoS₂/WS₂ 二维异质结中光激发的电子 - 空穴对层间分离过程与其层间堆叠模式的关系, 电子 - 空穴分离速度 (分离时间的倒数) 与跃迁矩阵元的 e 指数呈正比, 突破了费米黄金规则的限制, 表明该体系是超出微扰近似的强耦合体系。结果发表在 *Advanced Science* 4, 1700086 (2017)。



电荷转移时间的倒数与空穴态耦合强度之间的定量关系

4. 二维单硫族化合物 CuSe 的新奇物性

研究了 Cu(111) 面上外延生长的平面单层 CuSe (左侧) 的电子结构, 发现了面内镜面对称性保护的二维狄拉克费米子, 自旋轨道耦合打开能隙后具有非平庸的电子态; 提出利用衬底的拉应力可以得到平面结构的梯烯, 面内和面外轨道没有耦合, 使其边缘具有非平庸的电子态。以上两个结果表明表面上的自组装结构可能蕴含着丰富的量子物性, 为调控二维材料的新奇物性提供了新的思路。相关结果发表在 *Advanced Materials* 30, 1707055 (2018)。

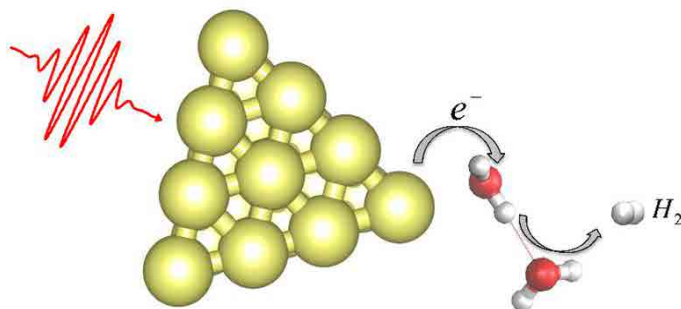


衬底上 CuSe 单层的原子结构和电子能带

5. 光解水量子动力学

利用含时密度泛函理论首次模拟了光激发金团簇的等离激元，从而分解水的量子动力学过程。提出光解水过程的“链式反应”机理，发现水分解效率不仅与光吸收有关，还具有激发模式的量子选择性。相关结果发表在 J. Phys. Chem. Lett. 9, 63(2018)。

产氢的链式反应模型 “Chain Reaction” Mechanism



Quantum efficiency ($h\nu \rightarrow H_2$): 0.06%
Experiment: 0.05%

光解水产氢的链式反应机制

1. We are developing a time-dependent density functional theory method. Current activities include incorporating vector field, multiple k-point sampling, spin-orbital coupling, noncollinear spin, and nuclear quantum dynamics.

2. We studied systematically stacking-dependent interlayer charge transfer in MoS₂/WS₂ bilayer model system. Slight change in interlayer geometry can significantly modulate the charge transfer time from 100 fs to >1 ps scale. The transfer rate in MoS₂/WS₂ bilayers is governed by the electronic coupling between specific interlayer states, rather than interlayer binding strength, and follows a universal dependence on the specific-state-coupling strength, facilitating their future applications in optoelectronics and light harvesting.

3. We developed a new approach combining first-principles calculation and Floquet theory, with which we studied the Floquet-Bloch band structures of black phosphorous under periodic driving of light. The type-I, II, and III Dirac fermions can be obtained simultaneously, leading to analogous Hawking radiation with a high Hawking Temperature of 3K.

4. We discovered a new pathway for carrier relaxation in van der Waals heterojunctions, a universal law of resistivity in borophene, and a new 2D ice structure. We identified about 100 layered 2D magnetic compounds by using high-throughput first-principles calculations. The effect of noncoplanar noncollinear spin structure on physical properties of 2D materials was studied.

5. We start to construct a new materials database and high-throughput calculation platform. We explore also the topological states in phonon and photonic crystals.

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	张凌云	副研究员	2017.03-2017.06	德国马普学会复杂体系物理研究所
2	张进	博士生	2018.04-2019.04	英国帝国理工大学
3	孟胜	研究员	2018.07	英国曼彻斯特大学
4	赵继民	研究员	2018.09	德国汉堡马普所、德国自由电子激光科学中心
5	孟胜	研究员	2018.11	日本筑波大学
6	刘行	博士生	2018.12-2019.12	美国犹他大学

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	2017.01; 2017.05; 2017.09; 2018.01; 2018.05
2	Jiandi Zhang	Professor	Louisiana State University	2017.01-2017.08; 2017.12; 2018.05; 2018.12
3	Bibek Adhikari	Ph.D Student	Stuttgart University	2017.01
4	Rim Cherif	OSA ambassador	University of Carthage, Tunisia	2017.04
5	Jak Chakhalian	Professor	Rutgers University	2017.06; 2018.06
6	Yoshiharu Krockenberger	Research Scientist	NTT Basic Research Laboratories	2017.06; 2018.06
7	EKU Gross	Director	Max-Planck Inst. of Microstructure Physics	2017.10
8	Hanno H.Weitering	Professor	University of Tennessee	2017.11
9	E. Kaxiras	Van Vleck Professor	Harvard University	2017.11
10	Peter Littlewood	Professor	University of Chicago	2018.06
11	Fei Song	Professor	Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences	2018.06
12	Xiaoqing Pan	Professor	University of California, Irvine	2018.07
13	Yishay Manassen	Professor	Ben Gurion University	2018.07
14	Howard Lee	OSA ambassador	Baylor University	2018.08
15	Dragan Mihailovic	Professor	Jozef Stefan Institute	2018.08
16	Yuichi Ikuhara	Professor	University of Tokyo	2018.09
17	F. Guistino	Professor	Oxford University	2018.10
18	Yoshio Bando	Professor	National Institute for Materials Science, Japan	2018.12
19	Dacheng Wei	Professor	Fudan University	2018.12

国际学术组织任职

序号	姓名	任职情况	任期
1	尹彦	美国光学学会 -OSA 中科院物理研究所学生分会， 指导老师	2011-

国内学术组织任职

序号	姓名	任职情况	任期
1	白雪冬	光电材料与技术国家重点实验室，学术委员	2009 -
2	白雪冬	材料学会纳米材料与器件分会理事	2014.04-
3	白雪冬	中国金属学会材料分会理事	2016 -
4	白雪冬	中国体视学会理事	2017 -
5	尹彦	中国国家知识产权协会和知识产权局，专利审查技术专家	2014 -
6	郭建东	中国真空学会 常务理事	2014.12 -
7	郭建东	中国物理学会表面界面物理专业委员会 主任	2015.12 -

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	尹彦	Scientific Reports, 编委	2015-
5	赵继民	Scientific Reports, 编委	2015-
6	孟胜	e-JSSNT, 副主编	2018-2021
7	孟胜	AIP 中国咨询委员会委员	2016-2020

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-
2	郭建东	Frontiers of Physics, 编委	2012-
3	孟胜	《中国科学数据》编委	2016-2020

表面科学论坛邀请报告

序号	报告人	报告题目	机构
1	Bin Shao	Ising Spintronics in Transition-metal Dichalcogenides	Bremen University, Germany
2	Chunyin Qiu	Valley Acoustics in Sonic Crystals	Wuhan University
3	Cai-Zhuang Wang	Metal on and under graphene: Growth morphology and effects of intercalation	Iowa State University
4	Rui He	Raman Spectroscopy of Interlayer Phonons and Charge Density Waves in Transition Metal Dichalcogenide Atomic Layers	Texas Tech University
5	Bruce E. Koel	Insights into the Role of the Electrode Surface in Solar-Driven Pyridine-Catalyzed CO ₂ Reduction	Princeton University
6	Eleftherios Goulielmakis	Route to Coherent Electronics	Max-Planck-Institut für Quantenoptik
7	Miao Liu	High-throughput Computing and its Application in Multivalent Battery Cathode Materials Discovery	Lawrence Berkeley National Laboratory
8	Kazuhiro Yabana	Real Time TDDFT: Basics and Applications	University of Tsukuba
9	Kazuhiro Yabana	Ab-initio Simulations for Attosecond Spectroscopy in Solids	University of Tsukuba
10	Aaron M. Lindenberg	Visualizing Materials Functionality at the Ultrafast and Atomic Scale	Stanford University
11	E.K.U. Gross	Berry Phases and Potential Energy Surfaces beyond the Born-Oppenheimer Approximation	Max Planck Institute of Microstructure Physics
12	Thomas Frauenheim	Atomistic modeling of quantum processes in nanoscale devices DFTB+: Applications to device and excited state simulations of nanomaterials	University of Bremen
13	Cristián G. Sánchez	Plasmon-driven Sub-picosecond Breathing of Metal Nanoparticles	National University of Córdoba
14	Efthimos Kaxiras	Applications of Machine Learning to Materials Modeling	Harvard University

序号	报告人	报告题目	机构
15	V. Renugopalakrishnan	Towards Precision Personalized Medicine: Point of Care (POC) Systems, Organ on a Chip for Ultra-Sensitive Quantitative Detection of Biomarkers in Physiological fluids	Northeastern University and Harvard Medical School
16	彭海琳	高迁移率二维氧化物半导体 BOX 的生长与器件	北京大学
17	赵爱迪	二维金属硫族化合物的制备及其表面结构的高分辨表征	中国科学技术大学
18	Yoke Khin Yap	Transistors without Semiconductors by Functionalized Boron Nitride Nanotubes	Michigan Technological University
19	Grigory Kolesov	Rutile TiO ₂ : photocatalysis and polarons	Harvard University
20	Jiming Bao	Interaction of light with matter: photoacoustic laser streaming and optical properties of low-dimensional Perovskites	University of Houston
21	Yishay Manassen	Detection of single electron and nuclear spins using scanning tunneling microscopy	Ben-Gurion University
22	Feliciano Giustino	Ab initio calculations of electron-phonon interactions: theory and applications	University of Oxford
23	Angelos Michaelides	Cold water and ice: Insights from computer simulations	University College London

表面物理半月谈

序号	报告人	报告题目
1	薛思玮	电子局域化现象
2	王建林	球差校正透射电子显微镜原理、技术及应用
3	胡史奇	Plasmon Dispersions in 2D materials
4	李晓梅	多铁材料及其器件原理
5	关梦雪	High Harmonic Generation in Solids
6	孔龙娟	Valley Degree of Freedom in Novel 2D Materials
7	邢淑雅	Spin-crossover phenomenon in metal-organic complexes and metal oxides
8	陈彩云	拓扑节线半金属
9	王亚德	自旋流的产生和检测
10	胡文启	等离激元光催化
11	唐向前	Kondo effect and some related physics
12	朱珊珊	量子反常霍尔效应
13	叶君	Itinerant Ferromagnetism and Stoner criterion
14	赵昱	化学视野下的 Jahn-Teller 效应

序号	报告人	报告题目
15	董安宁	Time-resolved scanning tunneling microscopy for probing ultrafast transient dynamics on surfaces
16	刘丽霞	BCS 的故事
17	孙 飞	Nonlinear optical response in topological material
18	贾 逊	The Stories of Unconventional Superconductivity
19	尹 彦	拉曼光谱学的应用与技术
20	张凌云	金兹堡 - 朗道理论获诺奖的传奇之路
21	刘欣宇	基于透射电镜扫描透射模式微分相位衬度像
22	黄 晓	抗冻剂的故事
23	安 旻	Time-resolved STM on semiconductor
24	赵 惠	Orbital Order and Orbital Wave in Transition Metal Oxides
25	安齐昌	Emergent Phenomena Induced by Tuning Carrier Density
26	张 平	表面增强拉曼光谱
27	张圣杰	Ultrafast optical manipulation of magnetic order

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 Quantum Phenomena Emerging at Heterointerfaces of Transition Metal Compounds

June 14th-15th, 2017
Meeting Room 236, Building M, IOP, CAS

Invited Speakers:

Qikun XUE	<i>Tsinghua University</i>
E.Ward PLUMMER	<i>Louisiana State University</i>
Geroge SAWATZKY	<i>University of British Columbia</i>
Jiandi ZHANG	<i>Louisiana State University</i>
Jak CHAKHALIAN	<i>Rutgers University</i>
Ke ZOU	<i>Yale University</i>
Y. KROCKENBERGER	<i>NTT Basic Research Laboratories</i>
Jian SHEN	<i>Fudan University</i>
Donglai FENG	<i>Fudan University</i>
Yuefeng NIE	<i>Nanjing University</i>
Chungang DUAN	<i>East China Normal University</i>
Hao YANG	<i>Nanjing University of Aeronautics and Astronautics</i>
Pu YU	<i>Tsinghua University</i>
Shaolong HE	<i>Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, CAS</i>
Zhiming WANG	<i>Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, CAS</i>
Zhicheng ZHONG	<i>Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, CAS</i>
Hongxin YANG	<i>Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, CAS</i>
Lin GU	<i>Institute of Physics CAS</i>
Hongming WENG	<i>Institute of Physics CAS</i>
Chen GE	<i>Institute of Physics CAS</i>
Xuetao ZHU	<i>Institute of Physics CAS</i>



Organizer: State Key Laboratory for Surface Physics, Key Laboratory of Optical 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、光物理重点实验室
Contact: Ms. Qihong LI (Email: surface@iphy.ac.cn, 010-82649428)





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

INTERNATIONAL WORKSHOP ON Surfaces and Interfaces of Quantum Materials

June 11th-12th, 2018
Meeting Room 236, Building M, IOP, CAS

Invited Speakers:

Ward PLUMMER	<i>Louisiana State University</i>
Peter LITTLEWOOD	<i>University of Chicago</i>
Karsten HELD	<i>Vienna university of technology</i>
Jiandi ZHANG	<i>Louisiana State University</i>
Jak CHAKHALIAN	<i>Rutgers University</i>
Jianming ZUO	<i>University of Illinois</i>
Thorsten SCHMITT	<i>Paul Scherrer Institut</i>
Y. KROCKENBERGER	<i>NTT Basic Research Laboratories</i>
Zhen WANG	<i>Brookhaven National Lab</i>
Erjia GUO	<i>Oak Ridge National Laboratory</i>
Donglai FENG	<i>Fudan University</i>
Xucun MA	<i>Tsinghua University</i>
Jinxing ZHANG	<i>Beijing Normal University</i>
Zhigao SHENG	<i>Hefei Institute of Physical Science, CAS</i>
Zhiming WANG	<i>Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, CAS</i>
Zhicheng ZHONG	<i>Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, CAS</i>
Yanwei CAO	<i>Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, CAS</i>
Hangwen GUO	<i>Fudan University</i>
Nianpeng LU	<i>Tsinghua University</i>
Zhaoliang LIAO	<i>University of Science and Technology of China</i>
Kuijuan JIN	<i>Institute of Physics CAS</i>
Jimin ZHAO	<i>Institute of Physics CAS</i>
Shuyuan ZHANG	<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. Qihong LI (Email: surface@iphy.ac.cn, 010-82649428)

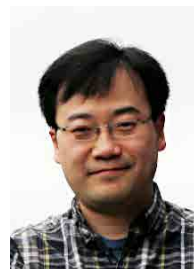
05 部分科研项目

序号	项目名称	负责人	项目来源	时间
1	超高时空分辨原位多尺度量子测量系统的研制	白雪冬 许 智	国家重大科研装备研制项目	2016–2020
2	全量子化效应的原子级调控	孟 胜 (课题负责人)	科技部国家重点研发计划	2016–2021
3	基于复杂氧化物表面界面的量子调控及其动力学研究 – 复杂功能材料低维结构的原子尺度控制生长	郭建东 (首席科学家)	科技部国家重点研发计划	2017–2022
4	基于复杂氧化物表面界面的量子调控及其动力学研究 – 界面晶格与电子激发态动力学	赵继民 (课题负责人)	科技部国家重点研发计划	2017–2022
5	复杂材料异质界面电荷转移诱导的新奇量子态研究	郭建东	基金委重点项目	2017–2021
6	磁性氦原子散射谱仪的设计与搭建	郭建东	中国科学院仪器设备研制项目	2018–2020
7	新型低维量子材料的原子层构筑、物性调控及其微观机理研究	吴克辉	基金委杰出青年科学基金	2019–2023
8	功能导向的原子制造前沿科学问题 – 低维材料及其异质结构的原子尺度精准制造	吴克辉 (课题负责人)	中国科学院战略性先导科技专项 (B类)	2018–2023
9	功能导向的原子制造前沿科学问题 – 原子尺度精准表征技术与系统	陆兴华 (课题负责人)	中国科学院战略性先导科技专项 (B类)	2018–2023
10	利用纳米孔技术探测生物大分子动态修饰的研究	陆兴华 (课题负责人)	基金委重大研究计划	2018–2020

06 人才引进及培养

2017-2018 年引进人才介绍

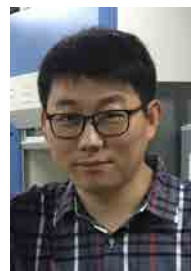
刘淼
Miao Liu



刘淼，2004年7月毕业于中国科学技术大学物理系，获得理学学士学位；2012年12月毕业于犹他大学，获材料科学与工程博士学位；2013年至2018年初在美国劳伦斯伯克利国家实验室从事博士后阶段的研究，是 Materials Project 的早期开发者之一；2018年3月加入中国科学院物理研究所，任特聘研究员，博士生导师。主要研究方向包括：基于第一性原理的高通量材料计算和材料数据库开发；基于高通量计算和材料大数据方法的新材料筛查、研发和优化。例如：刘淼通过高通量计算和材料筛查，系统的研究了多价态离子电池的正极材料（Chem. Mater. 27, 17, 6016；Chem. Rev. 117, 5, 4287）；发现了多种性能优异的镁离子电池正极材料（Energy Environ. Sci., 2016,9, 3201；Energy Environ. Sci., 2015, 8, 964），并得到了实验证实（Energy Environ. Sci., 2016,9, 2273）。

Miao Liu obtained his B. S. degree from the University of Science and Technology of China in the year 2004, and he was granted the Ph.D. in Materials Science and Engineering by the University of Utah at the end of 2012. He, then, joined the Lawrence Berkeley National Laboratory as a chemist postdoc fellow for energy materials research, also he was a former developer of the 'Materials Project' during his postdoc years. In the year 2018, Miao Liu was appointed as an associate professor in the Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences. His primary interest is to understand the fundamental principles in materials and use them to predict/design new materials. Leveraging the state-of-art atomistic scale simulation tools as well as the recent advance in High-throughput calculations, he seeks to explore the electrochemical properties, atomistic configuration, and electronic structures of material systems from an 'in silico' route. For example, he systematically studied the multivalent cathode materials (Chem. Mater. 27, 17, 6016; Chem. Rev. 117, 5, 4287) and

discovered several promising candidate compounds for Mg batteries (Energy Environ. Sci., 2016,9, 3201; Energy Environ. Sci., 2015, 8, 964), which had been experimentally demonstrated to have improved energy storage performance (Energy Environ. Sci., 2016,9, 2273).



鲁年鹏
Nianpeng Lu

鲁年鹏，2014年于中国科学院物理研究所获博士学位，随后在清华大学物理系于浦课题组从事博士后研究工作。2018年8月加入中国科学院物理研究所表面物理国家重点实验室 SF03 组，任特聘研究员，博士生导师。主要研究方向为功能性过渡金属氧化物的新材料制备、新型量子调控、功能特性研究及模型器件的构建。近期研究主要集中于过渡金属氧化物离子调控，并在氧化物物相和物性调控方面取得一系列重要进展。代表性工作包括：电场控制双离子诱导可逆多态相变 (Nature 546, 124, 2017); 室温温区高质子电导率电解质探索 (arXiv:1811.10802, 2018); 微观原子尺度研究氧离子迁移及相变 (Nature Commun. 8, 104, 2017); 氧离子栅极实现室温快速磁电耦合 (Nature Commun. 8, 2156, 2017) 等。

Nianpeng Lu obtained his PhD degree in the Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences (IOP-CAS) in 2014. After that, he joined Prof. Pu Yu's lab as a postdoctoral researcher in Department of Physics of Tsinghua University. In August of 2018, he returned to IOP-CAS and joined the SF03 group of state key laboratory of surface physics as a professor and doctoral supervisor. Currently, his research focuses on thin film growth of newly designed complex transition metal oxides, exploration of the exotic physical and functional properties of these materials, and fabrication of the model devices based on the discovered interesting properties with novel functionalities. Over the past few years, he has carried out researches on the ionic modulation of functional transition metal oxides, and made a series of substantial progresses with the discovery of important physical states and exotic properties in complex oxides: 1) realize for the first time the electric-field control of dual-ion (oxygen and hydrogen) tri-state phases transformation (Nature 546, 124, 2017); 2)

achieve the superior proton conductivity at the low temperature (arXiv:1811.10802, 2018); 3) unveil the mechanism of oxygen ion migration within the brownmillerite strontium cobaltite crystalline lattice and corresponding phase transformation at atomic scale. 4) realize a room-temperature and rapid magnetoelectric coupling through oxygen ion gating (Nature Commun. 8, 2156, 2017).

冯宝杰
Baojie Feng



冯宝杰，中科院物理所特聘研究员。2005年至2009年本科就读于山东大学；2009年至2015年在中科院物理所硕博连读；2013年至2014年在美国加州大学欧文分校作访问学者；2015年至2017年在日本东京大学从事博士后研究；2017年至2018年在日本广岛大学放射光科学研究中心担任助理教授；2018年9月加入中科院物理所。主要研究方向为低维量子材料的分子束外延生长和调控；拓扑材料的物性研究；利用角分辨光电子能谱技术研究材料的电子自旋结构；基于扫描隧道显微镜 / 扫描隧道谱的物性研究与调控。在国际知名杂志发表文章30余篇，文章总引用超过2400。

Baojie Feng is a Distinguished Professor in the Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences. He obtained his BS degree from Shandong University in 2009 and got his PhD degree in the Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences in 2015. From 2015 to 2017, he was a postdoctoral researcher in the University of Tokyo and was an assistant professor in Hiroshima University from 2017 to 2018. He joined the Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences from the September of 2018. His main research fields are: epitaxial growth of low-dimensional quantum materials; physical properties of topological materials; investigation of electronic structures and spin textures of materials by angle-resolved photoemission spectroscopy and scanning tunneling microscopy. To date, he published more than 30 peer-reviewed papers, and the total citation exceeds 2400.

王立芬
Lifen Wang



王立芬 2009–2014 年就读于中科院物理所取得凝聚态物理博士学位。博士期间主要工作是在透射电子显微镜搭建纳米尺寸锂离子电，原位研究不同储能材料的储锂机制。相关工作有 J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 6693–6697; ACS Nano. 2014, 8, 8249–8254; Sci. China Tech. Sci. 2013, 56, 2630–2635. 等。2014 年–2018 年在美国阿贡国家实验室电镜中心继续博士后研究。主要科研领域围绕于运用色差，球差双矫正透射电镜对储能材料进行全元素原子级成像；以及在透射电镜中搭建液态反应环境反应池，原位研究材料的成核结晶行为。相关工作有 Nanoscale 2016, 8, 17250–17255.; Nano Energy 2017, 42, 294–299. 等。2018 年 9 月以副研究员入职中科院物理所，主要研究方向为：功能材料中锂离子、氧离子多场调控下的晶格动力学行为；固液相变、固液界面处的相变动力学行为；以及低维材料中多场调控的结构相变动力学行为。

Lifen Wang got her Ph.D. in physics with honor from Institute of Physics Chinese Academy of Sciences, China in 2014. From 2014 to 2018 she joined Nanoscience & Technology division in Argonne National Laboratory, United States as postdoctoral appointee mainly working on in situ aberration-corrected transmission electron microscopy in lithium ion battery electrode materials structural phase transition, nucleation mechanism of ions from solution, and oxygen diffusion dynamics in catalytic materials. Since Sep. 2018, she joined the State Key Laboratory for Surface Physics as an Associate Professor. Her research interests mainly focus on in situ/oprando aberration-corrected (S)TEM study of phase transition dynamics including: solid-liquid phase transition dynamics in the initial nucleation and crystallization stages, the solid-liquid interface structural rearrangement dynamics; nucleation of ions from solutions; structural transition mechanism of energy-related materials; ions like lithium and oxygen modulation and diffusion dynamics in functional oxides and devices.

张萃
Cui Zhang



张萃，2011年12月毕业于加州大学戴维斯分校，获得化学博士学位；毕业后在加州大学戴维斯分校和普林斯顿大学从事博士后研究。2015年7月进入北京应用物理与计算数学研究所工作；2018年11月加入物理所，任副研究员。研究工作主要集中在复杂条件下物质基本性质及应用的多尺度计算模拟，通过发展和应用基于密度泛函和动力学理论的计算模拟方法和模型，与实验研究紧密结合，探索多尺度复杂条件下材料的结构、相变以及光电特性。

Cui Zhang received her PhD degree in Chemistry from the University of California at Davis in December 2011. After graduation, she worked as a postdoctoral scholar at the University of California, Davis and then moved to Princeton University to continue her post doctorate research. She started working in the Institute of Applied Physics and Computational Mathematics in July 2015 and joined the Institute of Physics as an associate professor in November 2018. Her research activity is mainly focusing on multi-scale computational simulations of fundamental properties and applications of materials under complex conditions. Her research interests lie in developing and applying advanced theoretical and computational methodologies based on density functional theory and dynamics theory, integrating with experimental research, to investigate the structure, phase transition and photoelectric properties of materials under complex conditions for the environmental and energy-related applications.

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	现在情况
1	张磊	白雪冬	2015-2018	阻变存储器机理的原位电镜研究 RRAM mechanism by in-situ TEM	2015.06 东北师范大学	中南大学
2	李许静	白雪冬	2015-2018	铁电薄膜的制备与性质研究 Preparation and properties of ferroelectric films	2016.06 北京科技大学	中科院生物物理所
3	王理	王文龙	2016-	石墨烯类二维材料的制备 Preparation of graphene-like 2D structures	2016.06 武汉大学	
4	左勇刚	白雪冬	2017-	低维材料结构与物性 Structure and properties of low-dimensional materials	2017.06 中国科学院大学	
5	吴艳玲	赵继民	2017-	二维材料中的空间自相位调制 The Spatial Self-Phase Modulation in 2-dimensional materials	2017.06 南开大学	
6	胡立立	陆兴华 赵继民	2016-2019	强关联体系的超快光谱学 Ultrafast Spectroscopy of Strongly Correlated Materials	2013.07 中国科学院化学研究所	
7	胡旻卉	郭建东	2013-2018	复杂氧化物薄膜生长与物性研究 Preparation and characterization of complex oxide thin films	2011.10 法国巴黎第六大学—皮埃尔和玛丽·居里大学	中科飞通科技(北京)有限公司
8	孟梦	郭建东	2018-	复杂氧化物异质结构筑与物性调控 Epitaxial growth and tuning the physical properties of complex oxide heterostructures	2018.01 中山大学	
9	廉超	孟胜	2015-2017	电子动力学 Electron-ion dynamics	2015.07 清华大学	加州大学河滨分校

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	叶通	2013-2017	碳基材料与太赫兹波的相互作用 Interactions between carbon-based materials and terahertz radiation	博士	汪力彦 尹彦	华中科技大学
2	孙慕华	2012-2018	纳米微区锂离子固态电化序过程的原位透射电镜研究 In-situ TEM Study of Lithium-related Solid State Electrochemical Processes at Nanoscale	博士	白雪冬	University of Nebraska-Lincoln
3	黄前明	2012-2018	过渡金属二硫化物碱金属嵌入过程的原位透射电镜研究 /In-Situ TEM Investigation of Alkali Metal Intercalation of Transition Metal Dischalcogenides	博士	白雪冬	北京科技大学
4	许腾	2013-2018	反钙钛矿结构化合物薄的制备与物性研究 Film Growth and Property Investigation of Antiperovskite-Type Compounds	博士	曹则贤	清华大学
5	孙丽欢	2013-2018	时间分辨扫描隧道显微镜技术及半导体表面超快动力学研究 Time-resolved scanning tunneling microscopy and ultrafast dynamics on semiconductor surfaces	博士	陆兴华	日内瓦大学
6	刘冰	2013-2018	利用有机配位场调控单个过渡金属原子的磁性 Tuning The Magnetic Properties of transition Metal Atoms by Organic Ligand Field	博士	郭建东 王炜华	维尔兹堡大学
7	张书源	2013-2018	FeSe/SrTiO ₃ 体系低能元激发的研究 The Study of Low Energy Excitations at the System of FeSe/SrTiO ₃	博士	郭建东 朱学涛	美国康奈尔大学
8	关佳其	2012-2017	硫族材料薄膜的生长及其结构和物性调控 Film Growth and Structure/ Properties Tuning of Chalcogen Materials	博士	郭建东 王炜华	清华大学

序号	姓名	在读时间	论文题目	所获学位	导师	现在机构
9	黄筱淳	2015-2017	Te 超薄膜在石墨烯超导上的外延生长与电子结构调控 Epitaxial growth and electronic structure modulation of tellurium films on graphene	博士	王伟华 郭建东	德国亚琛工大
10	钟青	2012-2017	硼烯的分子束外延生长及扫描隧道显微镜研究 Molecular beam epitaxy growth and scanning tunneling microscope study of borophene	博士	吴克辉	都柏林大学
11	苟健	2014-2018	基于IV、V族元素二维材料的合成及表征研究 The Synthesis and Characterization of Two-dimensional Materials Based on Group IV and V Elements	博士	吴克辉	新加坡国立大学
12	盛少祥	2012-2018	低维材料的针尖增强拉曼光谱研究 Tip-enhanced Raman spectroscopy of low dimensional materials	博士	吴克辉	斯图加特大学
13	黎文彬	2012-2018	新型薄膜材料的 MBE 生长与 STM 研究 MBE growth and STM study of new type thin films	博士	吴克辉	汉堡大学
14	朱珊娜	2012-2018	磁近邻耦合的拓扑绝缘体薄膜生长及其输运性质研究 The Growth and Transport Properties of Topological Insulator Thin Films in Proximity to a Ferromagnetic Insulator	博士	吴克辉	
15	付会霞	2012-2017	硅基二维量子材料的第一性原理设计 First-Principles Design of Two Dimensional Silicon-based Quantum Materials	博士	孟胜	以色列威兹曼研究所
16	严蕾	2012-2017	等离激元诱导光催化反应的微观机制	博士	孟胜	日本东京大学

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
17	魏兰英	2012-2017	钙钛矿界面缺陷电子性质的第一性原理研究 First-principles studies on interface electronic properties induced by vacancies in perovskite materials	博士	孟胜	中芯国际
18	赵鹏	2013-2017	原子级层状材料的浸润性	硕士	孟胜	成都市专利局

在读研究生情况 Graduate Students

序号	姓名	导师	入学日期
1	刘宇	王文龙	2013年09月
2	宋晨之	白雪冬	2013年09月
3	叶君	王文龙	2014年09月
4	赵昱	王文龙	2016年09月
5	朱亮	白雪冬	2014年09月
6	陈潘	白雪冬	2014年09月
7	李晓梅	白雪冬	2015年09月
8	王建林	白雪冬	2015年09月
9	刘欣宇	白雪冬	2015年09月
10	余博晗	白雪冬 赵继民	2016年09月
11	张晓伟	王文龙	2018年09月
12	郭金健	王文龙	2018年09月
13	孙华聪	白雪冬	2018年09月
14	廖磊	白雪冬	2018年09月
15	蔡尘	白雪冬	2018年09月
16	凌昊	王文龙	2018年09月
17	许磊	白雪冬 齐俊杰(北京科技大学)	2018年07月

序号	姓名	导师	入学日期
18	黄旭丹	王恩哥 白雪冬	2018年09月
19	纪桂萍	曹则贤	2015年09月
20	黄晓	曹则贤	2016年09月
21	陈笑坤	鲁年鹏	2018年09月
22	李健梅	陆兴华	2013年09月
23	董安宁	陆兴华	2014年09月
24	郝东	陆兴华	2014年09月
25	姚一锟	陆兴华	2014年09月
26	唐向前	陆兴华	2015年09月
27	孙飞	赵继民	2014年09月
28	吴穹	赵继民	2014年09月
29	安旻	陆兴华	2016年09月
30	赵新佳	陆兴华	2015年09月
31	陈晓钰	陆兴华	2017年09月
32	加孜拉·哈塞恩	赵继民	2017年09月
33	高振东	陆兴华	2018年09月
34	米壮	陆兴华	2018年09月
35	贾逊	郭建东 朱学涛	2014年09月
36	刘丽霞	郭建东	2014年09月
37	朱清	郭建东 杨芳	2014年09月
38	薛思玮	郭建东	2015年09月
39	王亚德	郭建东	2015年09月
40	安齐昌	孙牧 郭建东	2016年09月
41	徐小凤	郭建东	2016年09月
42	苗光耀	郭建东	2016年09月
43	林子荐	郭建东	2017年09月
44	王珍珍	王炜华	2017年09月

序号	姓名	导师	入学日期
45	李博	王炜华	2017年09月
46	李毅	郭建东	2018年09月
47	袁惟良	朱学涛	2018年09月
48	李佳德	朱学涛	2018年09月
49	杨硕	吴克辉	2012年09月
50	孔龙娟	吴克辉	2014年09月
51	王旭光	吴克辉	2014年09月
52	陈彩云	吴克辉	2015年09月
53	胡文启	吴克辉	2015年09月
54	李淑荟	吴克辉	2016年09月
55	张平	吴克辉	2016年09月
56	张嘉翔	陈岚	2016年09月
57	张和煦	陈岚	2016年09月
58	岳绍圣	吴克辉	2017年09月
59	王宇	陈岚	2017年09月
60	耿岱玉	陈岚	2017年09月
61	刘慧如	吴克辉	2017年09月
62	刘子嘉	吴克辉	2018年09月
63	张进	孟胜	2013年09月
64	刘剑	孙家涛 孟胜	2013年09月
65	孟利楠	孟胜	2014年09月
66	刘行	孙家涛 孟胜	2014年09月
67	徐纪玉	孟胜	2014年09月
68	关梦雪	孟胜	2015年09月
69	胡史奇	孟胜	2015年09月
70	张圣杰	孟胜	2016年09月
71	游佩桅	孟胜	2016年09月

序号	姓名	导师	入学日期
72	申钰田	孟 胜	2016 年 09 月
73	李轩熠	孙家涛 孟 胜	2016 年 09 月
74	赵 惠	孟 胜	2016 年 09 月
75	刘新豹	孟 胜	2016 年 09 月
76	贾华显	刘 淼 孟 胜	2017 年 09 月
77	周 辉	刘 淼 孟 胜	2017 年 09 月
78	王慧敏	孟 胜	2017 年 09 月
79	王 恩	孙家涛	2017 年 09 月
80	宋晨晨	孟 胜	2017 年 09 月
81	张一民	孟 胜 李顺方 (郑州大学)	2018 年 03 月
82	陈大强	孟 胜	2018 年 09 月
83	赵儒冀	孟 胜	2018 年 09 月
84	芦腾龙	孙家涛	2018 年 09 月
85	徐秋毫	孙家涛 孟 胜	2018 年 09 月
86	蔡光辉	刘 淼	2018 年 09 月
87	喻 泽	刘 淼	2018 年 09 月
88	聂正蔚	刘 淼	2018 年 09 月

07 实验设备

低维量子结构表征与操纵平台

序号	名称
1	高性能计算机集群系统
2	脉冲电子束沉积系统 PED
3	超高真空激光分子束外延系统
4	透射电子显微镜
5	原子力显微镜
6	超快共焦扫描近场显微镜
7	自旋分辨扫描隧道显微镜
8	反射高能电子衍射谱仪
9	光电混合低温扫描隧道显微镜
10	低温扫描隧道显微镜 - 针尖增强拉曼系统 (LT STM-TERS)
11	光致发光测试系统 (PL)
12	太赫兹光谱系统
13	能量 / 动量二维解析的高分辨电子能量损失谱仪
14	多功能表面分析系统
15	视频光学接触角测量仪
16	X 射线光电子能谱仪
17	半导体器件分析仪
18	宽频介电谱仪 BDS
19	LCR 测量仪
20	液 He 低温恒温器
21	太阳能电池 I-V 测试系统
22	超导磁体变温系统
23	光学型低温恒温器
24	分子束外延系统
25	超快激光器系统

实验室其他设备

序号	名称
1	管式炉热 CVD 生长系统
2	磁控溅射系统
3	等离子体增强化学气相沉积系统 PECVD
4	光参量放大器 OPA
5	光谱仪
6	矢量网络分析仪
7	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
8	超高真空低温扫描隧道显微镜 - 分子束外延联合系统
9	超高真空室温扫描隧道显微镜 - 分子束外延 - 俄歇联合系统
10	臭氧清洗机
11	低温 (4K) STM- 集成非接触 AFM(nc-AFM) 系统
12	泰思曼 TRC2020 系列高压电源

2017-2018 年新增设备介绍:



1. 双球差矫正器透射电镜

型号: JEM-ARM300F。功能: 材料原子像、元素分析与谱成像, 性能: STEM 分辨率 63 pm@300 kV, TEM 分辨率 < 80 pm@300 kV, EELS 能量分辨率 0.35 eV, EDS 能量分辨率 133 eV。

Model: JEM-ARM300F. Function: structure and composition characterization at atomic level. Performance: STEM resolution is 63 pm@300 kV, TEM resolution is < 80 pm@300 kV. EELS energy resolution is 0.35 eV, EDS energy resolution is 133 eV.



2. 拉曼光谱系统 (Raman microscopes)

型号: LabRAM HR Evolution。功能: 主要用于拉曼光谱学表征。性能: 能同时安装多达 3 个探测器, 以实现宽波长范围(从 200nm 到 2100nm)检测; 智能全自动设计在保证仪器性能卓越的同时还使其操作简单方便。

Model: LabRAM HR Evolution. Function: mainly used for Raman spectroscopy characterizations. Performance: mounting up to three detectors enables the measurement wavelength range to be extended from 200nm to 2100nm; the fully automated intelligent design ensures ultimate performance coupled with ease of use.



3. 超高分辨扫描电子显微镜

高分辨扫描电子显微镜 (High-Resolution Scanning Electron Microscopy, 简称 HRSEM) 利用电子束扫描材料表面, 通过收集各种电子信号 (如二次电子, 背反射电子等) 得到其扫描电子像来获得材料的物性信息。其独特的微观形貌成像和微区成分分析能力, 已使其成为材料生长、结构表征、器件制备等必需的研究手段之一。HRSEM 涉及的科研领域极为广泛, 包括 (1) 金属、半导体、无机物、有机物、陶瓷等各种固体材料的研究, (2) 纳米结构的制备和物性研究, (3) 表面及低维量子体系的奇异物性和电子态调控研究, (4) 单分子及纳米器件的研究等。

高分辨扫描电子显微镜所选的型号为日立公司的 SU-8220, 该型号继承了 S-4800 的众多优点, 二次电子分辨率 15 kV 时 0.8 nm (工作距离 4 mm), 1kV 时 1.1 nm (减速模式), 新型冷场发射电子枪具有更高的相干度、更高亮度、更小束斑等, 因此成像质量更好。低加速电压下也具有较高分辨率, 这样可以减少电子束轰击对样品的损伤, 以及减少观察不导电样品时的荷电现象, 可以在低加速电压下获得较高衬度的背散射信号。



4. 小型材料计算与数据库集群

该集群配备有 6 台计算节点, 1 台全闪存数据库节点, Infiniband 低延时网络, 和 80TB 存储。集群硬件采用最新一代 Intel skylake 架构, 具备每秒 8 万亿次的算力和 56Gb/s 高速网络, 集群软件具备最新理念的 NoSQL 数据库支持。该集能可以应对通常小规模并行计算和材料数据库开发测试阶段的基本需求。

The computational cluster is composed with 6 computational servers, 1 all-flash database server, high-speed low-latency Infiniband network and 80TB of storage. The hardware takes advantage of the newest Intel Skylake CPU and chipset, and can provide 8Tflops of computing power and 56Gb/s internal data transportation. Hence, it can handle the normal size parallel scientific computation and can sever as a nice testing environment for the materials database development.

08 荣誉和奖励

获奖情况

姓名	所获荣誉
曹则贤	2018 中国科学年度新闻人物之科技传播者
朱学涛	物理所 2018 年“科技新人奖”

研究生获奖情况

◆中国科学院大学 2016-2017 学年优秀学生

三好标兵：赵鹏

三好学生：孙慕华 赵 昱 纪桂萍 董安宁 吴 穹 贾 逊 黄筱淳 钟 青 王旭光 张 进

优秀毕业生：付会霞

◆中国科学院物理研究所 2017 年度所长奖学金优秀奖

贾 逊 黎文彬 孙慕华 孙 飞 刘 行

◆中国科学院物理研究所 2017 年度所长奖学金表彰奖

宋晨之 陈 潘 刘 宇 朱 亮 赵 昱 黄前明 叶 君 许 腾 郭 伟 孙丽欢 李健梅 董安宁

吴 穹 唐向前 黄筱淳 刘 冰 张书源 刘丽霞 薛思玮 杨 硕 朱珊娜 王旭光 孔龙娟 陈彩云

张 进 关梦雪 胡史奇 徐纪玉 孟利楠

◆2017 年研究生国家奖学金 盛少祥（博士） 安齐昌（硕士）

◆中国科学院大学 2017-2018 学年优秀学生

三好标兵：盛少祥

三好学生：朱 亮 陈 潘 纪桂萍 唐向前 赵惠 薛思玮 贾 逊 刘丽霞 陈彩云 朱珊娜 刘 行 孟利楠

优秀毕业生：张书源

◆中国科学院物理研究所 2018 年度所长奖学金优秀奖

刘丽霞 孔龙娟 刘 剑 朱 亮 唐向前

◆中国科学院物理研究所 2018 年度所长奖学金表彰奖

陈 潘 王建林 李晓梅 纪桂萍 薛思玮 苗光耀 陈彩云 胡文启 王旭光 关梦雪 孟利楠 徐纪玉

赵 惠 吴 穹 安 旻 赵新佳

◆2018 年研究生国家奖学金 孙飞（博士）

09 发表文章

发表文章目录 / Publications List

序号	论文
1	Muhua Sun, Jiake Wei, Zhi Xu, Qianming Huang, Yu Zhao, Wenlong Wang, Xuedong Bai, Electrochemical solid-state amorphization in the immiscible Cu-Li system, SCIENCE BULLETIN 63, 1208 (2018).
2	Qianming Huang, Lifen Wang, Zhi Xu, Wenlong Wang, Xuedong Bai, In-situ TEM investigation of MoS ₂ upon alkali intercalation, SCIENCE CHINA-CHEMISTRY 61, 222 (2018).
3	Shuangshuang Tan, Yalong Jiang, Qiulong Wei, Qianming Huang, Yuhang Dai, Fangyu Xiong, Qidong Li, Qinyou An, Xu Xu, Zizhong Zhu, Xuedong Bai, Liqiang Mai, Multidimensional synergistic nanoarchitecture exhibiting highly stable and ultrafast sodium-ion storage, ADVANCED MATERIALS 30, 1707122 (2018).
4	Fengrui Yao, Can Liu, Cheng Chen, Shuchen Zhang, Qiuchen Zhao, Fajun Xiao, Muhong Wu, Jiaming Li, Peng Gao, Jianlin Zhao, Xuedong Bai, Shigeo Maruyama, Dapeng Yu, Enge Wang, Zhipei Sun, Jing Zhang, Feng Wang, Kaihui Liu, Measurement of complex optical susceptibility for individual carbon nanotubes by elliptically polarized light excitation, NATURE COMMUNICATIONS 9, 3387 (2018).
5	Chaojie Ma, Jianglei Di, Yi Zhang, Peng Li, Fajun Xiao, Kaihui Liu, Xuedong Bai, Jianlin Zhao, Reconstruction of structured laser beam through a multimode fiber based on digital optical phase conjugation, OPTICAL LETTERS 43, 3333 (2018).
6	Chaojie Ma, Jianglong Di, Ying Li, Fajun Xiao, Jiwei Zhang, Kaihui Liu, Xuedong Bai, Jianlin Zhao, Rotational scanning and multiple-spot focusing through a multimode fiber based on digital phase conjugation, APPLIED PHYSICS EXPRESS 11, 062501 (2018).
7	T. Xu, Z.X. Cao, A.L. Ji, Metal-Semiconductor Transition at Comparable Resistivity Level and Positive Magnetoresistance in Mn ₃ Mn _{1-x} Pd _x N Thin Films, JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS 51, 055303 (2018).
8	Guo Wei, Zhao Lishan, Gao Xin, Cao Zexian, Wang Qiang, Accurate quantification of hydration number for polyethylene glycerol molecules, CHINESE PHYSICS B 5, 055101 (2018).
9	Lingyun Zhang, Assembly mechanism for aggregation of amyloid fibrils, INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 19, 2141 (2018).
10	Lihuan Sun, Anning Dong, Jianmei Li, Dong Hao, Xiangqian Tang, Shichao Yan, Yang Guo, Xinyan Shan, Xinghua Lu, Optical Stark effect of a Single defect on the TiO ₂ (110) surface, PHYSICAL REVIEW B , 98.081402 (2018).

序号	论文
11	Anning Dong, Lei Yan, Lihuan Sun, Shichao Yan, Xinyan Shan, Yang Guo, Sheng Meng and Xinghua Lu, Identifying few-molecule water clusters with high precision on Au(111) surface, ACS NANO , 12,6452 (2018).
12	F. Sun, M. Yang, M. W. Yang, Q. Wu, H. Zhao, X. Ye, Y. G. Shi, Jimin Zhao, Coherent Acoustic Phonon and its Chirping in Dirac Semimetal Cd ₃ As ₂ , CHINESE PHYSICS LETTERS 35, 116301 (2018).
13	J. H. Lin, H. Zhang, B. F. Zhang, Jimin Zhao, Y. Miyamoto, X. L. Cheng, Ultrafast Laser Pulses Induced Insulator Metal Transition and Multiple Plasmons in Barium Titanate Quantum Dots, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 122, 19992 (2018).
14	Shuang Wu, Bing Liu, Cheng Shen, Si Li, Xiaochun Huang, Xiaobo Lu, Peng Chen, Guole Wang, Duoming Wang, Mengzhou Liao, Jing Zhang, Tingting Zhang, Shuopei Wang, Wei Yang, Yang R, Shi DX, Watanabe K, Taniguchi T, Yugui Yao, Wang WH, Zhang GY, Magnetotransport Properties of Graphene Nanoribbons with Zigzag Edges, PHYSICAL REVIEW LETTERS 120, 216601 (2018).
15	Shuya Xing, Bing Liu, Wen-quan Wang, Jiandong Guo, and Weihua Wang, On-surface synthesis of graphene nanoribbons catalyzed by Ni atoms, CHEMISTRY-AN ASIAN JOURNAL 13, 2023-2026 (2018).
16	Yan Liang, Yade Wang, Lixia Liu, Qinlin Guo, Weihua Wang, Hao Yang and Jiandong Guo, Chemical intermixing at oxide heterointerfaces with polar discontinuity, APPLIED PHYSICS LETTERS 112, 231601 (2018).
17	Xiaochun Huang, Bing Liu, Jiaqi Guan, Guangyao Miao, Zijian Lin, Qichang An, Xuetao Zhu, Weihua Wang, and Jiandong Guo, Realization of in-plane p-n junctions with continuous lattice of a homogeneous material, ADVANCED MATERIALS 30, 1802065 (2018).
18	Lixia Liu, Zijian Lin, Yade Wang, Weihua Wang, Fang Yang, Xuetao Zhu, Jiandong Guo, Lanthanum-induced quasi-one-dimensional reconstructions on Si(111), SURFACE SCIENCE 674, 40 (2018).
19	Fang Yang, Yan Liang, Lixia Liu, Qing Zhu, Weihua Wang, Xuetao Zhu, Jiandong Guo, Controlled growth of complex oxide polar films with atomic precision in molecular beam epitaxy, FRONTIERS OF PHYSICS 13 (5), 136802 (2018).
20	Xuetao Zhu and Jiandong Guo, Development of novel high-resolution electron energy loss spectroscopy and related studies on surface excitations, ACTA PHYSICA SINICA 67, 127901 (2018).

序号	论文
21	Minhui Hu, Qinghua Zhang, Lin Gu, Qinlin Guo, Yanwei Cao, M. Kareev, J. Chakhalian, and Jiandong Guo, Reconstruction–Stabilized Epitaxy of $\text{LaCoO}_3/\text{SrTiO}_3(111)$ Heterostructures by Pulsed Laser Deposition, APPLIED PHYSICS LETTERS 112, 031603 (2018).
22	Shuyuan Zhang, Jiaqi Guan, Yan Wang, Tom Berlijn, Steve Johnston, Xun Jia, Bing Liu, Qing Zhu, Qichang An, Siwei Xue, Yanwei Cao, Fang Yang, Weihua Wang, Jiandi Zhang, E. W. Plummer, Xuetao Zhu, and Jiandong Guo, Lattice Dynamics of Ultrathin FeSe Films on SrTiO_3 , PHYSICAL REVIEW B 97, 035408 (2018).
23	Jiaqi Guan, Xiaochun Huang, Xiaofeng Xu, Shuyuan Zhang, Xun Jia, Xuetao Zhu, Weihua Wang and Jiandong Guo, Superstructures at $\text{Te}/\text{Au}(111)$ interface evolving upon increasing Te coverage, SURFACE SCIENCE 669, 198 (2018).
24	Lixia Liu, Shuai Wang, Shuming Liu, Qinlin Guo and Jiandong Guo, Interaction of Water with Faceted $\text{NiO}(111)$ Surface Tuned by Films Thickness, SURFACE SCIENCE 667, 8–12 (2018).
25	Jian Gou, Bingyu Xia, Hang Li, Xuguang Wang, Longjuan Kong, Peng Cheng, Hui Li, Weifeng Zhang, Tian Qian, Hong Ding, Yong Xu, Wenhui Duan, Kehui Wu, and Lan Chen, A binary two–dimensional honeycomb lattice with strong spin–orbit coupling and electron–hole asymmetry, PHYSICAL REVIEW LETTERS 121, 126801 (2018).
26	Chao Zhang, Zhi Li, Jincheng Zhuang, Li Wang, Haifeng Feng, Xun Xu, Zhenpeng Hu, Shi Xue Dou, Xiaolin Wang, Yi Du, Kehui Wu, Lan Chen, Qian Gao, Realization of Flat Band with Possible Nontrivial Topology in Electronic Kagome Lattice, SCIENCE ADVANCES 4, 4511 (2018).
27	Webin Li, Longjuan Kong, Baojie Feng, Huixia Fu, Hui Li, Xiao–Cheng Zeng Kehui Wu and Lan Chen, Abnormal phase transition between two–dimensional high– density liquid crystal and low– density crystal phases of carbon monoxide on $\text{Cu}(111)$, NATURE COMMUNICATIONS 9, 198(2018).
28	Shaoxiang Sheng, Runze Ma, Jiangbin Wu, Wenbin Li, Longjuan Kong, Xin Cong, Duanyun Cao, Wenqi Hu, Jian Gou, Junwei Luo, Peng Cheng, Pingheng Tan, Ying Jiang, Lan Chen and Kehui Wu, The pengatonal nature oef self–assembled silicon chains and magic clusters on $\text{Ag}(110)$, NANO LETTERS 18, 2937(2018).
29	B. Feng, S. Ito, M. Arita, L. Chen, K. Wu, F. Kumori, K. Miyamoto, T. Okuda and I. Matsuda, Discovery of two–dimensional anistropic Dirac cones, ADVANCED MATERIALS 30, 1704025 (2018).
30	Shaoxiang Sheng, Wenbin Li, Jian Gou, Peng Cheng, Lan Chen, and Kehui Wu, Low–temperature, ultrahigh–vacuum tip–enhanced Raman spectroscopy combined with molecular beam epitaxy for in situ two–dimensional materials’ studies, REVIEW OF SCIENTIFIC INSTRUMENTS 89, 053107 (2018).
31	Jian Gou, Long–Juan Kong, Wen–Bin Li, Shao–Xiang Sheng, Hui Li, Sheng Meng, Peng Cheng, Ke–Hui Wu and Lan Chen, Scanning tunneling microscopy investigations of unoccupied surface states in two–dimensional semiconducting $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ – $\text{Bi}/\text{Si}(111)$ surface, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 20, 20188 (2018) .
32	Shanna Zhu, Gang Shi, Peng Zhao, Dechao Meng, Genhao Liang, Xiaofang Zhai, Yalin Lu, Yongqing Li, Lan Chen and Kehui Wu, Growth and transport properties of topological insulator Bi_2Se_3 thin film on a ferromagnetic insulating substrate, CHINESE PHYSICS B 27,076801 (2018).

序号	论文
33	Shanna Zhu, Dechao Meng, Genhao Liang, Gang Shi, Peng Zhao, Peng Cheng, Yongqing Li, Xiaofang Zhai, Yalin Lu, Lan Chen and Kehui Wu, Proximity-induced magnetism and an anomalous Hall effect in $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{LaCoO}_3$: a topological insulator/ferromagnetic insulator thin film heterostructure, NANOSCALE 10, 10041 (2018).
34	Li Wenbin, Kong Longjuan, Chen Caiyun, Gou Jian, Sheng Shaoxiang, Zhang Weifeng, Li Hui, Chen Lan, Cheng Peng and Wu Kehui, Experimental realization of honeycomb borophene, SCIENCE BULLETIN 63(5), 282 (2018).
35	Longjuan Kong, Kehui Wu and Lan Chen, Recent Progress on borophene: Growth and structures, FRONTIERS OF PHYSICS 13, 138105 (2018).
36	X. Zhang, J.Y. Xu, Y.B. Tu, K. Sun, M.L. Tao, Z.H. Xiong, K.H. Wu, J.Z. Wang, Q. K. Xue, S. Meng, Hexagonal Monolayer Ice without Shared Edges, PHYSICAL REVIEW LETTERS 121, 256001 (2018).
37	H. Liu, J.T. Sun, C. Cheng, F. Liu, and S. Meng, Photoinduced nonequilibrium topological states in strained black phosphorus, PHYSICAL REVIEW LETTERS 120, 237403 (2018).
38	C. Lian, M.X. Guan, S.Q. Hu, and S. Meng, Photoexcitation in solids: First-principles quantum simulations by real time TDDFT, ADVANCED THEORY AND SIMULATIONS 1, 1800055 (2018).
39	J. Zhang, J. Zhang, L. Zhou, C. Cheng, C. Lian, J. Liu, S. Tretiak, J. Lischner, F. Giustino, and S. Meng, Universal scaling of intrinsic resistivity in two-dimensional metallic borophene, ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION 57, 4585 (2018).
40	J. Zhang, H. Hong, J. Zhang, H.X. Fu, P.W. You, J. Lischner, K.H. Liu, E. Kaxiras, and S. Meng, New Pathway for Hot Electron Relaxation in Two-dimensional Heterostructures, NANO LETTERS 18, 6057 (2018).
41	H. Hong, J.C. Zhang, J. Zhang, R.X. Qiao, F.R. Yao, Y. Cheng, C.C. Wu, L. Lin, K.C. Jia, Y.C. Zhao, Q. Zhao, P. Gao, J. Xiong, K.B. Shi, D.P. Yu, Z.F. Liu, S. Meng, H.L. Peng, K.H. Liu, Ultrafast Broadband Charge Collection from Clean Graphene/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ Interface, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 140, 14952 (2018).
42	Y. Tian, L.Y. Wei, Q.H. Zhang, H.B. Huang, Y.L. Zhang, H. Zhou, F.J. Ma, L. Gu, S. Meng, L.Q. Chen, C.W. Nan, J.X. Zhang, Water printing of ferroelectric polarization, NATURE COMMUNICATIONS 9, 3809 (2018).
43	H. Liu, J.T. Sun, M. Liu, and S. Meng, Screening Magnetic Two-Dimensional Atomic Crystals with Nontrivial Electronic Topology, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS 9, 6709 (2018).
44	C. Cheng, J.T. Sun, H. Liu, H.X. Fu, J. Zhang, X.R. Chen, S. Meng, Hidden spin polarization in the 1T-phase layered transition-metal dichalcogenides MX_2 , SCIENCE BULLETIN 63, 85 (2018).
45	R. Ulbricht, S. D'Onofrio, A. Gali, S. Meng, Z.H. Loh, Vibrational relaxation dynamics of the nitrogen-vacancy center in diamond, PHYSICAL REVIEW B 97, 220302(R) (2018).

序号	论文
46	J. Wang, L. Jin, H. Zhou, H.X. Fu, C.Y. Song, S. Meng, J.X. Zhang, Direct imaging of surface states hidden in the third layer of Si (111)- 7×7 surface by pzwave tip, APPLIED PHYSICS LETTERS 113, 031604 (2018).
47	Y.C. Zhao, S.M. Zeng, C. Lian, Z.H. Dai, S. Meng, J. Ni, Multigap anisotropic superconductivity in borophenes, PHYSICAL REVIEW B 98, 134514 (2018).
48	Y.C. Zhao, Z.H. Dai, C. Zhang, C. Lian, S.M. Zeng, G. Li, S. Meng, J. Ni, Intrinsic electronic transport and thermoelectric power factor in n-type doped monolayer MoS ₂ , NEW JOURNAL OF PHYSICS 20, 043009 (2018).
49	Y.C. Zhao, X. Chen, Z.H. Dai, C. Zhang, C. Lian, S.M. Zeng, S. Meng, J. Ni, Robust quantum spin Hall state and quantum anomalous Hall state in graphenelike BC ₃ with adatoms, NEW JOURNAL OF PHYSICS 20, 073047 (2018).
50	X.X. Yang, Z.H. Dai, Y.C. Zhao, J.Y. Liu, S. Meng, Low lattice thermal conductivity and excellent thermoelectric behavior in Li ₃ Sb and Li ₃ Bi, JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 30, 425401 (2018).
51	X.X. Yang, Z.H. Dai, Y.C. Zhao, S. Meng, Phonon thermal transport in monolayer FeB ₂ from first principles, COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE 147, 132 (2018).
52	J.Y. Liu, Z.H. Dai, X.X. Yang, Y.C. Zhao, S. Meng, Lattice thermodynamic behavior in nuclear fuel ThO ₂ from first principles, JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS 511, 11 (2018).
53	X.X. Yang, Z.H. Dai, Y.C. Zhao, S. Meng, Phonon thermal transport in a class of graphene allotropes from first principles, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 20, 15980 (2018).
54	Y.F. Huang and S. Meng, Macroscopic superhydrophobicity achieved by atomic decoration with silicones, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 149, 014706 (2018).
55	Y.F. Huang, J. Lu, and S. Meng, Transparency in Graphene Mediated Evaporation, 2D MATERIALS 5, 041001 (2018).
56	L. Yan, M.X. Guan, and S. Meng, Plasmon-induced nonlinear response of silver atomic chains, NANOSCALE 10, 8600 (2018).
57	C. Lian, S.Q. Hu, M.X. Guan, and S. Meng, Momentum-resolved TDDFT algorithm in atomic basis for real time tracking of electronic excitation, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 149, 154104 (2018).
58	L. Yan, J.Y. Xu, F.W. Wang, and S. Meng, Plasmon-Induced Ultrafast Hydrogen Production in Liquid Water, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS 9, 63 (2018).

序号	论文
59	Qichen Xu, Zhenzhu Li, Miao Liu, and Wan-Jian Yin, Rationalizing Perovskite Data for Machine Learning and Materials Design, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS 9, 6948 (2018).
60	Zelang Jian, Wentao Wang, Maoyu Wang, Yan Wang, Nick Au Yeung, Miao Liu, Zhenxing Feng, Al ₂ O ₃ coated LiCoO ₂ as cathode for high-capacity and long-cycling Li-ion batteries, CHINESE CHEMICAL LETTERS 29, 1768 (2018).
61	Yan Feng, Yuliang Zhang, Guixiang Du, Jingbo Zhang, Miao Liu and Xiaohui Qu, Li ₂ S-Embedded copper metal-organic framework cathode with superior electrochemical performance for Li-S batteries, NEW JOURNAL OF CHEMISTRY 42, 13775 (2018).
62	Ziliang Chen, Renbing Wu, Yang Liu, Yuan Ha, Yanhui Guo, Dalin Sun, Miao Liu, Fang Fang, Ultrafine Co Nanoparticles Encapsulated in Carbon-Nanotubes-Grafted Graphene Sheets as Advanced Electrocatalysts for the Hydrogen Evolution Reaction, ADVANCED MATERIALS 30, 1802011 (2018).
63	Ziliang Chen, Renbing Wu, Miao Liu, Yang Liu, Shuangyu Xu, Yuan Ha, Yanhui Guo, Xuebin Yu, Dalin Sun, Fang Fang, Tunable electronic coupling of cobalt sulfide/carbon composites for optimizing oxygen evolution reaction activity, JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A 6, 10304 (2018).
64	Yusheng Ye, Feng Wu, Yuting Liu, Teng Zhao, Ji Qian, Yi Xing, Wanlong Li, Jiaqi Huang, Li Li, Qianming Huang, Xuedong Bai, Renjie Chen, Toward Practical High-Energy Batteries: A Modular-Assembled Oval-Like Carbon Microstructure for Thick Sulfur Electrodes, ADVANCED MATERIALS 29, 1700598 (2017).
65	Huang QM, Li XM, Sun MH, Zhang L, Song CZ, Zhu L, Chen P, Xu Z, Wang WL, and Bai XD, The Mechanistic Insights into the 2H-1T Phase Transition of MoS ₂ upon Alkali Metal Intercalation: From A Study of Dynamic Sodiation Processes of MoS ₂ Nanosheets, ADVANCED MATERIALS INTERFACE 4, 1700171 (2017).
66	Zhang L, Zhu L, Li XM, Xu Z, Wang WL, and Bai XD, Resistive switching mechanism in the one diode-one resistor memory based on p+-Si/n-ZnO heterostructure revealed by in-situ TEM, SCIENTIFIC REPORTS 7, 451143 (2017).
67	Yang F, Wang X, Si J, Zhao XL, Qi K, Jin CH, Zhang ZY, Li MH, Zhang DQ, Yang J, Zhang ZY, Xu Z, Peng LM, Bai XD, and Li Y, Water-assisted preparation of high-purity semiconducting (14, 4) carbon nanotubes, ACS NANO 11, 186 (2017).
68	Song ZG, Li ZW, Wang H, Bai XD, Wang WL, Du HL, Liu SQ, Wang CS, Han JZ, Yang YC, Liu Z, Lv J, Fang ZY, and Yang JB, Valley pseudospin with a widely tunable bandgap in doped honeycomb BN monolayer, NANO LETTERS 17, 2019 (2017).
69	Wu F, Ye YS, Chen RJ, Zhao T, Qian J, Zhang XX, Li L, Huang QM, Bai XD, and Cui Y, Gluing carbon black and sulfur at nanoscale: a polydopamine-based "nano-binder" for double-shelled sulfur cathodes, ADVANCED ENERGY MATERIALS 7, 1601591 (2017).
70	Zhu WW, Zhang Y, Xu NS, Tan YM, Zhang YZ, Shen Y, Xu Z, Bai XD, Chen J, She JC, and Deng SZ, Epitaxial growth of multiwall carbon nanotube from stainless steel substrate and effect on electrical conduction and field emission, NANOTECHNOLOGY 28, 305704 (2017).
71	Hao TT, Shen TH, Li WX, Song CZ, Xu Z, Jin AZ, Jin L, Li JJ, Bai XD, and Gu CZ, Platinum composite nanowires for ultrasensitive mass detection, APPLIED PHYSICS LETTERS 110, 143102 (2017).

序号	论文
72	S. C. Zhang, L. X. Kang, X. Wang, L. M. Tong, L. W. Yang, Z. Q. Wang, K. Qi, S. B. Deng, Q. W. Li, X. D. Bai, F. Ding, and J. Zhang, Arrays of horizontal carbon nanotubes of controlled chirality grown using designed catalysts, NATURE 543, 234 (2017).
73	L. F. Wang, J. Yan, Z. Xu, W. L. Wang, J. G. Wen, and X. D. Bai, Rate mechanism of vanadium oxide coated tin dioxide nanowire electrode for lithium ion battery, NANO ENERGY 42, 294 (2017).
74	Yu Tongxu, Zhao Lishan, Wang Qiang, Cao Zexian, Glass transition behavior of ternary disaccharide–ethylene glycol–water solutions, CHINESE PHYSICS LETTERS 677, 172 (2017).
75	Lingyun Zhang and Jeremy D. Schmit, Theory of amyloid fibril nucleation from folded proteins, ISRAEL JOURNAL OF CHEMISTRY 57, 738 (2017).
76	吴穹, 田义超, 吴艳玲, 赵继民, 高温超导体的超快光谱学, 《科学通报》, 第 62 卷, 第 1 期, 1–15 (2017).
77	Lili Hu, Xinyan Shan, Yanling Wu, Jimin Zhao, and Xinghua Lu, Laser Thinning and Patterning of MoS ₂ with Layer-by-Layer Precision, SCIENTIFIC REPORTS 7, 15538 (2017).
78	Yujin Wang, Hailong Chen, Mengtao Sun, Zehan Yao, Baogang Quan, Zhe Liu, Yuxiang Weng, Jimin Zhao, Changzhi Gu, Junjie Li, Ultrafast carrier transfer evidencing graphene electromagnetically enhanced ultrasensitive SERS in graphene/Ag–nanoparticles hybrid, CARBON 122, 98 (2017).
79	Fei Sun, Q. Wu, Y. L. Wu, H. Zhao, C. J. Yi, Y. C. Yian, H. W. Liu, Y. G. Shi, H. Ding, X. Dai, P. Richard, and Jimin Zhao, Coherent helix vacancy phonon and its ultrafast dynamics waning in topological Dirac semimetal Cd ₃ As ₂ , PHYSICAL REVIEW B 95, 235108 (2017).
80	Xun Jia, Shuyuan Zhang, Raman Sankar, Fang–Cheng Chou, Weihua Wang, K. Kempa, E. W. Plummer, Jiandi Zhang, Xuetao Zhu, Jiandong Guo, Anomalous Acoustic Plasmon Mode from Topologically Protected States, PHYSICAL REVIEW LETTERS 119, 136805 (2017).
81	Bing Liu, Huixia Fu, Jiaqi Guan, Bin Shao, Sheng Meng, Jiandong Guo, and Weihua Wang, An Iron–Porphyrin Complex with Large Easy–Axis Magnetic Anisotropy on Metal Substrate, ACS NANO 11(11), 11402–11408 (2017).
82	Lin Li, Zhaoliang Liao, Zhenyu Diao, Rongying Jin, E. W. Plummer, Jiandong Guo, and Jiandi Zhang, Reentrance of low–temperature nonmetallic phase of La _{2/3} Sr _{1/3} MnO ₃ (110) thin films, PHYSICAL REVIEW MATERIALS 1, 034405 (2017).
83	Fengmiao Li, Fang Yang, Yan Liang, Shan–ming Li, Zhenzhong Yang, Q. H. Zhang, Wentao Li, Xuetao Zhu, Lin Gu, Jiandi Zhang, E. W. Plummer, and Jiandong Guo, –Doping of Oxygen Vacancies Dictated by Thermodynamics in Epitaxial SrTiO ₃ Films, AIP ADVANCES 7, 065001 (2017).
84	Xiaochun Huang, Jiaqi Guan, Bing Liu, Shuya Xing, Weihua Wang, and Jiandong Guo, Epitaxial Growth and Band Structure of Te Film on Graphene, NANO LETTERS 17(8), 4619 (2017).

序号	论文
85	Xuetao Zhu, Jiandong Guo, Jiandi Zhang, and E. W. Plummer, Misconceptions associated with the Origin of Charge Density Waves, ADVANCES IN PHYSICS: X 2 (3), 622 (2017).
86	Jiaqi Guan, Jian Liu, Bing Liu, Xiaochun Huang, Qing Zhu, Xuetao Zhu, Jiatao Sun, Sheng Meng, Weihua Wang, and Jiandong Guo, Superconducting transition of FeSe/SrTiO ₃ induced by adsorption of semiconducting organic molecules, PHYSICAL REVIEW B 95, 205405 (2017).
87	Qingyu Lei, Maryam Golalikhani, Bruce A. Davidson, Guozhen Liu, Darrell G. Schlom, Qiao Qiao, Yimei Zhu, Ravini U. Chandrasena, Weibing Yang, Alexander X. Gray, Elke Arenholz, Andrew K. Farrar, Dmitri A. Tenne, Minhui Hu, Jiandong Guo, Rakesh K. Singh and Xiaoxing Xi, Constructing oxide interfaces and heterostructures by atomic layer-by-layer laser molecular beam epitaxy, NPJ QUANTUM MATERIALS 2, 10 (2017).
88	Baojie Feng, Botao Fu, Shusuke Kasamatsu, Suguru Ito, Peng Cheng, Cheng-Cheng Liu, Ya Feng, Shilong Wu, Sanjoy K. Mahatha, Polina Sheverdyeva, Paolo Moras, Masashi Arita, Osamu Sugino, Tai-Chang Chiang, Kenya Shimada, Koji Miyamoto, Taichi Okuda, Kehui Wu, Lan Chen, Yugui Yao & Iwao Matsuda, Experimental realization of two-dimensional Dirac nodal line fermions in monolayer Cu ₂ Si, NATURE COMMUNICATIONS 8, 1007 (2017).
89	Shaoxiang Sheng, Jiangbin Wu, Xin Cong, Wenbin Li, Jian Gou, Qing Zhong, Peng Cheng, Pingheng Tan, Lan Chen and Kehui Wu, Vibrational properties of a monolayer silicene sheet studied by tip-enhanced Raman spectroscopy, PHYSICAL REVIEW LETTERS 119, 196803 (2017).
90	Baojie Feng, Osamu Sugino, Ro-Ya Liu, Jin Zhang, Ryu Yukawa, Mitsuaki Kawamura, Takushi Iimori, Howon Kim, Yukio Hasegawa, Hui Li, Lan Chen, Kehui Wu, Hiroshi, Kumigashira, Fumio Komori, Tai-Chang Chiang, Sheng Meng, and Iwao Matsuda, Dirac fermions in borophene, PHYSICAL REVIEW LETTERS 118, 096401 (2017).
91	Jian Gou, Longjuan Kong, Hui Li, Qing Zhong, Wenbin Li, Peng Cheng, Lan Chen and Kehui Wu, Strain-induced Band engineering in Monolayer Stanene on Sb(111), PHYSICAL REVIEW MATERIALS 1, 054004 (2017).
92	Qing Zhong, Longjuan Kong, Jian Gou, Wenbin Li, Shaoxiang Sheng, Shuo Yang, Peng Cheng, Hui Li, Kehui Wu and Lan Chen, Synthesis of borophene nanoribbons on Ag(110) surface, PHYSICAL REVIEW MATERIALS 1, 021001(R) (2017).
93	Qing Zhong, Jin Zhang, Peng Cheng, Baojie Feng, Wenbin Li, Shaoxiang Sheng, Hui Li, Sheng Meng, Lan Chen and Kehui Wu, Metastable phases of 2D boron sheets on Ag(111), JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 29, 095002 (2017).
94	Jin Zhang, Hao Hong, Chao Lian, Wei Ma, Xiaozhi Xu, Xu Zhou, Huixia Fu, Kaihui Liu, Sheng Meng, Interlayer-State-Coupling Dependent Ultrafast Charge Transfer in MoS ₂ /WS ₂ Bilayers, ADVANCED SCIENCE 4, 1700086 (2017).
95	Cai Cheng, Jiatao Sun, Hang Liu, Hui-Xia Fu, Jin Zhang, Xiangrong Chen and Sheng Meng, Suppressed superconductivity in substrate-supported β 12 borophene by tensile strain and electron doping, 2D MATERIALS 4, 025032 (2017).

序号	论文
96	Jing Liang, Jin Zhang, Zhenzhu Li, Hao Hong, Jinhuan Wang, Zhihong Zhang, Xu Zhou, Ruixi Qiao, Jiyu Xu, Peng Gao, Zhirong Liu, Zhongfan Liu, Zhipei Sun, Sheng Meng, Kaihui Liu, and Dapeng Yu, Monitoring Local Strain Vector in Atomic-layered MoSe ₂ by Second-Harmonic Generation, NANO LETTERS 17, 7539 (2017).
97	Cai Cheng, Jiatao Sun, Min Liu, Xiangrong Chen, and Sheng Meng, Tunable electron-phonon coupling superconductivity in platinum diselenide, PHYSICAL REVIEW MATERIALS 1, 074804 (2017).
98	Zijing Ding, Lei Yan, Zi Li, Wei Ma, Gang Lu, and Sheng Meng, Controlling catalytic activity of gold cluster on MgO thin film for water splitting, PHYSICAL REVIEW MATERIALS 1, 045404 (2017).
99	Fei Gao, Shiwu Gao, and Sheng Meng, Screening single-atom catalysts for methane activation: α -Al ₂ O ₃ (0001)-supported Ni, PHYSICAL REVIEW MATERIALS 1, 035801 (2017).
100	Yinchang Zhao, Zhenhong Dai, Chao Lian, Shuming Zeng, Geng Li, Jun Ni and Sheng Meng, Low lattice thermal conductivity and good thermoelectric performance of cinnabar, PHYSICAL REVIEW MATERIALS 1, 065401 (2017).
101	Chuancheng Jia, Wei Ma, Jianxin Guan, Chunhui Gu, Xinxi Li, Linan Meng, Yao Gong, Sheng Meng, and Xuefeng Guo, High-Efficiency Photovoltaic Conversion at Selective Electron Tunneling Heterointerfaces, ADVANCED ELECTRONIC MATERIALS 3, 1700211 (2017).
102	Ziheng Ji, Hao Hong, Jin Zhang, Qi Zhang, Wei Huang, Ting Cao, Ruixi Qiao, Can Liu, Jing Liang, Chuanhong Jin, Liying Jiao, Kebin Shi, Sheng Meng, and Kaihui Liu, Robust Ultrafast Charge Transfer in MoS ₂ /WS ₂ Bilayers, ACS NANO 11, 12020 (2017).
103	Yinghui Yu, Huixia Fu, Limin She, Shuangzan Lu, Qinmin Guo, Hui Li, Sheng Meng, and Gengyu Cao, Two-dimensional ferromagnetic superstructures: Fe on Sb(111), ACS NANO 11, 2143 (2017).
104	Renwei Liu, Suna Fan, Dongdong Xiao, Jin Zhang, Mengzhou Liao, Shansheng Yu, Fanling Meng, Baoli Liu, Lin Gu, Sheng Meng, Guangyu Zhang, Weitao Zheng, Shuxin Hu, and Ming Li, Free-Standing Single-Molecule Thick Crystals Consisting of Linear Long-Chain Polymers, NANO LETTERS 17, 1655 (2017).
105	Franco P. Bonafé, Bólint Aradi, Mengxue Guan, Oscar A. Douglas-Gallardo, Chao Lian, Sheng Meng, Thomas Frauenheim and Cristián G. Sánchez, Plasmon-driven sub-picosecond breathing of metal nanoparticles, NANOSCALE 9, 12391 (2017).
106	Jing Xu, Zheshuai Lin, Sheng Meng, Jiantao Wang, Lifang Xu and Enge Wang, Self-assembly of glycine on Cu(001): the effect of temperature and polarity, RSC ADVANCES 7, 4116 (2017).
107	Chongqin Zhu, Yurui Gao, Yingying Huang, Hui Li, Sheng Meng, Joseph S. Francisco and Xiao Cheng Zeng, Controlling states of water droplets on nanostructured surfaces by design, NANOSCALE 9, 18240 (2017).
108	Peng Zhao, Yongfeng Huang, Yutian Shen, Shuo Yang, Lan Chen, Kehui Wu, Hui Li and Sheng Meng, A modified Wenzel model for water wetting on van der Waals layered materials with topographic surfaces, NANOSCALE 9, 3843 (2017).

序号	论文
109	Lei Yan, Sheng Meng, Atomistic insights into plasmon induced water splitting, SCIENCE CHINA-PHYSICS MECHANICS & ASTRONOMY 60, 027032 (2017).
110	Yinchang Zhao, Zhenhong Dai, Chao Zhang, Chao Lian, Shuming Zeng, Geng Li, Sheng Meng, and Jun Ni, High thermopower and potential thermoelectric properties of crystalline LiH and NaH, PHYSICAL REVIEW B 95, 014307 (2017).
111	Lanying Wei, Wei Ma, Chao Lian, and Sheng Meng, Benign Interfacial Iodine Vacancies in Perovskite Solar Cells, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 121, 5905 (2017).
112	Jian Liu, Wenjie Hou, Cai Cheng, Hui-Xia Fu, Jia-Tao Sun and Sheng Meng, Intrinsic valley polarization of magnetic VSe ₂ monolayers, JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 29, 255501 (2017).
113	Lanying Wei, Chao Lian, and Sheng Meng, Prediction of two-dimensional electron gas mediated magnetoelectric coupling at ferroelectric PbTiO ₃ /SrTiO ₃ heterostructures, PHYSICAL REVIEW B 95, 184102 (2017).
114	Chao Lian and Sheng Meng, Dirac cone pairs in silicene induced by interface Si-Ag hybridization: A first-principles effective band study, PHYSICAL REVIEW B 95, 245409 (2017).

专利情况

受理号	专利名称	发明人
2017103723858	单一堆叠结构的 1D1R 存储器及其制备方法	张磊 白雪冬 许智
201710372367X	一种基于肖特基结调制的忆阻器及其制备方法	张磊 白雪冬 许智
2017103723665	具有结构调节层的阻变式存储器及其制备方法	张磊 白雪冬 许智
2018101989090	一种 Cu-Li 非晶合金及其制备方法和应用	孙慕华 王文龙 许智 白雪冬
2018115999327	磷等电子掺杂的六方氮化硼及其制备方法	赵昱 王浩 王文龙 白雪冬
201710073875.8	射频信号放大器及应用	姚一锟 郝东 李健梅 单欣岩 陆兴华
2018110884651	种制备绝缘基座的模具、方法及基座在分子探测中的应用	赵新佳 单欣岩 陆兴华

10 相关报道

研究简报一：

范德华异质结间的强耦合超快电荷传输

近年来，以石墨烯为代表、靠层间范德华力结合的二维材料已经成长为一个非常大的家族。这些范德华材料呈现出从绝缘体、半导体、金属，到超导体等各不相同的电子性质。以二硫化钼 (MoS_2) 和二硫化钨 (WS_2) 为代表的过渡族金属硫族化合物，因其合适的能带结构和光学性质，在光电子器件等用途中有着很好的应用前景。

二维材料异质结是由不同的二维材料通过范德华力结合在一起的，两层之间的堆叠模式比较容易调控，进而可以得到多样的电子性质。二维材料异质结中光激发产生电子-空穴对在界面处发生空间分离的过程（简称分离过程）在很多光电效应和光伏应用中起着重要的作用。 MoS_2 和 WS_2 组成的异质结是第II类异质结： MoS_2 的价带顶（VBM）比 WS_2 能量低，同时 WS_2 的导带顶（CBM）要比 MoS_2 高。由于 MoS_2 的带隙要比 WS_2 的小，实验上可以选择性的光激发 MoS_2 中的电子-空穴对。由于能量差的原因， MoS_2 中激发的空穴会传导到 WS_2 层中，从而实现电子-空穴的分离。超快激光实验（F. Wang et al. Nat. Nanotechnol. 2014, 9, 682）发现，这个分离过程能在50fs超快时间尺度发生。人们一般认为，界面处电子-空穴分离过程是取决于异质结的层间堆叠方式和层间相互作用，但是，层间堆叠模式与电子-空穴分离过程的定量关系却一直没有解决。

中国科学院物理研究所 / 北京凝聚态物理国家实验室（筹）SF10组博士研究生张进、博士后廉超在孟胜研究员的指导下与北京大学物理学院刘开辉教授、洪浩等合作，运用基于含时密度泛函的第一性原理量子动力学模拟详细研究了 MoS_2/WS_2 二维异质结中光激发的电子-空穴对层间分离过程与其层间堆叠模式的关系。他们发现对于实验上最稳定的堆叠方式（AB1-2H），光激发电子-空穴能在150 fs左右完成空间分离；而对于另外几种具有相似能量稳定性的堆叠方式（AB2-2H和AA1-3R），这个过程会在1000fs以上才会完成。进一步地，他们发现分离过程与 MoS_2/WS_2 两层之间的层间距和整体层间耦合强度没有直接关系，而是

取决于两层之间的空穴态在垂直方向上的耦合矩阵元 (M) 的大小。电子 - 空穴分离速度 (分离时间的倒数) 与跃迁矩阵元的 e 指数呈正比, 表明该体系是超出微扰近似的强耦合体系, 可以以此对超快电荷分离过程进行极其敏感的调控。该过程决定了未来光电器件的时间响应极限。这为二维材料异质结中的超快光电子器件和高效率光伏应用提供了新的理解和发展基础。相关结果发表在 *Advanced Science*, 2017, DOI:10.1002/adv.201700086.

本项研究工作得到国家自然科学基金项目 (项目批准号 11222431, 11474006 和 51522201)、科技部 (项目批准号 2016YFA0300903, 2012CB921403, and 2015CB921001) 的资助。

相关链接: http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201705/t20170515_4788099.html

研究简报二:

受拓扑保护的等离激元研究取得进展

在凝聚态物理当中, 等离激元是最重要的元激发之一。1951 年 David Pines 和 David Bohm 预测提出等离激元的概念, 用于描述在固体当中由于库伦相互作用产生的电荷密度集体振荡的元激发。而后 1957 年, Rufus Ritchie 又将等离激元的概念延伸到表面和界面上, 提出了表面等离激元的存在。自此之后, 科学家对于等离激元性质的研究持续了 60 年之久并仍在发展壮大, 由此逐渐衍生出等离子体光子学这一前沿领域及其它诸多交叉应用领域。对于任何可能的应用, 最为重要的问题就是等离激元的寿命。在普通材料体系中, 等离激元通常只能存在于很小的动量范围, 因为当它的色散进入电荷空穴连续区时, 就会与转化为单粒子激发从而导致其寿命的急剧衰减。

此外，一般材料中，杂质散射也是必然的另一种衰减通道。这种急剧衰减的现象几乎对于所有等离激元都是适用的，无论它是来自普通金属中具有抛物线型色散的有质量电子，还是来自于石墨烯等材料中具有线性色散的无质量狄拉克电子。对于拓扑非平庸的狄拉克电子形成的等离激元又会是怎样的呢？一个典型的例子是在三维拓扑绝缘体的表面态上，由于动量和自旋的锁定使得表面态电子免受任何非磁性杂质的背散射从而拥有更长的寿命，那么它所形成的集体模式也会具有很长的寿命吗？在拓扑绝缘体中关于等离激元的理论和实验工作如火如荼地开展，但尚无关于其长寿命方面的实验观测报导。

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 SF06 组的郭建东研究员、朱学涛副研究员和博士生曹彦伟（已毕业）等人，在 2015 年成功研制了世界首台具有能量 - 动量二维解析能力的高分辨电子能量损失谱仪（2D-HREELS）[Rev. Sci. Instrum. 86, 083902 (2015)]。该系统将一个带有特殊设计电磁透镜组的电子束单色器与商业化的二维半球形分析器结合，可以同时探测到散射电子能量和动量的信息。该谱仪可以对表面元激发进行高分辨、高效率的测量，能够给出电子、晶格、及其集体激发的综合信息，是研究低维材料体系多体作用的强大工具。

近期，物理所表面物理国家重点实验室 SF06 组博士生贾逊、张书源在朱学涛副研究员、郭建东研究员的指导下，与美国路易斯安纳州立大学的张坚地教授、E. W. Plummer 教授，波士顿学院的 K. Kempa 教授，台湾大学的周方正教授、R. Sanker 研究员等合作，利用上述 2D-HREELS 系统，在实验上观测到了三维拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 表面态产生的一支反常的声学支等离激元模式。他们观测并分析出这支等离激元模式的诸多特征：

1. 这支模式的色散关系在一个很大的动量范围（至少到第二布里渊区中心）呈现出几乎线性的行为，并且色散关系不依赖于晶格的周期性。通过对磁性原子 Mn 掺杂的 Bi_2Se_3 的对比实验，发现这支模式与狄拉克锥有同生同灭的特性。于是在实验上确认这支模式是来自狄拉克电子的声学支等离激元。

2. 他们发现这支模式无论是在电荷空穴连续区内或外都呈现出弱衰减的特性，而这一特性从未在其它任何体系中出现。于是推测这一特性与拓扑态的保护有关，进而说明拓扑保护不仅仅可以出现在单电子层面，对于集体模式也是适用的。

3. 这支模式的能量色散比以往任何理论预测的都要低，并且与表面声子的能量类似，预示着这支等离激元和表面声子之间有着很强的相互作用。

这一研究成果以“Anomalous Acoustic Plasmon Mode from Topologically Protected States”为题发表在近期的 Physical Review Letters 上 [Phys. Rev. Lett. 119, 136805 (2017)]。相关工作得到国家重点研发计划（2016YFA0302400, 2016YFA0300600）、国家自然科学基金（11304367, 11634016, 11474334）、中国科学院青年创新促进会以及中国科学院先导专项（B）（XDB07000000）等计划的资助。

相关链接：http://iop.cas.cn/xwzx/kydt/201711/t20171110_4890427.html

研究简报三：

水分解的“链式反应”——量子动力学研究揭示光解水产氢新机制

光激发分解水产生氢气是人类梦寐以求，能够持续获取清洁能源，最终解决能源问题的途径之一。然而，自上世纪七十年代第一次在实验上展示以来，虽然有大量的实验和理论研究，人们对原子层次上的光解水过程及其机理并不清楚。这也阻碍着光解水新材料的发现和光解水效率的进一步提高。

近年来，人们认识到金属颗粒中电子集体激发模式，即局域表面等离子体，具有强大、可调的光吸收和散射性质，可以把光场的能量聚焦到纳米尺度的空间上，从而带来巨大的电磁场增强。由于这些独特的性质，局域表面等离子体可以有效地利用太阳能驱动光解水等反应，显著提高能源转化效率。光可以直接激发贵金属纳米颗粒的局域表面等离子体，等离子体衰减时可以激发出热电子，从而驱动物质的化学合成或分解。不过，等离子体诱导的电荷转移和电场增强，哪个因素决定它具有很高的催化活性，以及水分解的动力学过程都不清楚。

最近，中国科学院物理研究所 / 北京凝聚态物理国家研究中心孟胜研究组的博士生严蕾（现东京大学博士后）、徐纪玉在孟胜研究员和王芳卫研究员指导下，利用自主发展的含时密度泛函理论方法对该量子系统进行了实时模拟。在先前发现光解水量子模式选择性 (ACS Nano 10, 5452 (2016)) 的基础之上，得到金纳米团簇在飞秒脉冲激光作用下分解水产氢的原子尺度微观机制与超快量子动力学过程。他们发现，金纳米团簇在液态水环境下，通过快速的质子转移，实现了百飞秒尺度内的水分解。进一步，他们证明与通常设想不同，电荷从金属到水分子的转移导致反应发生的机制只起次要作用，而金团簇等离子体诱导的电场增强才是水光分解的主要原因。更令人惊奇的是，他们观察到由来自不同水分子的氢原子相互碰撞产生氢分子放出的原子过程。理论预言氢气产生的量子效率为 0.06%，与实验结果（0.05%）基本相符，表明该过程可能具有真实性。与通常光催化反应的图像不同，他们发现光解水过程是一个光激发 → 等离子体衰变 → 光电子产生 → 光电子碰撞分解第一个水分子 → 分解的氢原子碰撞近邻水分子 → 与碰撞出的氢原子结合形成氢分子 → 氢分子放出等历经多个步骤、类似于核裂变的“链式反应”过程。这是首次完全从量子力学的角度给出光解水产氢的原子尺度过程细节；光解水的“链式反应”机理也是首次提出。这些结果为等离子体诱导水分解产氢过程提供了完整的微观图像，为进一步提高光催化效率提供了新的视角。相关结果发表在 J. Phys. Chem. Lett. 9, 63 (2018) 上。

本项研究工作得到国家重点研发计划（2016YFA0300902）、国家自然科学基金项目（项目批准号 11774396, 11474328, 和 11290164）和科学院先导 B 项目（XDB07000000）的资助。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201801/t20180104_4928331.html

研究简报四：

二维硼烯本征电阻的统一标度率

近年来，新型二维材料硼烯（borophene）在实验中成功合成（Nat. Chem. 2016, 8 (6), 563–568; Science 2015, 350, 1513）。硼烯，即单原子硼层，有着非常丰富的结构。根据硼原子的配位数不同，可以把硼烯分成 α 相， β 相和 χ 相等等。不同于石墨烯，硼烯有着比较特别的电子和输运性质，比如超导（理论预言临界温度约为 20 K）和狄拉克费米子。作为唯一的单元素二维金属材料，硼烯给研究二维金属中的输运性质提供了很好的平台。

最近，中国科学院物理研究所 / 北京凝聚态物理国家研究中心 SF10 组博士研究生张进在孟胜研究员的指导下与英国牛津大学 Feliciano Giustino 教授，帝国理工大学 Johannes Lischner 博士，美国洛斯阿拉莫斯国家实验室 Sergei Tretiak 教授、周柳江博士等合作，运用基于第一性原理的电声耦合计算方法系统地研究了硼烯三种相的本征电子输运性质。在室温下， β 12 相硼烯的电阻率大约为 $3.52 \mu\Omega \cdot \text{cm}$ ，这跟已知的最好导体——石墨烯的室温电阻（ $1.0 \mu\Omega \cdot \text{cm}$ ）在一个数量级上。

更重要的是，他们发现硼烯的电阻呈现出奇特的统一标度律。在低温下（ $<100 \text{ K}$ ），硼烯本征电阻与温度四次方成正比；而高温时（ $>100 \text{ K}$ ），硼烯的本征电阻与温度成正比。不同结构、不同电子浓度的硼烯转变温度均在 100K 左右，相比之下石墨烯的转变温度在 100 K–900 K 之间变化。这些行为来自于硼烯奇特的费米面，即大区域电子口袋、小区域电子口袋和空穴口袋共存，可以用 Bloch–Grüneisen 模型来描述。此外，他们还发现硼烯的电阻很容易受到外加载流子的调控。外加空穴可以增高电阻达四倍以上。这些发现对二维硼层在未来新型电子学中的应用有着很重要的参考价值。相关研究成果发表在 Angew. Chem. Int’l. Ed. 上（Zhang et al. Angew. Chem. Int’l. Ed. 2018, DOI: 10.1002/anie.201800087）。

本项研究工作得到国家自然科学基金项目（项目批准号 11774396, 11474328 和 11290164）、科技部（项目批准号 2016YFA0300902 和 2015CB921001）、中国科学院（XDB07000000）和北京市科委（D161100002416003）的资助。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201803/t20180329_4987715.html

研究简报五：

黑磷中的非平衡拓扑态

近年来，由于奇特的电子和光电特性，范德瓦尔斯层状量子材料受到人们极大的关注，黑磷是其中的典型代表。它具有依赖层数的能隙，且易于用电场调控，被认为是未来光电器件的重点候选材料。

在通常条件下黑磷是窄带隙半导体，然而在光照等非平衡条件下，黑磷性质可能发生巨大改变，但人们并不知晓。为了研究光照等非平衡条件下量子材料的非平衡电子结构，需要发展非平衡条件下的第一性原理计算方法。

最近，中国科学院物理研究所 / 北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室 SF10 组博士生刘行在孟胜研究员、孙家涛副研究员指导下，与美国犹他大学刘锋教授合作，发展了把 Floquet 定理分析和第一性原理动力学计算相结合的新方法，在国际上首次实现了层状黑磷在周期性光场驱动下的非平衡态电子结构的研究。

刘行等发现在圆偏振光场驱动下，黑磷的电子态受光场调制而发生改变，其结果依赖于光场的入射方向、强度、手性等参数。在拉伸黑磷中，他们预言了光子修饰的 Floquet 拓扑绝缘体态、Floquet 狄拉克半金属态等非平衡电子态。更重要的是，周期性光场不仅可以产生第一类和第二类的狄拉克锥，并且可以实现二者之间的拓扑相变，从而实现第三类的狄拉克锥，即第一类和第二类狄拉克锥之间的过渡状态。

光场驱动的电子结构变化源于光学斯塔克效应。他们进一步发现，表面态的输运方向与圆偏光的手性相互锁定，从而实现光学手段对非平衡拓扑输运的调控。这个工作将黑磷性质研究推广到了非平衡态，对于深入理解量子材料的非平衡态电子结构，以及开拓新颖光电子器件具有重要意义。同时，发展的新理论方法可用于研究其它量子材料的非平衡电子态，将大大拓宽新型拓扑电子态研究。

论文发表在《物理评论快报》(Phys. Rev. Lett. 120, 237403)。该研究受到科技部 (2016YFA0202300, 2016YFA0300902, 2015CB921001, 2013CBA01600)，中国科学院先导项目 (XDB07030100) 和美国能源局 (DE-FG02-04ER46148) 的资助。第一性原理研究所需的大规模并行计算在天津国家超算中心天河 1 号平台上完成。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201806/t20180625_5030877.html

研究简报六：

超薄碲薄膜的制备及其面内 p-n 结构筑

碲，英文名 tellurium，源自拉丁文 tellus（意为地球），是自然界中能稳定存在的最重的硫族元素。碲在单质和化合物中具有较强的自旋轨道耦合效应，其化合物是许多新奇物理现象的载体。近期，有关碲结构和性质的理论与实验研究正在引起研究人员的关注。

最近，中国科学院物理研究所 / 北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室 SF06 组博士生黄筱淳同学在王炜华副研究员和郭建东研究员的指导下，利用分子束外延技术，在 SiC(0001) 衬底外延石墨烯表面成功制备了单层和少量层碲薄膜，并利用低温扫描隧道显微镜和扫描隧道谱仪对碲薄膜进行了原位表征。实验发现制备出的碲薄膜由螺旋碲原子链平行排列而成，对应于体相晶体的 b_0-c_0 面。同时，随碲薄膜厚度增加，碲薄膜的带隙从单层中的 0.92 eV 单调减小至体相的 0.33 eV。相关工作于 2017 年 6 月 28 日发表在《纳米快报》【Nano Lett. 17, 4619 (2017)】。

郭建东、王炜华课题组进一步发现，随 SiC 衬底上外延石墨烯的层数增加，衬底对单层碲薄膜的电子掺杂逐渐减弱：在单层和双层石墨烯上的单层碲薄膜表现为 n 型半导体，而在三层石墨烯上的单层碲薄膜则表现为 p 型半导体。在此基础上，通过生长晶格连续跨过单层 / 三层石墨烯衬底台阶边缘的单层碲薄膜，他们成功获得了面内 p-n 结。对应的结区宽度为 6.2 nm，内建电场为 $4 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ 。相关工作以通讯形式于 2018 年 6 月 12 日发表在《先进材料》杂志上【Adv. Mater. 30, 1802065 (2018)】。

以上工作得到科技部（2016YFA0300600, 2016YFA0202300, 2017YFA0303600），国家自然科学基金委（11634016, 11474334）和中国科学院先导项目（XDB07030100）的资助。王炜华感谢中国科学院的资助，朱学涛感谢中国科学院青促会的支持。

相关链接：http://iop.cas.cn/xwzx/kydt/201807/t20180711_5041176.html

研究简报七：

石墨烯诱导蒸发的透明性

水滴在固体表面的蒸发是广泛存在的现象。由于能够带走热量以使固体表面维持适当的温度，蒸发在生命活动和工业生产中都扮演十分重要的角色。然而，如何有效地调控蒸发却是具有很大挑战性的课题。

近期，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室黄永峰博士、陆俊博士（磁学国家重点实验室）和孟胜研究员在前人工作的基础上通过研究水分子与石墨烯覆盖衬底的相互作用发现：仅一个原子层的单层石墨烯就能有效地改变水滴的蒸发速率，而且最大的改变量可以达到近 20%。他们发现其中的根本原因在于石墨烯改变了水滴在衬底上的接触角，从而改变与衬底接触的三相线的长度。比如，在亲水衬底上，石墨烯增大了水滴的接触角因而减小了三相线的长度，蒸发速率被抑制；而在疏水衬底上，石墨烯减小了接触角从而增加了三相线的长度，水滴的蒸发速率被加快。

然而，令人惊讶的是，不论是否存在石墨烯，单位三相线上的平均蒸发速率几乎不会发生变化（变化率小于 5%），因此石墨烯对蒸发过程来说是“透明的”。平均蒸发速率基本保持不变，是由于三相线处蒸发速率最大（相较于水滴表面）。他们通过实验研究和分子动力学模拟发现：蒸发前，水分子受到固体表面的吸引，由三相线处沿着衬底向四周进行扩散，然后才以单水分子的形式脱离固体表面完成蒸发过程，而不是从水滴表面直接蒸发。石墨烯由于其单原子层厚度，对单水分子吸附能改变不大，因而表现出水蒸发过程的透明性。在垂直于衬底方向上，水分子的数目呈指数减少，对应于蒸发速率由三相线处向水滴表面呈现指数衰减。

该工作（发表于：2D Materials 5, 041001 (2018)）利用原子尺度的相互作用实现了对宏观蒸发行为的有效调控，同时在分子层次上揭示了三相线处的蒸发起决定作用的物理图像，对于调控不同条件下的蒸发行为具有重要意义。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201809/t20180914_5078508.html

研究简报八：

第一性原理计算筛选本征二维磁性材料

在二维层状材料中实现磁性是研究人员的重要目标，因为二维磁性材料既是构造自旋电子学器件的基础，又是研究新奇物理现象的平台。通常，人们通过掺杂磁性原子或利用界面近邻效应在非磁性材料中引入磁性，但是这些非本征的磁性易受到载流子浓度、杂质类型、界面原子结构等因素的影响。因此，人们希望实现具有本征磁性的二维层状材料。先前人们根据 Mermin-Wagner 定理，各向同性的单原子层二维材料由于长程热涨落并不能表现出宏观磁性，本征二维磁性材料被认为不能存在。最近的实验工作发现，范德瓦尔斯结合的层状材料 CrI_3 和 $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ 具有低维长程磁序 [Nature 546, 270 (2017), Nature 546, 265 (2017)]，这些工作开创了本征二维磁性材料研究的新时代。目前已知的二维本征磁性材料很少，其较低的居里温度 ($<50\text{ K}$) 很难满足电子学器件的实用要求。比如量子反常霍尔效应只在极低温下的复杂磁性体系中实现，将这类拓扑态应用到实际体系的途径之一就是寻找新型二维磁性材料。而且，新材料体系的发现将可能揭示出新的拓扑电子态。

近年来，基于第一性原理的高通量筛选方法逐渐成为发现新材料的途径，为寻找本征二维磁性材料及研究新奇电子性质提供了新手段。最近，中国科学院物理研究所 / 北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室 SF10 组博士研究生刘行在孙家涛副研究员和孟胜研究员的指导下，搭建了高通量筛选二维磁性材料的第一性原理计算流程及相关数据库，从材料数据库中发现了数十种新型层状磁性材料。一些具有高居里温度的铁磁材料还呈现出新颖拓扑电子态。

他们把基于 Materials Project 数据库得到的 627 种二维材料作为筛选起点，首先对其磁性进行了研究，发现 33 种反铁磁二维材料和 56 种铁磁二维材料。重要的是，24 种铁磁材料的居里温度均高于实验证实的铁磁体 CrI_3 。对这些材料的拓扑性质进行计算后发现：(1) 单层 VCl_3 和 RuCl_3 呈现出本征的量子反常霍尔态，同时具有时间反演对称性破缺导致的 K 和 K' 能谷极化，此共存态被称为“谷极化的量子反常霍尔态”；(2) 单层 ScCl_3 具有一种新型费米子，被称为“第二类外尔节点环费米子”。这既为实现高温低维磁体及构造自旋电子学器件奠定了材料基础，也为研究新拓扑物态提供了平台。本项研究作者还包括刘淼副研究员，主要结果于 2018 年 11 月 7 日发表在 Journal of Physical Chemistry Letters 上 [H. Liu et al, J. Phys. Chem. Lett. 9, 6709 (2018)]。

该研究工作得到科技部 (项目批准号 2016YFA0202300, 2016YFA0300902, 2015CB921001, 和 2013CBA01600)、国家自然科学基金委 (项目批准号 11774396 和 61306114) 和中国科学院 (项目批准号 XDB30000000 和 XDB07030100) 的资助。

相关链接: http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201812/t20181213_5211351.html

研究简报九：

表面上的新二维冰相

理解固体表面上的水结构对于防腐、润滑、浸润和异质催化等研究有极其重要的意义。通常在金属表面上，由于衬底的强吸附作用和水分子间氢键作用的竞争与平衡，水分子形成六角排列的“双层冰”结构，即最常见的冰相 Ice-Ih。在活性更强的表面上，水分子甚至发生分解。然而，在吸附作用较弱的疏水表面（比如石墨），水分子有什么样的特殊结构和动力学行为，人们却不清楚。

最近，中国科学院物理研究所 / 北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室 SF10 组的博士生徐纪玉在孟胜研究员的指导下，与西南大学物理科学与技术学院王俊忠教授指导的研究团队，以及物理所吴克辉研究员、清华大学薛其坤教授合作，发现疏水的石墨表面上可形成一种由水分子六元环自组装而成的新的二维冰相，并且从理论上证实了这种单层冰的稳定性。相关成果近日发表在物理评论快报《Physical Review Letters》上。

水分子吸附在石墨衬底上，会形成稳定的六元环，并且通过环间氢键构成一个六元环的自组装结构。理论模拟的扫描隧道显微图像和实验观测非常一致。第一性原理计算表明，自组装单层冰是一种在高吸附密度下稳定的单层冰结构。进一步的分析发现，随着自组装结构吸附密度的增加，六元环内的结合能基本不变，而六元环之间的结合能逐渐增加，这确认了六元环的自组装行为。一个模拟时间达 20ps 的第一性原理分子动力学计算表明该自组装单层冰具有良好的动力学稳定性。同时，势能面平坦的石墨表面对单层冰的绑定能力很弱，导致单层冰可以在衬底上发生整体平移和扭转，并且可以形成各式各样的摩尔条纹结构。模拟很好地再现了这类摩尔条纹结构。

这种新发现的自组装二维冰结构和高压下的稳定冰相 Ice-II 具有很大的相似性。Ice-II 具有两个不等价的六元环作为其基本组成单元，分别是平面型水环和椅型水环。而这里的自组装冰完全由平面型水环组成的。形成能计算表明自组装单层冰和二维 Ice-II 冰相具有类似的轮廓和极小值位置，而在表面上自组装冰比二维 ice-II 冰相更稳定。这说明新发现的自组装冰是 ice-II 在二维平面上的变体。该项研究揭示石墨衬底能够对表面结构施加有效的“压强”，从而形成高压冰相，这也是实现高压研究的一种新手段。

该工作得到科技部重点研发计划(2016YFA0300902, 2015CB921001)和国家自然科学基金委(11574253, 11374242, 11604269, 11474328)的支持。

相关链接：http://www.iop.cas.cn/xwzx/kydt/201901/t20190104_5225184.html

