

# 同步辐射技术在研究 太阳能转化功能材料方面取得重要进展

**本报讯** 我校国家同步辐射实验室刘庆华副研究员、何劲夫博士和姚涛副研究员等利用同步辐射X射线吸收谱学(XAFS)技术,在研究新型太阳能转化功能材料的形貌结构和性能调控中取得重要进展,于10月6日在国际著名期刊《自然·通讯》上发表研究论文,阐述了他们的研究成果。

通过太阳能光解水的“人工光合作用”将太阳能转换为清洁的氢能,被认为是21世纪人类解决能源和环境问题的最有效途径之一。在过去的几十年里,国内外研究者已经在光解水领域展开了广泛的工作,但目前取得的可见光区的量子转换效率仍然比较低,严重限制了太阳能光解水技术的工业化应用前景。普遍认为导致金属氧化物在可见光区水分解性能低的

本质原因主要有以下两个方面:1)常见的金属氧化物半导体光生载流子的迁移距离比较短、复合比较快;2)通常需要较大的过电势才能完成水的氧化反应。如何解决这些难题就成为提高金属氧化物的可见光水分解性能的必要途径。

针对以上科学难点问题,他们从理论上提出一种通过形成“矢量迁移通道”的能级结构来引导光生载流子迁移的途径。实验上,通过将一层2~3 nm厚的Fe<sub>2</sub>TiO<sub>5</sub>窄禁带(2.2 eV)半导体材料包覆在高度有序的TiO<sub>2</sub>纳米管阵列表面,在Fe<sub>2</sub>TiO<sub>5</sub>/TiO<sub>2</sub>之间形成载流子分离界面,成功地将光生空穴从材料内部定向迁移到表面催化反应活性位点;同时,Fe<sub>2</sub>TiO<sub>5</sub>与TiO<sub>2</sub>匹配的导带结构极大减小了水分解反应

的过电势,从而使得Fe<sub>2</sub>TiO<sub>5</sub>–TiO<sub>2</sub>复合结构在400~600 nm波长范围的量子转换效率高达40%以上,总的能量转换效率达到2.7%。并利用同步辐射X射线吸收谱学和电化学阻抗谱技术等一系列测量和理论分析,证实了Fe<sub>2</sub>TiO<sub>5</sub>–TiO<sub>2</sub>界面的“矢量迁移通道”能级结构是实现光生载流子定向迁移的原因。审稿人认为“这项工作所提出的载流子分离方法和通过能级剪裁来降低水分解起始电势的途径在太阳能水分解领域有着非常重要的潜在意义”。

以上研究工作极大地丰富了人们利用能带工程来改善光解水可见光量子效率的认识,为进一步调控氧化物半导体光催化剂水分解性能提供了新思路。

(国家同步辐射实验室 科研部)

## 二维纳米材料 巨磁阻效应研究 取得重要进展

**本报讯** 近日,中国科学技术大学谢毅教授团队、吴长征特任教授课题组与曾晓成教授及中国科学院强磁场中心研究组合作,通过阴离子固溶技术实现了二维纳米材料的自旋和能带结构的本征调控,获得了目前二维纳米材料中最高的负磁阻效应,该现象的发现有可能推动二维材料在自旋电子器件的进展。此成果10月6日在线发表在Physical Review Letters上。

基于电子自旋自由度调控的巨磁阻材料,能实现信息高密度存储和高速读写,是整个信息产业的核心。随着人们对电子器件高集成度和小型化日益增长的需求,在更小的材料尺度实现磁阻效应成为追逐目标。以石墨烯为代表的二维纳米材料具备独特的形貌和优异的物理特征,为实现纳自旋电子器件提供了重要的材料基础。因此在二维纳米材料中实现自旋的本征调控和磁阻效应,是近年来该领域的研究热点。由于绝大多数二维材料是本征非磁的,如何在二维材料中引入本征净磁矩成为了开发二维自旋电子器件的关键。化学与材料科学学院吴长征教授、郭宇桥博士与戴军博士等提出低价卤族取代硫族元素的阴离子掺杂新方法,在克服了阳离子掺杂形成插层化合物而难以剥离的缺点的基础上,在二维纳米材料中成功引入本征自旋和调控能带结构,实现了自旋相关散射电子输运,基于此构建了基于二维过渡金属硫属化合物的巨磁阻器件。该实验结果实现了目前为止,二维纳米材料体系最大的本征负磁阻效应,−85% (10K, 5T)。审稿人认为该工作“开创一个很有意义的研究领域”。

吴长征课题组近年来在二维磁性材料的制备和自旋调控方面取得了系列进展。此前,通过长期的研究探索,成功获得了具有本征室温铁磁性和电荷密度波相变行为的二维过渡金属硫属化合物,并发现了具有超高铁磁饱和磁化强度的二维纳米材料。相关研究成果分别发表在著名化学期刊Angew. Chem. Int. Ed., 2013, 52, 10477–10481和Chem. Sci., 2014, 5, 2251–2255上。此外,他们又通过引入氢键的策略成功的实现了二维非金属材料自旋行为的调控,相关成果已发表在Chem. Sci., 并被Chemistry World作为research news报道。

(化学与材料科学学院 合肥微尺度物质科学国家实验室 能源材料化学协同创新中心 科研部)

## 中国科大在天然免疫领域取得重要突破

**本报讯** 近日,生命科学学院及中科院天然免疫与慢性疾病重点实验室周荣斌教授研究组、田志刚教授研究组与厦门大学韩家淮教授研究组合,在机体抗病毒天然免疫领域取得重要突破,首次发现坏死小体蛋白复合物RIP1–RIP3及其下游信号通路在RNA病毒感染诱导的炎性小体活化及炎性反应发生中起关键作用。该研究成果发表在国际权威免疫学杂志《自然·免疫》上。

天然免疫系统及其诱导的炎性反应是机体抵抗病毒感染的重要手段,机体依靠天然免疫和炎性反应清除病毒感染。但另一方面,炎性反应过度活化或者持续存在又是病毒感染引起器官和组织损伤的重要原因。近年来的研究表明,病毒感染引起的炎性小体活化是机体产生天然免疫炎性反应的重要原因,但是病毒活化炎性小体的分子机制一直不清楚。该项工作中研究人员发现抑制坏死小体蛋白RIP1或者RIP3能够显著抑制包括流感病毒在内的RNA病毒活化的炎性小体活化,但并不影响

DNA病毒活化的炎性小体。进一步的实验表明, RNA病毒感染能够促进巨噬细胞中形成RIP1–RIP3复合物,该蛋白复合物进一步通过DRP1诱导线粒体损伤,从而活化炎性小体。最后,研究人员发现在RIP3缺陷小鼠中, RNA病毒感染导致的炎性反应也大幅削弱。这些研究结果表明RIP1–RIP3蛋白复合物及其下游信号通路在RNA病毒活化NLRP3炎性小体过程中起关键作用,不仅揭示了RNA病毒诱发免疫炎性的机制,也为病毒感染相关炎性疾病治疗提供了潜在的治疗靶点。

周荣斌教授研究组长期从事天然免疫识别、调控和疾病机制研究,在该领域取得了多项重要研究成果,2013年以来已在自然杂志子刊《自然·免疫》(Nature Immunology)、Cell杂志子刊《免疫》(Immunity)及《实验医学杂志》等国际免疫学权威杂志发表系列论文。

(生命学院 科研部)

## 同步辐射技术在二氧化钒薄膜 相变的应力调控方面取得重要进展

**本报讯** 国家同步辐射实验室邹崇文副研究员和樊乐乐博士等利用同步辐射X射线衍射和倒空间成像技术,在研究二氧化钒超薄膜的外延生长和界面应力调控相变方面取得重要进展,相关研究工作发表于近期的Nano Lett.。

二氧化钒材料表现出独特的可逆的金属绝缘体相变,这种相变将导致VO<sub>2</sub>的电、磁和光学性质会发生突变,比如在相变过程中其电阻率和红外透射率的突变等,因而在相变存储和“智能窗”的应用上具有极大的前景。但是这种相变临界温度为68度,作为实际应用仍然相对过高。因此调控二氧化钒相变过程,从而降低相变温度一直是研究的热点问题。目前常用的方法就是利用钨、铌等原子掺杂来降低其相变温度到室温附近。虽然通过上述掺杂调控尽管能够使得相变温度大大降低,可是其原先所具有的突变的光电功能特性,比如巨大的电阻率和红外透射率的变化会大大削弱,从而丧失了其作为智能窗材料的实际用途。利用薄膜外延沉积的手段在二氧化钒薄膜内产生界面应力,从而降低二氧化钒薄膜的相变温度被证明为一个可行的手段。但是界面应力

的引入对二氧化钒薄膜的晶格结构的影响以及相应电子态的调控机理仍不清楚。

针对上述问题,他们利用氧射频分子束外延方法在二氧化钛单晶衬底上成功制备了从几个原胞到几十纳米厚度的外延二氧化钒薄膜并测试了其金属绝缘体相变特性。同时采用同步辐射衍射倒空间成像技术研究了这种超薄膜的界面应力变化的动力学过程,结合变温电学测试和第一性原理理论计算结果,深入揭示了这种内在应力对其相变过程的调控机理。结果表明界面应力的作用使得外延二氧化钒超薄膜的晶格发生膨胀,导致其电子态密度,特别是d//轨道的电子占据状态出现显著的变化。这种电子态密度和d轨道占据行为的变化直接调控了这种外延超薄膜的相变行为,使得其相变温度大大降低。

审稿人对此工作给出了高度评价,认为这项工作利用同步辐射光源优势对二氧化钒的应力相变调控给出了更加深入和清晰的物理图像,对二氧化钒的相变行为研究具有重要指导意义。

(国家同步辐射实验室 科研部)

## 《美丽化学》中文版即将上线

**本报讯** 中国科大先进技术研究院和清华大学出版社联合制作的原创数字科普项目《美丽化学》中文版将于10月底与中国大众见面。它是将化学的美丽和神奇以网站的形式传递给大众,从而让更多的孩子和学生对化学产生兴趣,改变人们对化学的负面印象。

此前,《美丽化学》英文版已于9月30日上线,立刻在网络上引发了轰动。在短短两周内,化学的美丽深深打动了数十万人。包括美国《时代周刊》官网Time.com,加拿大探索频道Daily Planet栏目(第149期),法国电视台官网Francetvinfo.fr,意大利Focus科技杂志官网等众多主流媒体都对《美丽化学》进行了报道并给予了高度评价。2013年诺贝尔和平奖得主“禁止化学武器组织(OPCW)”特别提出希望能在他们的

最新系列纪录片Fires中使用《美丽化学》视频。截至10月15日,《美丽化学》网站页面点击量超过144万,视频播放次数超过100万。可以说《美丽化学》填补了国内高端原创科普作品的空白,并将由中国人制作的科普作品带给了世界观众。在世界范围内,《美丽化学》将有可能成为访问量最高的化学科普网站之一。

《美丽化学》包括“化学反应”和“化学结构”两部分,分别从宏观和微观两个尺度展现独特的化学之美。在“化学反应”部分使用最新的4K高清摄影机,捕捉化学反应中的缤纷色彩和微妙细节。在“化学结构”部分使用先进的三维电脑动画和HTML5互动技术,展示近年来在《自然》和《科学》等国际知名期刊中报道的美丽化学结构。

(先进技术研究院)

## 中美云机器人 合作研究取得 重要进展

**本报讯** 云机器人是机器人领域的一个重大热点新方向,将机器人技术与云计算相结合,以增强单个机器人的能力,并从根本上改变传统机器人过分依赖手工编程的局限性。我校陈小平教授团队与世界人工智能联合会主席、美国卡内基·梅隆大学伟罗莎教授团队开展了云机器人合作研究,完成了合肥与匹兹堡之间的云机器人实验。同时,以中国科大吉建民为第一作者、陈小平为通讯作者,反映该研究理论进展的论文在国际自动推理权威期刊《International Journal of Approximate Reasoning》最新一期上发表。

传统机器人的开发模式是:针对每一项具体任务进行事先编程,并在固定的结构化环境中完成大量调试。近十年来兴起的服务机器人需要在各种不同的非结构化环境中工作,传统开发模式成为一个严重障碍。研究者发现,分布在世界各地的机器人经常执行类似的任务,但它们由于硬件和基础软件的不同,可以具有不同的能力,从各自环境中也可以获取不同的知识和技能。在云机器人平台上,不必为每一台机器人的每一项功能专门编程,而是可以从云平台和其他机器人获取有关知识和技能,从而极大地拓展每一台机器人的能力范围,并降低开发成本。近年来,云机器人被视为突破机器人大规模应用技术瓶颈的一种新的重要手段。

为了实现机器人之间和人-机器人之间的知识共享与合作,双方团队自2010年以来,分别开展了持续性基础研究。中方在外部开放知识获取、机器人自动推理与规划、人机语义理解等方面进行了重点研究,形成了一条机器人运用外部知识提高性能的技术路线,有关成果发表在人-机器人互动旗舰期刊JHIR上。针对两个大任务集——来自网络的11000多个用户任务和400多个用户愿望,进行了系统性的实验测试,并取得了重要进展。发表在IJAR上的最新论文为机器人外部知识获取问题建立了一个理论模型,证明了一系列相关推理任务的计算复杂度,并找到了一种可高效求解的知识表示模式,为提高外部知识获取效率和大任务集测试开辟了道路。美方在机器人大数据分析与人机合作等方面进行了深入的探讨,取得了重要成果。

在此基础上,双方展开合作研究,探索通过云机器人平台实现双方机器人以及机器人与人之间的资源共享与合作。在近日进行的首次云机器人联合实验中,位于合肥的中国科大“可佳”机器人与位于匹兹堡的卡内基·梅隆“可宝”机器人,借助云平台进行了远程合作与资源共享测试。实验中,云端向双方机器人提供多种知识源和数据源,可佳向可宝输送语义理解和自动规划服务,可宝向可佳输送大数据分析服务。借助于这些知识共享和远程合作,可佳与可宝分别完成了各自单独工作无法完成的测试任务。此前未见中美之间同类实验的报道。

双方将进一步深化本项目的合作,启动云机器人平台的工程化开发,进行更大规模的实验测试,促使有关成果扩散到分布于世界各地的其他智能机器人。

(计算机学院 先研院 科研部)