

# 2016年上海超级计算中心科学科研用户成果展示

● 寇大治[编] 上海超级计算中心 上海 201203 dzkou@ssc.net.cn

2016年是上海超级计算中心转型发展的突破之年，中心在市场化的道路上迈出了实质性的步伐。高性能计算资源的使用主要围绕魔方2超级计算机开展，2016年全年期间魔方2超级计算机始终保持了饱满的使用率，到2016年底魔方2超级计算机的使用率已经超过了90%。据不完全统计，2016年度期间上海超级计算中心的用户共发表了192篇被科学引文索引（SCI）收录的论文，与这些论文相关的科学研究工作均得到了上海超级计算中心高性能计算平台的支持，并在论文中明确提及上海超级计算中心。在这其中有24篇论文是发表在传统公认的国际顶级科研期刊以及影响因子大于10的科研期刊上的，例如包括《先进材料》（ADVANCED MATERIALS）、《纳米快报》（NANO LETTERS）、《美国化学会志》（JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY）、《德国应用化学国际版》（ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION）、《纳米能源》（NANO ENERGY）、《先进功能材料》（ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS）、《自然·通讯》（NATURE COMMUNICATIONS）、《美国国家科学院院刊》（PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA）和《物理评论快报》（PHYSICAL REVIEW LETTERS）等，还有很多优秀的论文期刊不能逐一列举。受限于篇幅，本文选取了部分论文加以介绍，以便读者了解和交流。

## 部分重点论文介绍：

论文题目：Extraordinarily Strong Interlayer Interaction in 2D Layered PtS<sub>2</sub>

High-Electron-Mobility and Air-Stable 2D Layered PtSe<sub>2</sub> FETs

用户来源：中国人民大学

论文来源：

ADVANCED MATERIALS Volume: 28 Issue: 12 Pages: 2399-2407 Published: MAR 23 2016 DOI: 10.1002/adma.201504572

ADVANCED MATERIALS (Deerfield Beach, Fla.) Published: 2016-Nov-25 (Epub 2016 Nov 25) DOI: 10.1002/adma.201604230

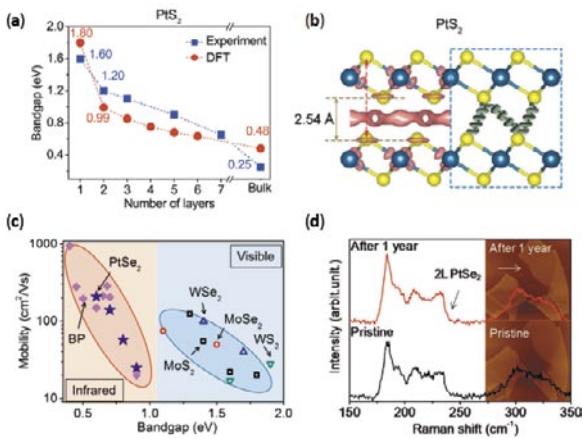
二维层状材料具有原子层厚度和表面无悬挂键等特点，被视为纳米电子学最有希望的材料之一。近年来科学家们高度关注的石墨烯，过渡金属硫化物，黑磷等二维半导体材料不断取得新进展，为找寻高性能的纳米电子学和光电子学材料打下坚实的基础。此前人们认为在黑磷中，层间电子耦合引起电子结构的强烈层数依赖是其特有的性质。然而，近来发现的一类全新化合物，10B族的贵金属硫

属化合物中普遍存在显著层数依赖的电子结构特性和特殊的层间振动耦合特性。同时，该类材料在室温下有着较高的电子迁移率，并在空气中具有很好的稳定性，是相当有潜力的新兴二维材料。

上海超级计算中心用户中国人民大学物理学系季威教授与合作者通过实验测量和理论预测对贵金属硫化物的代表材料二硫化铂（PtS<sub>2</sub>）和二硒化铂（PtSe<sub>2</sub>）进行了系列研究。研究发现不仅PtS<sub>2</sub>的间接带隙在1.6-1.8 eV（单层）到0.25-0.48 eV（体相）之间可调（如图a），单层到体相PtSe<sub>2</sub>更是发生了从具有1.17 eV带隙的半导体到半金属的转变。该类材料显示出如此强的层数依赖的电子结构特性，主要是由于Pt上 d 轨道电子富集，使得层内Pt-S（Se）间采用八面体构型，S（Se）原子中留下的未参与杂化的 p<sub>z</sub> 轨道，产生层间轨道交叠引起的。同时，这样强的杂化作用导致了材料的剪切模和呼吸模的振动频率相近（如图b），可认为这两种材料具有各项同性的振动性质，这在二维材料中是相当特别的性质。同时，研究还讨论了从d轨道电子数目和轨道能量差异出发，预测这类材料层间相互作用和层数依赖物性的一般原则。接下来，作者进一步研究了这种新奇的

二维材料的电学性质和稳定性，发现该类材料具有高的电子迁移率并在空气中能保持很好的结构稳定性。多层 PtS<sub>2</sub>和 PtSe<sub>2</sub>的迁移率在室温下分别能达到 ~100 cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup> 和 210 cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>, 该数值与多层黑磷的迁移率相当且高于一般过渡金属硫族化合物 (如图c)。同时, 与多层黑磷材料在空气中性能退化严重不同, 这类材料不易被O<sub>2</sub>氧化且疏水, 在空气中放置较长时间 (约1年, 如图d) 样品形貌亦无明显退化。这些优良的性质为该类材料的应用奠定了坚实基础。

该系列工作不仅激发了一类新材料及其物理特性的研究, 深化了对二维材料层间耦合的认识。同时发现了该类材料的高电子迁移率和优良的结构稳定性, 使其成为相当有潜力的纳米电子学和光电子学材料。



具有强层间相互作用和高迁移率的新型贵金属硫属化合物

论文题目: Edge-Modified Phosphorene Nanoflake Heterojunctions as Highly Efficient Solar Cells

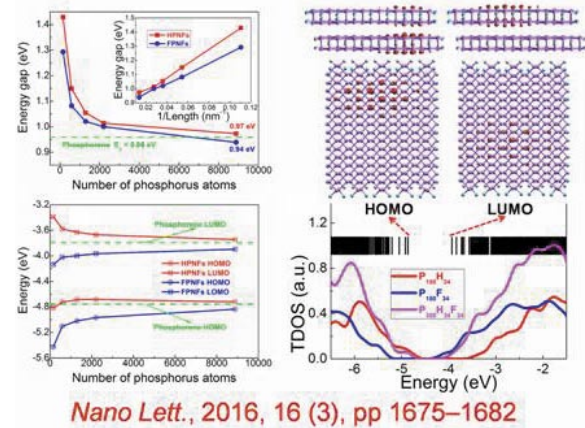
用户来源: 中国科学技术大学

论文来源: NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 3 Pages: 1675-1682 Published: MAR 2016

高效太阳能电池设计和实现的核心是异质结模型。通过选取合适的施主和受主两种不同半导体材料, 可以有效地分离和收集异质结中的载流子。这些半导体材料必需满足合适的能隙 (1.2-1.6 eV) 和高电子迁移率等等以便于太阳光吸收和电子运输。其中, 很多二维材料 (如石墨烯、二硫化钨和磷烯) 由于具有极高的光吸收表面和可调控的光电性质, 广泛地应用于太阳能电池异质结中。

上海超级计算中心用户中国科学技术大学的杨金龙教授与合作者根据经典的电偶层理论和第一性原理密度泛函理论计算, 设计出不需要选择两种不同半导体材料, 仅仅由氢化 (施主材料) 和氟化 (受主材料) 磷烯纳米层即可构成的新型太阳能异质

结模型, 对太阳能量的转换效率高达20%。该异质结模型可以广泛的应用到其它二维材料太阳能电池上, 为未来在实验上和理论上设计和实现新型高效太阳能电池提供了新思路。



Nano Lett., 2016, 16 (3), pp 1675–1682

边界修饰的磷烯纳米层

论文题目: Shape Evolution of Metal Nanoparticles in Water Vapor Environment

用户来源: 中国科学院上海应用物理研究所

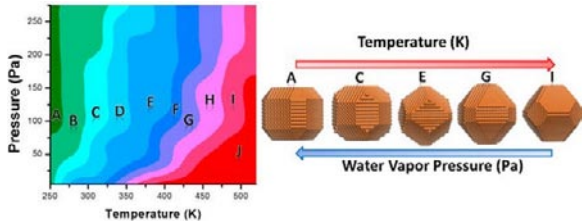
论文来源: NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 4 Pages: 2628-2632 Published: APR 2016

水是生命之源, 是地球上最常见的环境之一。水环境是否能对材料结构性产生影响以及如何影响, 是一个与日常生活以及工业生产等方面密切相关的基本科学问题。上海超级计算中心用户中国科学院上海应用物理研究所高凝研究员团队通过建立一个新型理论模型, 有效模拟了水汽环境对金属纳米颗粒结构形貌的影响。研究显示, 环境温度与水汽压强能够显著改变金属纳米颗粒的形貌结构。

众所周知, 纳米颗粒材料的形貌对其表面物理化学性质起着至关重要的作用。例如, 纳米催化材料的形貌直接影响着其表面活性位点的数量, 从而对其催化活性起着决定性的影响。纳米材料的实际物理化学性质的研究必须结合其在实际环境中的表面结构来研究这一观点现在已经为人们所广泛接受。然而, 水环境对于固体纳米材料结构性质的影响还没有得到足够的重视。一方面是由于传统概念中人们认为水环境对于固体材料的影响微乎其微可以忽略, 另一方面是由于实验上观察水环境对固体结构影响的工作需要用到最先进的原位观测技术。因此, 对此问题的理论研究就显得非常必要和迫切。

文章作者在传统的Wulff Construction理论的基础上, 结合Langmuir分子吸附模型与第一性原理计算成功地将温度与水汽环境等多实验参量与金属稳定形貌联系起来。借助于自主开发的多尺度模型和

计算机模拟，他们成功观察到铜纳米颗粒在不同水汽环境中的稳定构型，并再现了实验结果。同时，他们对水汽环境中金、铂、钯等常用纳米催化剂的形貌进行了构建。这一工作不仅对纳米催化以及纳米材料学领域的实验学家能起到很好的理论指引作用，有助于人们正确认识水-固相互作用，同时为进一步研究介观尺度上外界环境对固体材料的影响提供了一个简单但有效的理论模型。



(左) 理论模拟得到的铜8nm铜纳米颗粒在水汽环境中的结构相图；

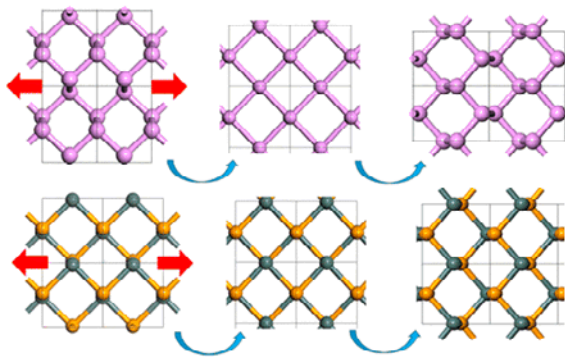
(右) 相应铜纳米颗粒结构随温度及水汽压强变化趋势图

论文题目：Intrinsic Ferroelasticity and/or Multiferroicity in Two-Dimensional Phosphorene and Phosphorene Analogues

用户来源：华中科技大学

论文来源：NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 5 Pages: 3236-3241 Published: MAY 2016

上海超级计算中心用户华中科技大学物理学院凝聚态物理研究所吴梦昊教授课题组发现，具有高迁移率的二维材料有望取代硅材料成为新一代电路基本材料，但要使其兼具信息非易失性记忆功能则需要使其具有铁性（铁磁、铁电、铁弹）。目前的多数二维铁磁性材料居里温度难以达到室温，而二维材料的铁电性和铁弹性则鲜有相关研究。



Ferroelastic switching of phosphorene and phosphorene analogues

二维磷烯及磷烯类似物中的本征铁弹性与多铁性

相对于铁磁性材料多为金属材料，作者在本文提出铁电性和铁弹性并不与半导体性冲突，而且可能在低维仍具有较高居里温度，因而有望绕开二维铁磁性材料居里温度过低的问题，为具有信息非

易失性记忆功能的二维材料研究拓展新方向。该项工作成功在一系列现有二维半导体中预测出本征铁磁性，其中磷烯具有铁弹性并有目前所知最高的铁弹性应变，而单层磷烯类似物（GeS、GeSe、SnS、SnSe）则兼具铁电性和铁弹性并且相互耦合。这些材料在光学、电学、力学等方面的各向异性还使得信息的读取更为容易。其中单层GeS和GeSe及体态SnS和SnSe的铁性可在室温下保存，在二维电子信息存储器件中可能有重要的应用价值。

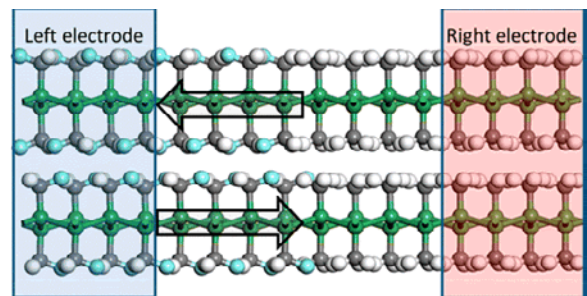
论文题目：Ferroelectricity in Covalently functionalized Two-dimensional Materials: Integration of High-mobility Semiconductors and Nonvolatile Memory

用户来源：华中科技大学

论文来源：NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 11 Pages: 7309-7315 Published: NOV 2016

半导体和铁性（铁磁、铁电、铁弹）结合可使其兼具非易失性记忆功能。传统半导体（比如Si、GaAs）可以通过掺杂磁性离子将铁磁性与半导体性结合，但其居里温度难以达到室温，在二维材料中类似掺杂更加困难；铁电和铁弹性在室温下生存相对容易达到，但无法通过类似掺杂获得。

上海超级计算中心用户华中科技大学吴梦昊教授与合作者的研究成果通过第一性原理计算表明，表面的某些极性化学基团的修饰可以使得一系列非铁电体系获得铁电性，且具较高居里温度，包括石墨烯，锗烯，二硫化物等一系列为人熟知的二维材料，或者硅，III-V族半导体（111）表面，或是作为二维材料衬底的二氧化硅表面，而这些体系中不少在过去实验中已经合成。它们可直接集成于以传统半导体或二维材料为基础的电路中，并有望将高迁移率窄带隙半导体和室温铁性相结合，进而可以此设计出一系列多功能异质结器件：高开关比的二维铁电场效应晶体管，狄拉克费米子可在空穴/电子之间调控的拓扑晶体管，二维铁电甚至多铁隧穿结，等等，使信息非破坏性读取和快速写入同时成为可能，在未来多功能器件中拥有重要应用价值。



共价功能化二维材料中的铁电：高迁移率半导体与非易失性存储器的结合

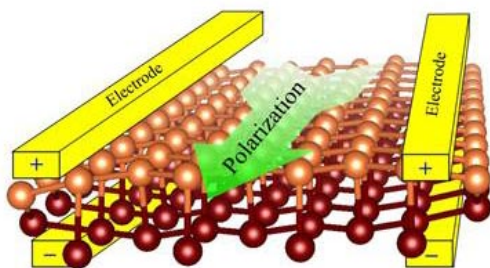


论文题目: New Ferroelectric Phase in Atomic-Thick Phosphorene Nanoribbons: Existence of in-Plane Electric Polarization

用户来源: 南京理工大学

论文来源: NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 12 Pages: 8015-8020 Published: DEC 2016

上海超级计算中心用户南京理工大学理学院 阚二军教授与合作者在低维铁电材料设计方面取得重要进展, 低维功能材料因为其巨大的潜在应用价值而受到了国际材料研究领域的广泛关注。铁电材料是指在居里温度以下具有铁电自发极化的功能材料, 在铁电存储器、红外探测器及光学传感器等方面有重要应用。随着对器件微型化、功能集成化等要求的不断提高, 传统的铁电块体由于尺寸限制已经不能满足微电子器件的要求, 寻找原子层厚度的低维铁电材料是各研究组长久以来努力的目标。在前期的研究中, 团队提出了一种基于离子位移机制的二维铁电材料, 而基于电子极化机制的低维铁电材料的仍待探究。由于低维纳米材料具有大表面积的特性, 团队设想通过外界调控的手段来实现电子极化铁电材料。团队通过理论分析和计算机模拟发现在黑磷扶手椅边纳米带中可以通过外加垂直电场可以实现基于电子极化的平面内铁电性, 并且双层磷纳米带中的极化强度与传统的钙钛矿铁电材料相当。



新型低维铁电材料的设计

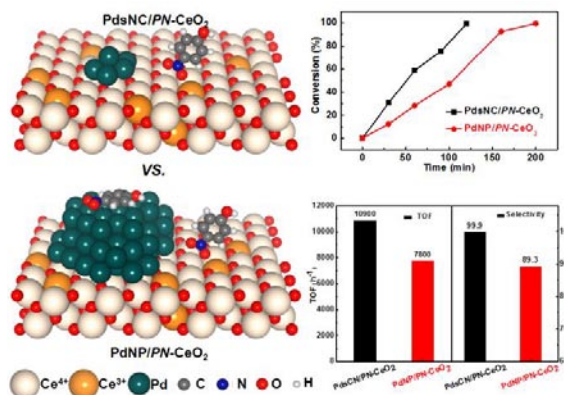
论文题目: High Catalytic Activity and Chemoselectivity of Sub-nanometric Pd Clusters on Porous Nanorods of CeO<sub>2</sub> for Hydrogenation of Nitroarenes

用户来源: 西安交通大学

论文来源: JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 138 Issue: 8 Pages: 2629-2637 Published: MAR 2 2016

对氨基苯酚是应用较广泛的一种精细化工中间体, 同时也是医药合成扑热息痛、安妥明等药物的重要中间体。传统铁粉还原方法会产生大量的污染物。加氢催化还原硝基的方法是环保经济的途径, 但其往往带来偶氮和氮氧等副产物。

上海超级计算中心用户西安交通大学化工学院常春然教授课题组与合作者合作在芳香硝基化合物多相加氢催化还原方面取得新进展。研究以多孔二氧化铈纳米棒(PN-CeO<sub>2</sub>)为载体, 采用光辅助还原方法制备出具有70.3%Pd分散度的Pd<sub>5</sub>NC/PN-CeO<sub>2</sub>催化剂。该催化剂高效(TOF=44059 h<sup>-1</sup>)和高选择性(>99.9%)地将4-硝基苯酚加氢还原为4-氨基苯酚。研究表明高Pd分散度和具有大量氧缺陷的PN-CeO<sub>2</sub>对实现这一反应有着协同促进作用。系列实验和理论计算证实高分散的Pd团簇不利于反应物在其表面的吸附; 而PN-CeO<sub>2</sub>缺陷与硝基具有极强吸附作用。因此, 硝基在反应过程中吸附在PN-CeO<sub>2</sub>载体上, 氢气在高分散Pd表面活化, 进而实现硝基高反应速率和高选择性的加氢还原。



芳香硝基多相加氢催化还原方面的新进展

论文题目: The Nanoparticle Size Effect in Graphene Cutting: A "Pac-Man" Mechanism

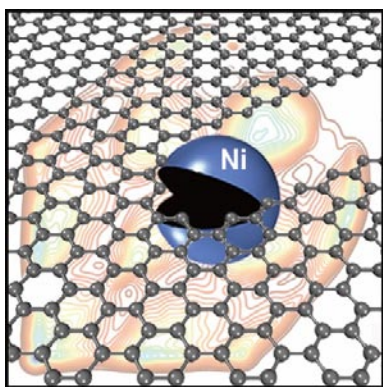
用户来源: 中国科学技术大学

论文来源: ANGEWANDTE CHEMIE - INTERNATIONAL EDITION Volume: 55 Issue: 34 Pages: 9918-9921 Published: AUG 16 2016

上海超级计算中心用户中国科学技术大学杨金龙教授与合作者在金属纳米粒子切割石墨烯的机理研究中取得重要进展, 首次揭示了金属纳米粒子在石墨烯切割中扮演“吃豆人(Pac-Man)”的角色, 石墨烯中碳-碳键的断裂依赖于多个金属原子的协同合作, 因此不同类型的石墨烯边缘碳原子被蚀刻的难易程度显著不同。“吃豆人”机理很好地解释了之前实验上令人困惑的切割动力学问题。

在二维材料的很多应用中, 需要先将它们切割成特定的形状。虽然石墨烯可以在强氧化或者高能等离子体环境中进行切割, 但是为了保证石墨烯样品的质量, 人们希望切割能在更加温和的条件下进行。其中一种可能的途径是使用金属纳米粒子作为催化剂, 在氢气中进行切割。为了使切割过程更加

可控，需要对其中的微观机理有深入的了解。之前在对强氧化环境下石墨烯切割的研究中被广泛接受的“拉链”机理，依赖于单个氧原子作为尖兵来切断石墨烯中的碳-碳键。显然这种基于单原子的“拉链”机理无法解释纳米粒子切割实验中观测到的诸多依赖于纳米粒子尺寸的效应。因此，金属纳米粒子催化的石墨烯切割应当存在新的机理。为此，作者采用多尺度模拟的方法，先在高温下使用反应力场进行分子动力学模拟得到定性的物理图像，再在实验温度下进行统计采样(metadynamics)确定反应路径，然后通过高精度第一性原理计算进行验证，最后从动力学蒙特卡罗模拟中得到切割动力学。



金属纳米粒子催化的石墨烯切割的“吃豆人”机理示意图

研究表明，金属纳米粒子与石墨烯接触时，石墨烯边缘的碳-碳键被附近的金属原子弱化直至切断，形成的悬挂碳原子处于多个金属原子包围中，在悬挂键断裂后被吞入金属纳米粒子内部。这一过程类似吃豆人游戏中的吃豆过程，因此相关的机理被称为“吃豆人”机理。被蚀刻的碳原子最后扩散到金属纳米粒子表面，在那里与氢反应形成碳氢化合物分子后进入气相。在“吃豆人”机理中，致密的锯齿型石墨烯边缘的碳-碳键最难被打开。但是，一旦一条完整的锯齿型边缘碳链中有一个碳-碳键被打开，其所在位置便形成一个开放的局域环境，进而使得周边的碳原子很容易被蚀刻掉。这样，像多米诺骨牌一样，第一个碳-碳键的断裂将触发整条锯齿型边缘碳链的蚀刻，从而使得石墨烯和金属纳米粒子接触的界面向前推进。

如果考虑单位时间内被蚀刻掉的碳原子的总数目，需要考虑两个因素：一个是蚀刻沟道的宽度，正比于金属纳米粒子半径；另外一个因素是沟道的长度，由纳米粒子移动的快慢决定。根据触发机制，蚀刻过程的大部分时间都花费在等待锯齿型边缘第一个碳-碳键被打开。金属纳米粒子越大，石墨烯-金属界面就越长，可以被触发的碳-碳键数目越多，从而等待时间也就越短，纳米粒子移动速度越

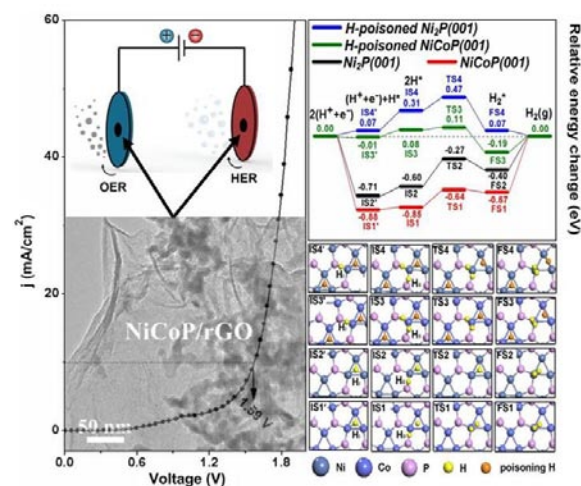
快。最后，总的切割速率正比于纳米粒子半径的平方。这一结果解释了实验上切割速率正比于纳米粒子面积的观测结果，同时指出切割过程中最关键的步骤并非发生在纳米粒子表面而是在金属-石墨烯的界面。

论文题目：Mechanistic Insights on Ternary  $Ni_{2-x}Co_xP$  for Hydrogen Evolution and Their Hybrids with Graphene as Highly Efficient and Robust Catalysts for Overall Water Splitting

用户来源：西安交通大学

论文来源：ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS Volume: 26 Issue: 37 Pages: 6785-6796 Published: OCT 4 2016

随着传统化石能源的日益消耗，开发新能源成为全世界关注的热点。氢能因其清洁、高效、安全、可持续性等优点，被视为21世纪最有潜力的新能源。目前，工业上制氢的方式主要有电解水制氢、煤气化制氢、天然气水蒸气重整制氢等，其中电解水制氢因不直接消耗化石能源具有较大的优势。但是，目前工业上使用的电解水产氢催化剂多以铂为代表的贵金属材料为主，价格昂贵且资源匮乏，因而开发低成本、高效能的电解水产氢催化剂是能源、催化和材料领域的研究热点。



电解水制氢方面的新进展

上海超级计算中心用户西安交通大学常春然教授课题组与合作者设计并制备了一种由镍钴磷组成的三元体系催化剂，通过与石墨烯复合，表现出接近贵金属的优异电解水性能。

该论文除了创新性地设计、并制备出该类三元复合材料外，还通过实验与理论模拟的手段，系统研究了三元镍钴磷体系的电解水产氢的微观机理。研究表明，在真实反应条件下，当高效反应活性位点被氢毒化时，三元体系中钴掺杂的引入能够带来

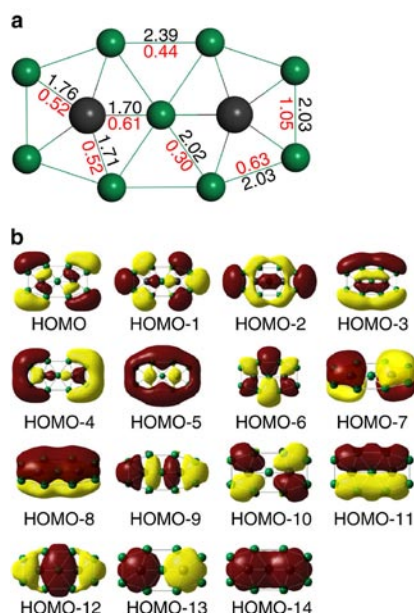


适当的氢吸附，以及更加温和的氢气脱附，从而使三元体系表现出更优异的电催化产氢性能。该研究结果不仅报道一种高效的电解水产氢催化剂，同时还对新型产氢催化剂的设计起到指导作用。

论文题目：Semi-metallic  $\text{Be}_5\text{C}_2$  monolayer global minimum with quasi-planar pentacoordinate carbons and negative Poisson's ratio

用户来源：南京师范大学

论文来源：NATURE COMMUNICATIONS Volume: 7 Article Number: 11488 Published: MAY 2016



二维纳米材料设计研究中的新进展

上海超级计算中心用户南京师范大学化学与材料科学学院李亚飞教授课题组在二维纳米材料设计的研究中取得新进展。具有新奇拓扑结构的低维纳米材料往往具有一些独特的性质。碳作为一种常见的元素，被熟知采取采取线型 $sp$ 、平面三角型 $sp^2$ 和四面体型 $sp^3$ 三种杂化方式成键。1970年，著名的化学家R.Hoffmann提出了平面四配位碳原子(planar tetracoordinate carbon)的概念，从此掀起了平面碳的研究热潮。随着平面五配位甚至平面六配位的碳原子的分子发现，平面碳的历史变得更加丰富多彩。近年来二维石墨烯的研究刺激了人们把平面碳结构扩展到二维体系，以期望获得更多具有特殊结构和性质的二维纳米材料。李亚飞教授课题组与合作者通过多尺度理论计算，设计出一种新奇的二维无机材料：单层 $\text{Be}_5\text{C}_2$ 。在单层 $\text{Be}_5\text{C}_2$ 中，每个碳原子与相邻的五个铍原子在近似一个平面上成键，形成一种准平面五配位的碳结构。计算指出，这种含有平面五配位碳原子的单层 $\text{Be}_5\text{C}_2$ 具有很好热力学和动力学稳定性，并且在二维空间是能量最低构型，未来有

希望通过实验合成出来。单层 $\text{Be}_5\text{C}_2$ 是一种有着类似迪拉克点的零带隙准金属材料；此外，它还具有不同寻常的负泊松比特性。一旦合成出来，将在电子学和力学器件领域有着非常广泛的应用前景。

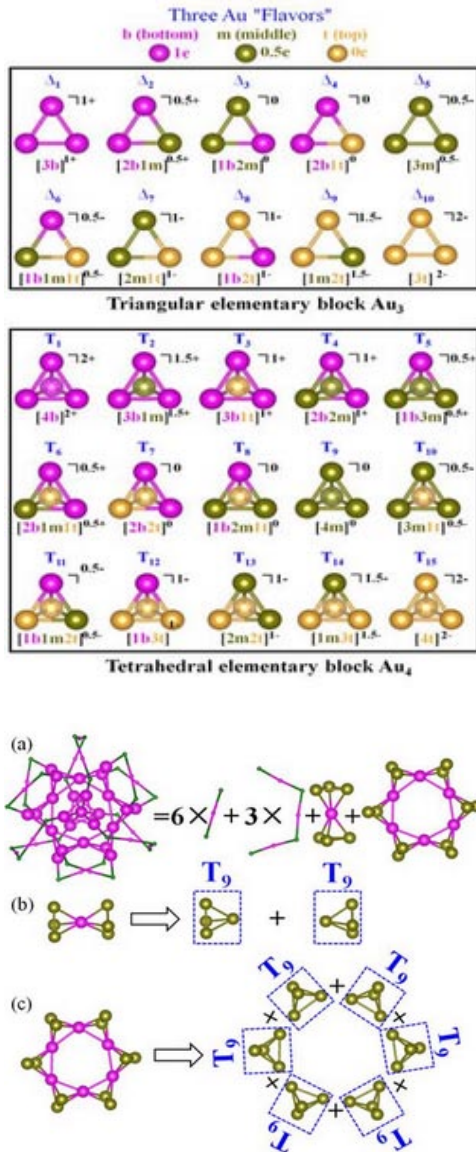
论文题目：A grand unified model for liganded gold clusters

用户来源：中国科学院上海应用物理研究所

论文来源：Nature Communications Volume: 7 Article Number: 13574 Published: DEC 2 2016

上海超级计算中心用户中国科学院上海应用物理研究所水科学与技术研究室高焱研究员课题组与合作者提出了一个用于解释配体金纳米团簇的结构稳定性及其生长机制的普适模型GUM(Grand Unified Model)。众所周知，“八电子规则”是现代化学的理论基础，是理解和解释主族元素分子结构稳定性和物化性质的基石。随后发展的“十八电子规则”和“Wade规则”在20世纪也取得巨大成功，成为理解过渡金属分子和小尺寸团簇的基本化学理论。但随着近20年来纳米技术的巨大进展，传统化学理论是否在纳米尺度仍然适用引起人们广泛关注。特别对于金属纳米团簇，迄今人们普遍认为其是由一个一个金属原子随机生长而来，并不存在一个普适的化学规则。

长期以来，配体金纳米团簇因其独特的结构和物理化学性质以及在催化、纳米技术及生物医学等领域广泛的应用前景得到了广泛关注。近10年来，随着一系列大尺寸的配体金纳米团簇被成功结晶，人们试图提出理论模型解释其结构稳定性，但并未获得普遍成功。本文作者建立了一个普适模型，实现了对迄今为止报道的所有71个配体金纳米团簇的基本理解。该模型认为每个金原子有三个不同的电子价态，三个或者四个金原子可以满足2电子的满壳层电子态，从而构成基本的结构单元(三角形 $\text{Au}_3$ 和四面体 $\text{Au}_4$ )。当这些基本单元堆积在一起时，就形成了结构各异的稳定的金纳米团簇。该模型的建立，有力的证明了金纳米团簇的结构和生长遵循着基本的化学规律，从而为进一步理解金以外的金属纳米团簇打开了新的思路。由于这个模型非常类似于粒子物理中的基本粒子模型(即夸克有不同的“味”，三个夸克构成质子和中子，并进一步构成原子核和原子)，所以被称为“大统一模型”(Grand Unified Model)。研究人员利用该模型预测了一系列高度稳定的金团簇，从而为实现基于化学规则的纳米金团簇可控合成提供了基础。



大统一模型揭示配体金纳米团簇生长机制

论文题目：Janus effect of antifreeze proteins on ice nucleation

用户来源：中国科学院上海应用物理研究所

论文来源：PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA Volume: 113 Issue: 51 Pages: 14739-14744 Published: DEC 20 2016

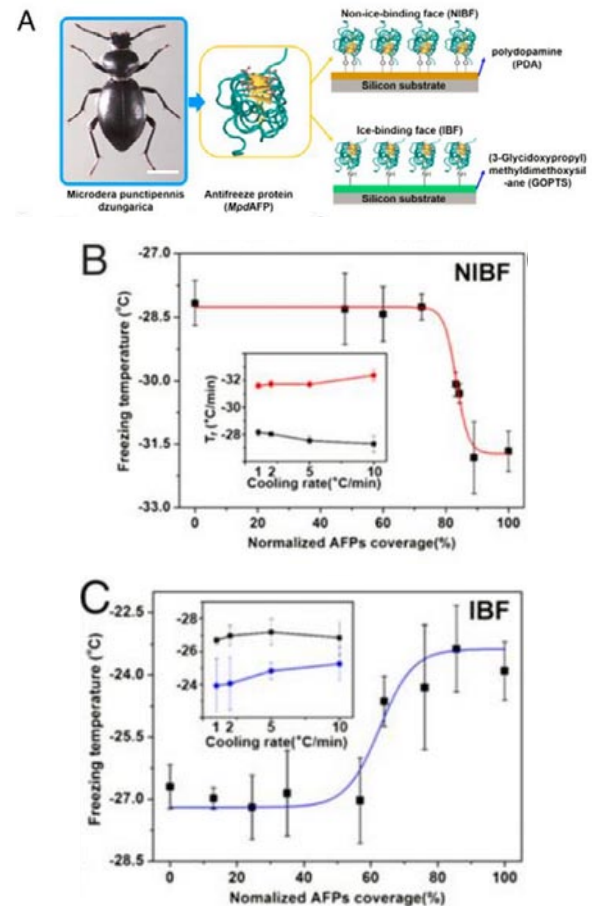
抗冻蛋白是生活在寒冷区域的生物经过长期自然选择进化产生的一类用于防止生物体内结冰而导致生物体死亡的功能性蛋白质。对于抗冻蛋白抗冻机制的研究有助于揭开冰晶成核、生长和冰晶形貌调控的分子层面的机理。因而，自上世纪60年代首次发现抗冻蛋白以来，科研人员对这类蛋白的抗冻机制进行了近半个世纪的研究。但是，科研人员对抗冻蛋白在调控冰晶成核的机制一直有争议，即有

些科研人员认为抗冻蛋白能促进冰核的形成，而另一些科研人员认为抗冻蛋白可以抑制冰核的生成。

上海超级计算中心用户中国科学院上海应用物理所方海平研究员与合作者根据抗冻蛋白的冰结合面 (ice-binding face) 和非冰结合面 (non-ice-binding face) 具有截然不同官能团的特性，将抗冻蛋白定向固定于固体基底，选择性地研究了抗冻蛋白冰结合面与非冰结合面对冰核形成的影响。研究表明抗冻蛋白的不同面对冰核的形成表现出完全相反的效应：冰结合面促进冰晶成核，而非冰结合面抑制冰晶成核。

本文通过分子动力学模拟进一步研究了抗冻蛋白的冰结合面和非冰结合面界面水的结构，发现了冰结合面上羟基和甲基有序间隔排列使得冰结合面上形成类冰水合层，从而促进冰核生成；而非冰结合面上存在的带电荷侧链及疏水性侧链，使得非冰结合面上的界面水无序，从而抑制冰核形成。揭示了抗冻蛋白对冰成核“Janus”效应分子层面的机制。

该研究大大加深了人们对抗冻蛋白分子层面防冻机制的理解，同时对仿生合成防覆冰材料和低温器官保存材料有着重要的指导意义。



抗冻蛋白的冰结合面和非冰结合面对冰核形成的“Janus”效应

论文题目：Probing Carrier Transport and Structure-Property Relationship of Highly Ordered Organic Semiconductors at the Two-Dimensional Limit

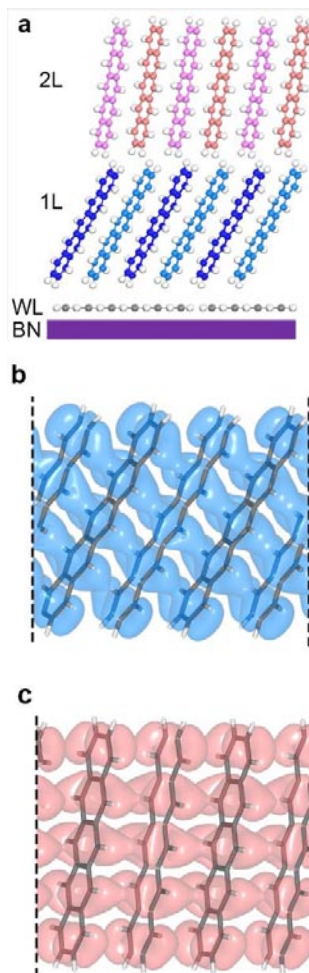
用户来源：中国人民大学

论文来源：PHYSICAL REVIEW LETTERS  
Volume: 116 Issue: 1 Article Number: 016602 Published: JAN 5 2016

上海超级计算中心用户中国人民大学物理学系季威教授与合作者在二维有机半导体的精确可控外延生长、输运性质调控和电子器件研究中取得突破性进展，实现了分子尺度二维有机材料电子学性质精确调控。以晶体管为主的电子器件是当代信息社会的基础。目前，晶体管尺寸正根据摩尔定律的预测逐渐逼近其物理极限，由此产生了诸多问题和困难。二维层状材料在构筑电子器件时具有超薄沟道、高迁移率等特点，是最有希望给电子学带来新变革的材料之一。目前，二维层状材料的研究主要集中在石墨烯等无机原子晶体，而二维有机半导体兼顾了有机材料低成本、多选择、高柔性等特点，正得到人们越来越多的关注。有机晶体管的电荷传输过程发生在界面附近的几个分子层内。因此，精确制备少层有机晶体是在分子尺度上理解和调控电荷输运性质的基础，对于有机电子学具有重要的意义。

本文深入地研究了一种典型有机半导体——并五苯分子在六方氮化硼衬底上的范德华外延生长，实现了高质量、层数可控的1-3层并五苯外延薄膜。虽然薄膜的厚度接近二维极限，但其仍展现出在有机单晶材料中才具有的各向异性、高迁移率、能带型输运等本征特性。发现了分子薄膜从1层(图a中WL)到3层(图a中2L)的结构相变，即每一层的结构都不尽相同。在这结构不同的三层薄膜中还发生了一系列绝缘——跃迁输运——能带输运的相变过程，这是首次直接观测到电荷传输层分子堆积结构与电子输运性质之间的内在关联。计算的结果发现：在两层薄膜中，由于1层与2层分子薄膜之间的相互作用

用减弱且分子间相互作用的加强，2层薄膜中的分子与基底有61度的夹角，使得分子间有了波函数交叠。计算结果同时显示：在第3层薄膜中，分子间相互作用进一步加强，最上层分子的晶体结构已经与大块分子晶体十分接近了，分子间存在连贯的波函数交叠。基于上述发现，本文还利用并五苯外延薄膜制备了高性能的场效应晶体管，其性能可以与有机单晶场效应晶体管媲美。



图a：并五苯结构侧视图

图b：第2层分子间成键态波函数实空间分布

图c：第3层分子间成键态波函数实空间分布

#### 重点论文列表：

1. Extraordinarily Strong Interlayer Interaction in 2D Layered  $\text{PtS}_2$

By: Zhao, Yuda; Qiao, Jingsi; Yu, Peng; et al.

ADVANCED MATERIALS Volume: 28 Issue: 12 Pages: 2399-2407 Published: MAR 23 2016

2. High - Electron - Mobility and Air - Stable 2D Layered  $\text{PtSe}_2$  FETs.

By: Zhao, Yuda; Qiao, Jingsi; Yu, Zhihao; et al.

ADVANCED MATERIALS (Deerfield Beach, Fla.) Published: 2016 - Nov - 25 (Epub 2016 Nov 25)

3. Edge - Modified Phosphorene Nanoflake Heterojunctions as Highly Efficient Solar Cells

By: Hu, Wei; Lin, Lin; Yang, Chao; et al.



- NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 3 Pages: 1675 - 1682 Published: MAR 2016
4. Intrinsic Two - Dimensional Organic Topological Insulators in Metal - Dicyanoanthracene Lattices  
By: Zhang, L. Z.; Wang, Z. F.; Huang, B.; et al.
- NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 3 Pages: 2072 - 2075 Published: MAR 2016
5. Shape Evolution of Metal Nanoparticles in Water Vapor Environment  
By: Zhu, Beien; Xu, Zhen; Wang, Chunlei; et al.
- NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 4 Pages: 2628 - 2632 Published: APR 2016
6. Intrinsic Ferroelasticity and/or Multiferroicity in Two - Dimensional Phosphorene and Phosphorene Analogues  
By: Wu, Menghao; Zeng, Xiao Cheng
- NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 5 Pages: 3236 - 3241 Published: MAY 2016
7. Ferroelectricity in Covalently functionalized Two - dimensional Materials: Integration of High - mobility Semiconductors and Nonvolatile Memory  
By: Wu, Menghao; Dong, Shuai; Yao, Kailun; et al.
- NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 11 Pages: 7309 - 7315 Published: NOV 2016
8. New Ferroelectric Phase in Atomic - Thick Phosphorene Nanoribbons: Existence of in - Plane Electric Polarization  
By: Hu, Ting; Wu, Haiping; Zeng, Haibo; et al.
- NANO LETTERS Volume: 16 Issue: 12 Pages: 8015 - 8020 Published: DEC 2016
9. High Catalytic Activity and Chemoselectivity of Sub - nanometric Pd Clusters on Porous Nanorods of CeO<sub>2</sub> for Hydrogenation of Nitroarenes  
By: Zhang, Sai; Chang, Chun - Ran; Huang, Zheng - Qing; et al.
- JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 138 Issue: 8 Pages: 2629 - 2637 Published: MAR 2016
10. Two - Dimensional Phosphorus Porous Polymorphs with Tunable Band Gaps  
By: Zhuo, Zhiwen; Wu, Xiaojun; Yang, Jinlong
- JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 138 Issue: 22 Pages: 7091 - 7098 Published: JUN 8 2016
11. Catalytically Active Rh Sub - Nanoclusters on TiO<sub>2</sub> for CO Oxidation at Cryogenic Temperatures  
By: Guan, Hongling; Lin, Jian; Qiao, Botao; et al.
- ANGEWANDTE CHEMIE - INTERNATIONAL EDITION Volume: 55 Issue: 8 Pages: 2820 - 2824 Published: FEB 18 2016
12. A Graphene Composite Material with Single Cobalt Active Sites: A Highly Efficient Counter Electrode for Dye - Sensitized Solar Cells  
By: Cui, Xiaojun; Xiao, Jianping; Wu, Yihui; et al.
- ANGEWANDTE CHEMIE - INTERNATIONAL EDITION Volume: 55 Issue: 23 Pages: 6707 - 6711 Published: JUN 1 2016
13. Mechanistic Studies on the Stereoselectivity of the Serotonin 5 - HT1A Receptor  
By: Yuan, Shuguang; Peng, Qian; Palczewski, Krzysztof; et al.
- ANGEWANDTE CHEMIE - INTERNATIONAL EDITION Volume: 55 Issue: 30 Pages: 8661 - 8665 Published: JUL 18 2016
14. The Nanoparticle Size Effect in Graphene Cutting: A “ Pac - Man ” Mechanism  
By: Qiu, Zongyang; Song, Li; Zhao, Jin; et al.
- ANGEWANDTE CHEMIE - INTERNATIONAL EDITION Volume: 55 Issue: 34 Pages: 9918 - 9921 Published: AUG 16 2016
15. Towards visible - light water splitting Photocatalysts: Band engineering of two - dimensional A(5)B(4)O(15) perovskites  
By: Wu, Dihua; Zhang, Xu; Jing, Yu; et al.
- NANO ENERGY Volume: 28 Pages: 390 - 396 Published: OCT 2016
16. Microscopic mechanism for light - induced degradation of silicon solar cell in water vapor environment

By: Yang, Jinrong; Fang, Haiping; Gao, Yi

NANO ENERGY Volume: 30 Pages: 614 - 620 Published: DEC 2016

17. Low charge overpotential of lithium - oxygen batteries with metallic Co encapsulated in single - layer graphene shell as the catalyst

By: Tu, Yunchuan; Li, Haobo; Deng, Dehui; et al.

NANO ENERGY Volume: 30 Pages: 877 - 884 Published: DEC 2016

18. Mechanistic Insights on Ternary  $Ni_{2-x}Co_xP$  for Hydrogen Evolution and Their Hybrids with Graphene as Highly Efficient and Robust Catalysts for Overall Water Splitting

By: Li, Jiayuan; Yan, Ming; Zhou, Xuemei; et al.

ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS Volume: 26 Issue: 37 Pages: 6785 - 6796 Published: OCT 4 2016

19. Semi - metallic  $Be_5C_2$  monolayer global minimum with quasi - planar pentacoordinate carbons and negative Poisson ' s ratio

By: Wang, Yu; Li, Feng; Li, Yafei; et al.

NATURE COMMUNICATIONS Volume: 7 Article Number: 11488 Published: MAY 2016

20. A grand unified model for liganded gold clusters

By: Xu, Wen Wu; Zhu, Beien; Zeng, Xiao Cheng; et al.

Nature Communications Volume: 7 Article Number: 13574 Published: DEC 2 2016

21. Janus effect of antifreeze proteins on ice nucleation

By: Liu, Kai; Wang, Chunlei; Ma, Ji; et al.

PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA Volume: 113 Issue: 51 Pages: 14739 - 14744 Published: DEC 20 2016

22. Probing Carrier Transport and Structure - Property Relationship of Highly Ordered Organic Semiconductors at the Two - Dimensional Limit

By: Zhang, Yuhan; Qiao, Jingsi; Gao, Si; et al.

PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 116 Issue: 1 Article Number: 016602 Published: JAN 5 2016

23. Strong Intrinsic Spin Hall Effect in the TaAs Family of Weyl Semimetals

By: Sun, Yan; Zhang, Yang; Felser, Claudia; et al.

PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 117 Issue: 14 Article Number: 146403 Published: SEP 30 2016

24. Unexpectedly Enhanced Solubility of Aromatic Amino Acids and Peptides in an Aqueous Solution of Divalent Transition - Metal Cations

By: Shi, Guosheng; Dang, Yaru; Pan, Tingting; et al.

PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 117 Issue: 23 Article Number: 238102 Published: DEC 2 2016