



面向世界科技前沿, 面向国家重大需求, 面向国民经济主战场, 率先实现科学技术跨越发展,
率先建成国家创新人才高地, 率先建成国家高水平科技智库, 率先建设国际一流科研机构。

——中国科学院办院方针



官方微博



官方微信

首页 组织机构 科学研究 人才教育 学部与院士 资源条件 科学普及 党建与创新文化 信息公开 专题

搜索

首页 > 科研进展

合肥研究院在团簇结构调控和性能研究中取得进展

文章来源: 合肥物质科学研究院 发布时间: 2018-04-04 【字号: 小 中 大】

我要分享

近日, 中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员伍志鲲带领的课题组, 与中国科学技术大学教授杨金龙带领的课题组合作, 在金属纳米团簇的结构调控与性能研究方面取得进展, 相关研究成果以Kernel Tuning and Nonuniform Influence on Optical and Electrochemical Gaps of Bimetal Nanoclusters为题, 发表在《美国化学会志》上。

在前期, 伍志鲲课题组已从三个方面对金属纳米团簇进行结构调控: 团簇整体结构、团簇局部结构、团簇在晶体中的排列结构(见图1)。着眼于团簇的组成不变而改变结构, 第一次获得了金属纳米团簇的构造同分异构体(见图1a); 着眼于团簇的电子结构调控, 首次得到金纳米团簇的18电子超原子结构; 着眼于团簇在晶体中的排列结构调控, 近来一种新的最密排列方式6HLH排列被发现(见图1b)。由于金属纳米团簇可看作由内核(kernel)和外壳保护性长钉(staples)两部分组成(见图1c), 因而至少可从这两个局域结构入手对团簇进行调控; 着眼于内核不变改变外面的保护性长钉, 得到同核异钉结构, 还可对团簇进行“削皮”处理。基于内核结构的调控, 实现fcc结构与非fcc结构的双向转换; 获得fcc与非fcc准双排列的结构。在保持金属框架大致相同的前提下, 可控增加或减少内核金属原子是富有挑战性的课题, 这是因为内核原子外面有长钉保护, 没有与外界直接接触, 因而对其实施精准调控比较困难, 在国际上也未有类似报道。

近日, 博士生何丽忠等通过改换位阻较大的配体, 成功地在 $Ag_{24}Pt$ (配体省略, 下同)的二十面体内核两端各镶上一个银原子, 得到一个新的结构 $Ag_{26}Pt$ (见图1c), 这种结构的调控在一个很宽的光吸收范围内(至少400-1400nm)没有导致光谱形状的明显改变, 却导致电化学能隙的显著变化($\sim 0.4V$) (见图2a), 这种光学能隙和电化学能隙显著不同步的变化非常罕见。究竟什么原因导致这种现象? 可能是由于这两个团簇电子结构类似但电荷不同, 导致它们与电极间的电子传递难易不同, 从而引发上述现象。杨金龙课题组从理论上给予支持: 计算表明这两个团簇具有相似的最高占据-最低未占分子轨道(HOMO_s-LUMO_s)分布(见图2b), 却具有显著不同的自然布居分析(NPA)电荷(相差0.78307e)。

该工作的意义在于首次实现了富有挑战性的金属团簇内核精准调控, 暗示了新的调控团簇结构的策略, 增进了对团簇结构和性能多样性的理解, 对团簇结构和性能的关联有重要的启发意义, 相关研究成果已被《物理化学学报》作为亮点工作报道。

研究工作得到国家自然科学基金、中科院合肥物质科学研究院十三五重点规划等的支持。

论文链接: [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#) [6](#) [7](#) [8](#) [9](#) [10](#) [11](#)

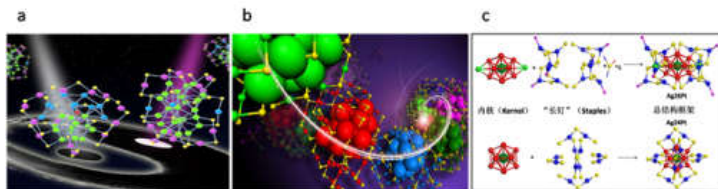


图1. (a)通过调控团簇的整体结构, 得到一对构造同分异构体; (b)通过调控晶体中的排列结构, 发现一种新的最密排列方式—6HLH排列; (c)在外层(staples)金属原子种类和数目不变的情况下, 在团簇内核两端各增加一个金属原子。

热点新闻

国科大举行2018级新生开学典礼

中科院党组学习贯彻习近平总书记在全国...
中科院党组学习研讨药物研发和集成电路...
中国科大举行2018级本科生开学典礼
中科院“百人计划”“千人计划”青年项...
中国散裂中子源通过国家验收

视频推荐



【新闻联播】“率先行动”计划 领跑科技体制改革



【中国纪录片】筑梦路上 (第三十集)——创新驱动

专题推荐



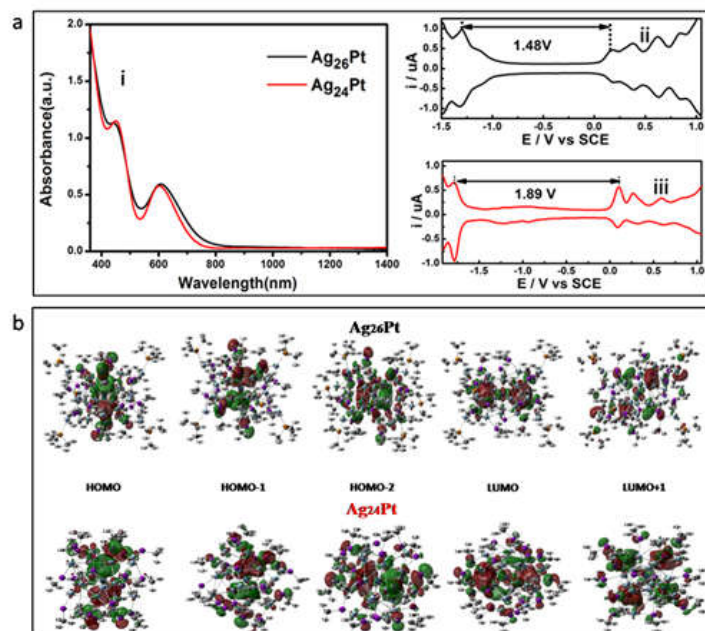


图2. (a) 团簇 Ag_{26}Pt 和 Ag_{24}Pt 的紫外-可见-近红外吸收和差分脉冲伏安图；(b) 通过DFT计算的 Ag_{26}Pt 和 Ag_{24}Pt 的HOMOs-LUMOs分布。

(责任编辑：侯茜)



© 1996 - 2018 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号 联系我们
地址：北京市三里河路52号 邮编：100864