

## 科研动态

现在位置: [首页](#)>[新闻动态](#)>[科研动态](#)

上海硅酸盐所人工晶体中心...  
 上海硅酸盐所硅酸钇镧内炼...  
 上海硅酸盐所承办第97期交...  
 上海硅酸盐所举办第四期“...  
 npj Computational Materi...  
 上海硅酸盐所在新型铯铝石...  
 上海硅酸盐所举办第三期“...  
 上海硅酸盐所召开国家重点...  
 乌克兰科学院晶体所Roman...  
 上海硅酸盐所人工晶体中心...  
 上海硅酸盐所举办第二期“...  
 中国科学院无机功能材料与...  
 中国科学院无机功能材料与...  
 上海硅酸盐所在有机电极材...  
 上海硅酸盐所科研人员参加...

## 上海硅酸盐所研究成果首次在npj Computational Materials上发表——新型半导体纳米材料实现拉曼信号增强 $10^7$ 倍

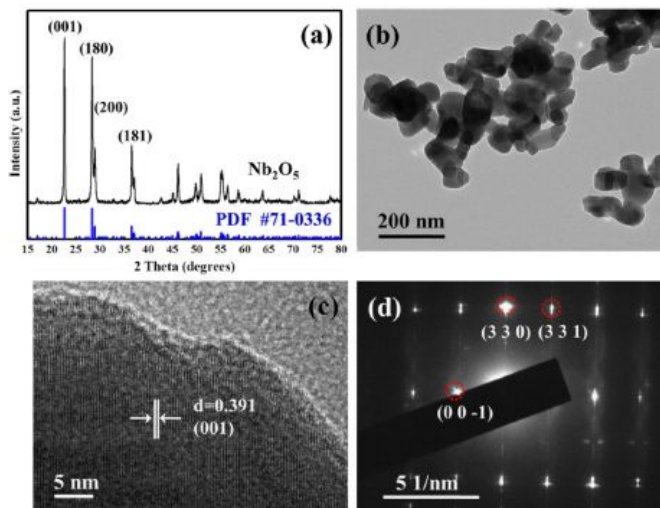
2018-01-19 16:20:27 | 【小中大】 【打印】 【关闭】

3月15日,中国科学院上海硅酸盐研究所杨勇研究员、黄政仁研究员、刘建军研究员等完成的研究论文“Niobium pentoxide: a promising surface-enhanced Raman scattering active semiconductor substrate”首次在研究所与自然出版集团合作创办的*npj Computational Materials*英文刊上发表(*npj Computational Materials*, 3:11 (2017))。他们报道了一种能检测痕量生物染料分子的新型半导体材料。

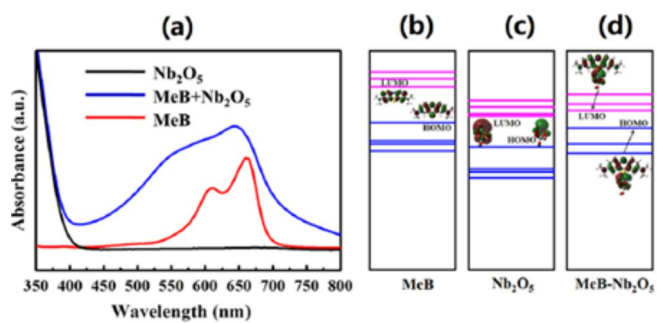
粗糙衬底上的纳米尺寸效应能增加光场,利用这种增强的光学信号来检测特定分子的技术叫表面增强拉曼光谱(SERS)技术。但之前只有少数几种贵金属材料,如金、银等,才能将信号强度提高到实用水平。该论文作者发现 $Nb_2O_5$ 可以显著增强生物医药领域染料分子的拉曼信号,高灵敏检测亚甲基蓝、甲基紫以及甲基蓝等染料分子。在633和780 nm光激发下,对亚甲基蓝染料检测时,其拉曼信号增强了 $10^7$ 倍以上,可与具有“热点效应”的金属纳米结构相媲美,染料分子检测下限可达 $10^{-6}$  mol/L,是目前发现的灵敏度最高的SERS半导体衬底材料。通过密度泛函理论和有限元计算表明, $Nb_2O_5$ 如此之高的SERS活性,可归因于光诱导电荷转移的化学增强机制和电磁场增强机制的协同作用。在分子 $Nb_2O_5$ 体系中, $Nb_2O_5$ 和表面吸附的染料分子共同产生了新的分子最高占据轨道和最低未占据轨道,因此在长波长的激发光下,电子仍能够轻易跃迁。除此之外,电磁增强也为增强因子贡献了两个数量级。该研究表明, $Nb_2O_5$ 纳米粒子作为一种新型半导体SERS材料,有望取代贵金属在生物相关领域发挥巨大的应用潜力。

npj Computational Materials英文刊关注于计算与实验相结合的研究结果,发表计算预测-试验验证、计算指导实验、计算与实验相结合、以及运用计算理论或模型解释新材料性能与机制等方面的研究工作。该刊首次发表的这一成果,以发现 $Nb_2O_5$ 半导体衬底材料具有最高的SERS灵敏度为实验基础,从计算模拟的角度对该材料所具有的优异性能做出了理论上的解释。上海硅酸盐所研究成果中有诸多新材料、新性能的重要发现,通过与理论、计算方法的结合,能够对新材料结构与性能的认识更加深入,将能极大地深化原有成果的意义。此类研究工作是该刊的报道对象。

npj Computational Materials创刊已进入第3年,出版到第9期,目前共发表了46篇Article、Review article、Brief communication等,总下载量近19万次,平均下载量4000次以上,已有数篇下载上万次,最高达3万次。目前可查到CrossRef数据库引用次数达114次,并正在快速上升。去年年底自然出版集团已将前2年发表的35篇文章数据提交JCR数据库,申请SCI收录。



$Nb_2O_5$ 纳米粒子的XRD图谱、透射与高分辨形貌,及选区电子衍射图



纯 $\text{Nb}_2\text{O}_5$ 粉末、吸附甲基蓝的 $\text{Nb}_2\text{O}_5$ 粉末和 $\text{MeB}$ 水溶液的紫外-可见光吸收光谱(a), 及他们的分子分子轨道 (b-d)



版权所有 中国科学院上海硅酸盐研究所 沪ICP备05005480号-1  
长宁园区地址：上海市长宁区定西路1295号 电话：86-21-52412990 传真：86-21-52413903 邮编：200050  
嘉定园区地址：上海市嘉定区和硕路585号 电话：86-21-69906002 传真：86-21-69906700 邮编：201899

