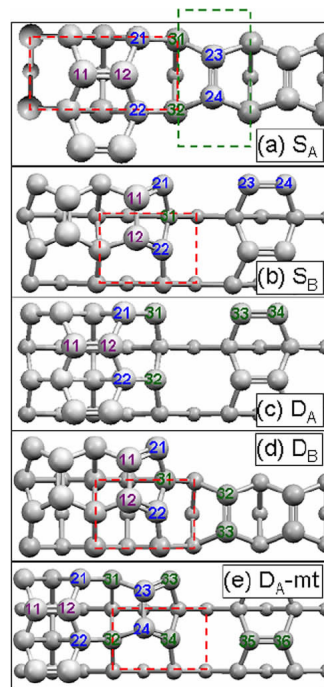


## 科研进展\*

### 金刚石(001)表面的台阶结构研究获新发现

物理所杨洪新以及徐力方、方忠、顾长志研究员与美国伦斯勒理工学院的张绳百教授合作,用第一原理深入地研究了清洁的金刚石(001)表面的台阶结构,通过计算台阶形成能,发现台阶结构比  $2 \times 1$  再构的平面更稳定。进一步研究发现,半导体表面一个最普遍存在的现象是发生晶格再构,它导致了表面具有各种不同于体内的物理性质。正是由于表面再构在基础和应用研究方面具有的重要性,几十年来人们做了大量的工作。能否提出一个简单的理论,从而在研究一些典型的半导体表面再构时给出一定的规律,这是人们长期追求的目标。基于此,他们对碳元素提出了一个用来探索其再构的计键规则 (Bond-Counting Rule),并且应用于金刚石(001)台阶面的再构,与计算结果无一例外的一致。更深入的分析发现,稳定的台阶结构所引起的扭曲  $\sigma$  键比平面  $2 \times 1$  再构要少,因而导致其更稳定。这项新的工作发现了金刚石(001)表面台阶化的本质,计算结果和目前国外其它小组 STM 观测的实验结果完全一致,指出了金刚石与硅表面台阶化的根本不同,深入认识了金刚石表面台阶的性质,为利用金刚石表面制作各种高可靠性器件奠定了基础。相关结果发表在 2008 年 1 月 14 日出版的 *Phys. Rev. Lett.* 上。



### 成功制备出全金属纳米结构的逻辑电路

自旋极化电流与天然存在的磁畴壁间的角动量交换打开了磁与电之间联系的新通道。不需要外加磁场,仅用电流来操纵材料的磁化状态,克服了磁场难以屏蔽的困难,为自旋逻辑器件高度集成和信号高可靠性处理提供了可能。物理所微加工实验室顾长志研究组与表面物理国家重点实验室夏柯研究组合作,通过铁磁金属因瓦合金纳米点接触结构的设计和纳米加工,在认真研究电流驱动畴壁与纳米点接触电阻关系的基础上,设计并制作出基于畴壁运动的逻辑“非门”电路。这种逻辑电路在室温条件下直接用电信号驱动,并且使用电信号探测,具有集成度高、成本低、兼容性好和低功耗的特点,能够在磁性材料的居里温度以下正常工作( $600^{\circ}\text{C}$ ),并与现今的 CMOS 平面工艺完全兼容。由于电路以全金属结构实现,能够获得比现今的半导体电路更高的载流子密度和更细的线宽,为新型高密度纳米电路的研制奠定了基础。相关工作发表在 2008 年 2 月 3 日出版的 *Nature Nanotechnology* 上。

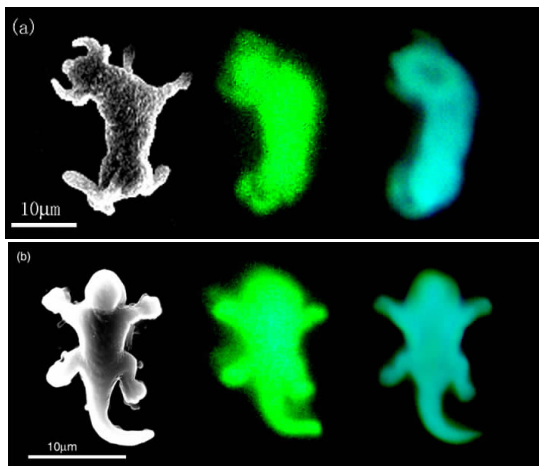
\* 收稿日期:2008 年 3 月 5 日

## 半导体硅重构表面相及其相变研究

硅是推动人类文明大步前进的现代计算机技术的核心,可能在未来的计算机技术等方面起到关键作用,所以硅的研究历来就是国际重大研究领域。半导体表/界面是未来关键器件中复合结构的基础,Si(111)-7x7 重构表面相又是半导体重构表面的代表,因此 Si(111)-7x7 重构表面相及其相变动力学现象的研究,一直是一个国际重大课题。物理所刘邦贵研究员及其博士生徐野川在系统地分析了大量实验事实的基础上,提出用一个相场模型来描述这个半导体重构表面及其相变动力学现象,其模型要点是,相变过程中 7x7 岛衰变时有两个速度不同的过程,快过程反应 7x7 重构表面相的基本特征的变化,慢过程描述随后的大范围原子驰豫。他们的相场模拟结果与 LEEM 实验完全一致,说明该模型抓住了这个相变过程的要点。这项研究对 Si(111)-7x7 重构表面相及其相变动力学现象的研究取得了满意的结果,该方法应该可以用于其它半导体重构表面相及其相变研究,主要结果发表在 2008 年 2 月 8 日出版的 *Phys. Rev. Lett.* 上。

## 纳米复合材料三维微纳结构加工研究取得重要进展

受传统光学理论衍射极限的限制,利用普通光刻技术难以进行纳米尺度三维加工。理化所段宣明研究员研究组,自主研制成功“纳米光子学超精细加工系统”。他们与国内外大学、研究机构合作,利用近红外波长的飞秒激光直写技术,通过对加工方法的深入研究,实现了纳米尺度的加工分辨率,受到国内外的广泛关注。同时开展了加工材料的功能化及纳米结构性能研究工作,在利用含有荧光染料的材料所加工的三维纳米线结构中观察到了激射现象。提出了利用含有纳米材料前驱体组分制备的光刻胶进行三维微纳结构加工,再通过原位合成



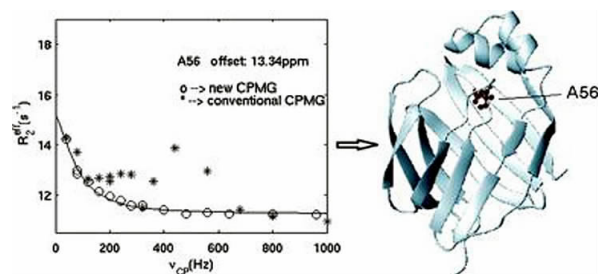
纳米复合材料的方式实现纳米复合材料的三维加工思路,先后制备出二氧化钛纳米复合材料及硫化镉纳米复合材料的三维光子晶体,并观察到纳米复合材料生成可增强光子带隙效应。通过调节光刻胶中的交联剂量控制光固化后的高分子交联网络密度,实现了原位合成的硫化镉纳米粒子的尺寸控制,所获得的纳米复合材料的荧光发光波长在 450—530 纳米之间可调。在上述工作基础上,利用上述纳米粒子尺寸可控原位合成技术与多光子三维微纳结构加工技术,制备出包括具有多种颜色荧光的细胞尺寸三维微米牛等多种三维微结构,并发现在尺寸较小部位具有较强的发光强度。相关论文发表在 2008 年 1 月 30 日出版的 *Adv. Mater.* 杂志网络版。2 月 21 日出版的 *Nature* 杂志在 Research Highlights 栏目以 Lithography: Luminous Lizards 为题报道了该研究团队利用多光子纳米加工技术进行纳米复合材料三维微纳结构加工研究取得的进展。文章指出,上述动物造型在原理上证明:此方法可被用于制备微型发光器件。

## 超疏水功能涂层材料研究新进展

兰州化学物理所张招柱和刘维民研究组,利用简便、经济、实用的复合有机涂层材料制备方法于铝、铜、钢等金属材料表面,构筑出了具有微/纳米结构的超疏水表面功能涂层材料,解决了超疏水涂层材料在工程应用中构筑方法复杂、工程实用困难的关键技术问题。研究组利用聚四氟乙烯和聚苯硫醚复合聚合物采用一步成膜法构筑出了表面同时具备低表面能疏水基团及多孔网络微纳米结构的超疏水涂层。该涂层具有优异的超疏水性能、与基材高的结合强度、优异的耐酸碱介质性能、良好的耐高低温及长期稳定性能,为超疏水有机涂层材料的工程应用奠定了科学和技术基础。该研究结果发表在近期出版的 *Adv. Mater.* 上。

## 蛋白质相互作用动力学的核磁共振分析方法研究取得新进展

蛋白质相互作用动力学的研究有助于系统地了解蛋白质结构与功能的关系,并为新药靶点的发现和药物设计提供理论和实验基础。在这方面的研究中,核磁共振(NMR)技术具有独特的优越性,是目前研究溶液中蛋白质等生物大分子的三维结构、主链和侧链运动



特征及其相互作用和功能(构效关系)的最有效的手段。武汉物理与数学所与国立新加坡大学合作,利用 NMR 技术,在微秒—毫秒时间范围的动力学测定方法方面取得新进展,提出了一种新的相位循环机制,能够有效地消除多重自旋回波(CPMG)中偏置的共振信号重聚不完全等问题,从而有效降低频率偏置、射频不均匀,标量耦合,交叉弛豫等效应的影响,使蛋白质毫秒量级的动力学测定精度大为提高,为慢交换的准确测定提供了新的技术。研究成果发表在 *J. Am. Chem. Soc.* 上。

## 模拟生物分子螺旋结构取得新进展

在自然界中,许多天然生物大分子都为螺旋或多螺旋结构。近年来,设计合成人工折叠螺旋化合物来模拟 DNA 和蛋白质等生命物质的结构和性质有十分重要的意义,是超分子化学领域中一个富于挑战性的研究课题。化学所光化学学院重点实验室江华课题组与欧洲化学生物学所(法国)的科研人员合作,在通过片段加倍合成法,成功地合成了分别含有 2,4,8 个喹啉酰胺结构单元的寡聚物。这些寡聚物通过分子内 F-NH 和 N-NH 氢键自组装成为单、双螺旋和四螺旋超分子体系。研究表明无论是在晶体中,还是在溶液中,这些多肽寡聚物都呈现相同的螺旋结构。研究人员还发现单螺旋必须通过增加螺旋间的距离才能够组装成为双螺旋超分子体系,并在此基础上提出了多螺旋结构形成的弹簧伸展原理。这和短杆菌肽(Gramicidin D)有着十分相似的自组装机理。这些研究结果为探索合成新型人工合成折叠分子及其超分子结构提供了新途径。相关研究工作发表在近期出版的 *Angew. Chem. Int. Ed.* 上。论文被接受后不久, *Angew. Chem. Int. Ed.* 把该论文选为“Hot Paper”。



中国科学院



## 我国发现世界上最小的树栖翼龙化石

古脊椎动物与古人类所研究员汪筱林、周忠和研究员与巴西科学院的两位科学家合作研究,报道了我国辽西热河生物群发现的一件新的翼龙化石。这只翼龙最引人注目的是它娇小的体态,双翼展开仅有 25 厘米,大致相当于一只燕子的大小,是目前世界上已知最小的翼龙化石之一。在此之前,仅在德国发现过一件更小的翼龙化石,翼展约 18 厘米,但研究表明这件化石是一个出生不久的“新生儿”。而此次发现的翼龙化石,从发育程度看,属于年轻个体,形态基本成熟。这件翼龙化石的科学价值不仅仅在于其个体小,更重要的是它的树栖生活习性,而且是那些白垩纪大型翼龙的祖先类群。它所蕴涵的独特形态特征和生活方式,为揭开翼龙这类“空中霸主”的神秘面纱提供了重要的化石证据。研究论文发表在 2008 年 2 月 12 日出版的 *PNAS* 上,近期被 *Nature China* 选为来自中国大陆和香港的突出科学研究成果,论文的研究亮点已被刊登在该网站上(相关图片请见封面)。



## 烟碱乙酰胆碱受体门控机制研究取得进展

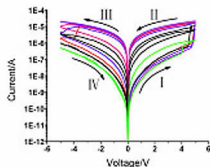
上海药物所蒋华良研究员与大连理工大学工程力学系王希诚教授及联合培养的博士生刘信力,对具有重要生理作用和临床研究意义的烟碱乙酰胆碱受体(nAChR)门控机制的力学基础进行了分子动力学模拟研究。这一研究模拟了 nAChR 在细胞膜中的动力学行为,模拟体系包含蛋白质、磷脂双层和大量的水分子组成的复杂生物大分子系统,体系超过 25 万个原子。对系统进行了长达 30 纳秒的常规动力学模拟、简正分析和非平衡分子动力学模拟,在原子水平上观察到了离子通道的关闭和张开的全过程,揭示了该受体通道的门控机制,为神经科学基础研究和抗神经退行性疾病药物发现提供了重要线索。在研究过程中,他们还首次发展了用于离子通道动力学行为研究的拉伸旋转分子动力学方法。该研究结果发表在 *PLoS Computational Biology* 2008 年第 1 期上,并且被选为该期的封面文章。这一研究工作也为计算力学在生命科学中的应用提供了一个较好的范例。

## 国内首个 256 位分子存储器电路研制成功

分子电路是指在分子层次上构筑的电子器件及其集成电路,是后摩尔时代接替硅基电路最受关注的方向之一。电阻转变型双稳态材料的存储特性在信息存储以及存储器方面有着非常广阔的应用前景,是一种天生的存储材料。分子存储器是利用有机分子的电学



256 位分子存储器的原子力显微镜照片



分子存储器的电学性能

双稳态特性实现存储功能的,分子存储器要实现高密度存储,就需要有效的降低特征尺寸,即存储点的周期。微电子所纳米加工与新器件集成技术实验室,在深入研究不同转变机理的各种电阻转变型双稳态材料的基础上,基于一次电子束光刻和二次 X 射线曝光的具有完全知识产权的混合光刻技术,成功研制了国内首个 256 位分子存储器电路,该存储器电路的特征尺寸达到 250nm,电学性能优异,实验结果表明分子存储器的分子层没有受到损伤。该分子存储器电路的研制成功,为我国分子电路的高集成度、高速度和低功耗的实现奠定了重要基础,有力推动了我国分子电子学的发展。

### 新型有机半导体材料研究取得系列进展

化学所有有机固体院重点实验室研究人员以四氯苝酰亚胺为原料通过 Stille 反应合成得到了双噻吩掺杂的苝酰亚胺衍生物,同时发现这一类化合物在固态的自组装行为可以通过客体分子进行调控。相关研究成果作为封面文章发表在 *Chem. Comm.* 上。在此工作基础上,研究人员通过进一步研究发现了一种高效活化四氯苝酰亚胺的过渡金属体系,利用该体系通过偶联反应将两分子苝酰亚胺沿其分子短轴结合在一起,合成出全共轭的二并苝酰亚胺类化合物。这类化合物在可见光范围有宽谱吸收,电化学研究表明其优良的电子受体特性,有望作为新型的电子传输材料。相关工作已申请中国专利,初步结果发表在 *J. Am. Chem. Soc.* 上。在 p 型有机半导体材料方面,研究人员将稠环芳烃体系和噻吩功能单元有机地结合起来,设计合成出基于硫杂花的小分子有机功能分子体系,利用硫杂花功能分子制备了薄膜及微纳晶场效应管器件并测试了基本性能,发现噻吩单元的引入导致功能分子具有非常独特的双通道超结构,多重超分子自组装作用的协同效应导致其微纳晶场效应管迁移率高达  $0.8 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。研究结果发表在 *J. Am. Chem. Soc.* 上。

### 我国第一台单离子微束装置首次发现植物辐射损伤信号长程转导现象

中科院和安徽省离子束生物工程学重点实验室利用其自行研制的国内第一台单离子微束装置,通过大量实验,创建了精确个数离子对植物个体的定点照射实验技术体系,实现定点定量辐照模式生物拟南芥种胚茎端分生组织,以根的发育模式为生物学检测终点。结果显示,在茎端分生组织受到辐照损伤后,主根伸长,根毛发育分化以及侧根发生均受到了显著的抑制,该实验表明在植物个体水平上存在辐射的长程效应。在国际上首次证实了辐射损伤信号在植物个体水平上的转导,为个体水平研究辐射损伤信号转导和解释低能离子的作用机理提供了直接证据和重要参考。

该实验室吴李君研究员和他的博士研究生杨根撰写的研究论文“单离子束定点照射拟南芥种胚诱导长程旁效应研究”近日发表在 *Radiation Research* 上,受到广泛关注。杂志副主编评论认为:“这一研究报道了延迟的损伤信号在植物中的潜在表达和生长素可能的作用,这是非常重要的新的信息。因为,迄今为止,还没有任何资料涉及到植物的辐射损伤信号转导的报道”。



中国科学院