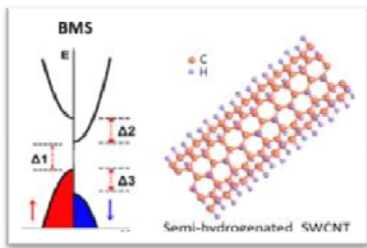


自旋电子器件材料的理论设计取得新进展--一种新概念的自旋电子器件材料

众所周知,微电子学是基于电子的电荷运输规律发展起来的,而电子除了具有电荷特性外还具有自旋特性,利用电子的自旋特性进行信息的存储、传递与处理的研究已形成了一门新兴的学科---自旋电子学。自旋电子器件相比于微电子器件,具有存储密度高、能耗低、响应快等多种优点,但要获得高效的自旋电子器件,一些关键的科学问题还有待解决,如自旋电流注入、长程自旋电流传输以及载流子自旋极化的控制等。通过设计和发现新材料是解决这些挑战性问题的一个重要前沿研究方向。



中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室杨金龙教授领导的研究小组最近提出了一种新概念的自旋电子器件材料---双极磁性半导体(Bipolar Magnetic Semiconductors, BMS)。这种材料的独特之处在于其导带边与价带边在费米能级附近具有相反的自旋极化能带(如图所示)。因此,通过调控材料费米能级的位置进入导带或者价带,该材料可以转变为完全自旋极化的半金属(Half-metal),可以提供不同极化方向的自旋载流子。由于BMS材料中载流子的自旋极化方向取决于费米能级的移动方向,而这种移动可方便地通过调控门电压方法进行,因而有望实现基于BMS的电场调控自旋电子器件,如自旋电子开关、自旋整流器和场效应器件等。通过第一性原理电子结构计算,他们发现半氢化的碳纳米管材料是一个理想的准一维BMS材料。电子输运计算表明基于半氢化碳纳米管所构建的分子器件具有完美的自旋过滤效应,其载流子自旋极化方向可以通过电场实现调控。

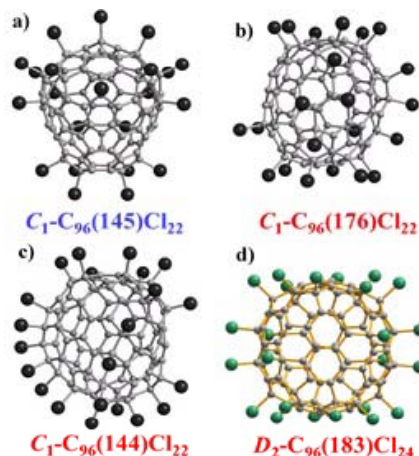
这一研究突破了传统的用磁场调控电子自旋的模式,为发展新型电场调控的自旋电子器件提供了一种全新的思路。该工作最近在线发表在英国皇家化学学会主办的《Nanoscale》上。近年来,杨金龙教授研究组一直致力于新型自旋电子器件材料的理论设计研究,在JACS, APL, JCP, JPC等杂志上发表十余篇论文,受到国内外同行的广泛关注。研究工作得到了科技部量子调控重大研究计划,国家自然科学基金委创新团队和中科院方向性项目的支持。

富勒烯化学研究取得进展

近日,合肥微尺度物质科学国家实验室(筹)原子分子科学研究部杨上峰教授研究组与俄罗斯莫斯科州立大学Trojanov教授组合作在富勒烯化学研究领域取得进展,对大碳笼富勒烯 C_{96} 同分异构体进行了深入的研究,成功确定出 C_{96} 的几种新型同分异构体结构。研究结果发表在化学研究领域国际著名期刊Angew. Chem. Int. Ed. 2012, 51, 8239-8242。

对于富勒烯而言,相比起 C_{60} 和 C_{70} 等研究较多的常见富勒烯,由更多的碳原子所组成的大碳笼富勒烯的产率通常要比 C_{60} 和 C_{70} 低得多。同时,随着碳原子数的增多,碳笼体积逐渐增大,通过碳原子成键形成的五元环和六元环之间的连接方式呈现出多样化和复杂化,因此大碳笼富勒烯往往存在多种同分异构体。由于低产率和多种同分异构体的存在,所以目前所报道的大碳笼富勒烯研究极为有限。

杨上峰教授研究组首先对大碳笼富勒烯 C_{96} 进行高效液相色谱(HPLC)粗分离得到三种由不同的同分异构体混合而成的组分,然后分别对其进行氯化反应并分离出两种重要的产物 $C_{96}C_{122}$ and $C_{96}C_{124}$,最后对 $C_{96}C_{122}$ and $C_{96}C_{124}$ 进行X射线单晶衍射研究确定出 C_{96} 的四种同分异构体的结构,包括145: C_1 , 176: C_1 , 144: C_1 和183: D_2 (见图),其中后面的三种同分异构体为首次报道的 C_{96} 新型异构体。这一结果不仅拓展了对大碳笼富勒烯结构的认识,而且证明了通过化学反应然后对衍生物进行单晶结构表征是研究大碳笼富勒烯分子结构的有效方法。


 2012年第6期
 (总第78期)

简报

2012年7月

合肥微尺度物质科学国家实验室(筹)办公室 编辑:严青、杨淑红 0551-3600458 yanqing@ustc.edu.cn

“分子尺度的量子设计与调控”项目中期评估会议顺利举行

近日,国家量子调控重大科学研究计划项目“分子尺度的量子设计与调控”中期评估会议在合肥顺利举行。项目督导组 and 专家组成员中国科学技术大学校长侯建国院士、中科院化学所所长万立骏院士、中科院半导体所所长李树深院士、中科院大连化物所杨学明院士、北京大学高松院士、清华大学李亚栋院士、南开大学副校长许京军教授、香港中文大学肖旭东教授、北京师范大学方维海教授、中科院物理所徐红星研究员、中国科技大学杨金龙教授、谢毅教授以及科技部基础研究管理中心和中科院基础局的相关领导出席了会议。会议由项目首席科学家、专家组组长杨金龙教授主持。

项目依托单位中国科学技术大学副校长朱长飞教授致开幕辞。他指出中国科学技术大学是国家量子调控重大研究计划的两个委托单位之一,是国家量子调控重大研究计划研究的生力军。近年来,我校在量子调控研究领域已经取得了一批国际领先的创新成果,分子尺度的量子调控也是我校在相关领域的一个很有特色的研究亮点。他感谢专家们对科大量子调控研究的支持,并希望各位专家对项目的执行情况和研究方向提出宝贵的意见和建议。

随后“单分子尺度的量子结构设计及其性能调控”、“分子尺度上的光子态调控与等离激元光子学”、“低维受限与异质量子结构及其原型器件的设计和调控”和“分子尺度上量子设计和调控的理论和模拟”四个课题的负责人分别就各课题的研究方向和内容、主要进展和创新特色、人才培养和经费使用、下一步工作设想和安排等做了汇报。期间,各位专家还就相关科学问题 and 研究成果同课题组成员进行了深入的研讨,也提出了许多建设性的意见和建议。

项目督导 and 专家组成员在听取课题汇报后,一致认为本项目在分子尺度新量子材料的设计和制备、量子态观测和调控、新型单分子层次表征手段的探索和完善等方面开展了一系列亮丽的工作并取得了令人瞩目的进展,圆满完成了项目前期的目标和任务。同时,专家组也希望项目组成员牢记使命,充分发挥团队集中的优势,秉承科大追求卓越的精神,进一步凝练科学问题并汇聚研究力量,力争在后期的研究工作中,取得更大的突破和成就,为国家重大研究计划项目的实施做出示范和引领。

“分子尺度的量子设计与调控”项目是针对信息技术即将跨入以量子效应为特征的“后摩尔”时代这一严峻挑战,以期通过对分子尺度体系的结构、电子态、自旋态开展系统的设计和调控,深刻理解和有效调控分子尺度上的量子行为,从而为实现和建构基于分子尺度体系的未来信息技术奠定科学基础。该项目自2011年初启动以来,已在分子体系自旋和电子态的设计与调控、单分子的光子态调控和等离激元光子学集成、分子尺度量子结构的表面和界面设计与调控、新量子材料的设计和物理实现、新理论方法和单分子特色表征装备的研发等方面取得了一系列的重要进展。

