

# 2019 年国家自然科学奖提名公示

## 一、项目名称

低维量子结构的物性调控及其原理性应用

## 二、提名者：

中国科学院

## 提名意见：

该项目围绕功能纳米量子结构的组装与物性调控开展了深入系统的研究，取得了一系列在国际上有较大影响力的原创性基础研究成果。在结构组装及生长机制方面，通过改变功能分子末端官能团等手段在固体表面实现了纳米结构的可控组装，发展了一种被广泛应用的单一溶剂中制备单分散贵金属及合金纳米粒子的组装方法等。相关成果对三维有序组装和纳米功能器件的构造具有重要的参考价值和指导意义。在物性调控方面，首次通过改变功能分子吸附位置实现了单分子自旋量子态的可控调制，首次在金表面上构造了具有固定偏心轴的单个分子转子，实现了大面积有序阵列的组装，利用单分子自旋可逆“开关”的近藤效应，首次实现了对单个自旋量子态的可逆控制等。相关研究成果引起了国际同行的广泛关注，被选为 *Physical Review Letters* 的“Editors' Suggestions”，美国物理学会 *Physics*、英国物理学会 *PhysicsWorld*、英国皇家化学会、*Nature-Asia* 和 *Nature China* 等进行了亮点报道，称相关工作是“实用的单分子转子、单分子发电机 / 无线电辐射器构造组装的重要研究”和“原理上证实了实用化单分子器件的构造”等。8 篇代表性论文被 SCI 他引 867 次。

该项目的一系列相关成果得到了国内外同行专家的高度认可与积极评价，具有重要科学价值。推荐材料属实，符合推荐要求。同意推荐该项目为国家自然科学奖二等奖。

### 三、项目简介

低维纳米量子结构的可控制备、物性调控及其原理性应用是凝聚态物理领域前沿研究的重要方向。该项目主要是在单个原子或单个分子层次上直接“观察”纳米量子结构，结合理论计算深入理解其组装机制，进而实现对其结构与物理性质（如自旋特性）的调控，追求功能化，为在未来功能器件中的原理性应用奠定基础。该项目的主要研究内容包括**功能纳米量子结构的组装及机制和功能纳米量子结构的物性调控及其原理性应用**两个方面。其主要科学发现点如下：

#### 一、功能纳米量子结构的组装及机制

1. 利用功能分子对针尖电子态进行修饰，实现了对二萘嵌苯分子电子结构的选择性成像，为将扫描隧道电子显微镜应用于低维纳米结构的组装与物性探测奠定了基础；2. 提出了固体表面有机、无机低维纳米材料的生长机制，实现了金属表面酞菁铁和锆等单分子/单原子层薄膜的可控生长，是固体表面上功能纳米结构组装研究的基础性和系统性工作。3. 利用功能基团、无功能的侧链以及外电场等实现了功能纳米结构的可控组装，通过功能分子末端官能团与基底不同的相互作用，在固体表面实现了功能分子选择性自组装，开创了一种新的外延生长 A/B 有序纳米结构的新途径—非模板选择性自组装。4. 发展了一种被广泛采用的制备单分散、尺寸可控金属及合金纳米粒子的组装方法，获得了大面积单层和 3D 超晶格结构。可控制备了大面积、单分散、不同直径的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子自组装超结构，通过调控纳米粒子间距改变其剩余磁化率和矫顽力。设计了一种简单绿色合成克级在水溶液稳定性和分散性好的不同尺寸  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子的方法。

#### 二、功能纳米量子结构的物性调控及其原理性应用

5. 通过基底的模板化或可控构建异质结引入内应力，对功能纳米量子结构的生长以及能带结构进行调控；还通过纳米探针直接对纳米结构施加外应力，诱导发生金属性与绝缘性的转变，实现了应力对纳米结构物性的调控。6. 在金表面构造了具有固定偏心轴的单分子转子，在理解其转动机制的基础上实现了大面积有序阵列的组装。7. 通过对分子体系输运性质的统计描述阐明了分子—电极界面对纳米量子结构输运性质的影响，理论上给出了“平均”的平衡电导值，实现了理论计算电导值与实验结果的统一。8. 通过对酞菁锰分子进行“原子手术”而创制了一种体系，发现了标志自旋轨道耦合作用的朗德 g 因子在原子尺度上可以具有

空间分布的不均匀性。通过改变酞菁铁在金表面的吸附位置，在单分子水平上实现了近藤效应的可控调制，提出了调控单分子自旋量子态的可能途径；进一步通过单个 H 原子的吸/脱附，实现了对酞菁锰体系单个自旋量子态的可逆控制及其在极高密度信息存储（280 Tb/inch<sup>2</sup>）中的原理性应用。

项目取得的成果包括 20 篇主要论文（含 *Phys. Rev. Lett.* 11 篇），其中 8 篇代表性论文被 SCI 正面他引 867 次，在重要国际会议上做大会/邀请报告 60 余次。这些成果丰富了纳米量子结构构筑与物性调控的研究内容，得到了国际同行的高度评价和广泛引用。其中，关于单分子马达及其阵列的工作被选为 *Phys. Rev. Lett.* 的“Editors' Suggestions”，并被美国物理学会 *Physics*、英国 *PhysicsWorld* 和 *Nature Asia* 等进行亮点报道，称“该项研究成果是利用单分子马达实现具有动力和推进系统的纳米机器的重要一步”。以该项目内容为主要研究成果，团队成员荣获了德国洪堡研究奖（2010），第三世界科学院物理奖（2009），全球华人物理学会“亚洲成就奖”（2008），第十届中国青年女科学家奖（2013）等。该研究团队荣获了“2013 中国科学院杰出科技成就奖”（集体）。

## 四、客观评价

代表性论文被国内外同行在 Review of Modern Physics、Science、Nature 子刊、Physical Review Letters 等权威期刊重点评述和引用。第一和第二完成人应邀在美国物理学会年会 (APS March Meeting)、国际真空大会 (IVC)、美国材料学会年会 (MRS Fall Meeting)、美国真空学会年会 (AVS)、国际纳米科学与技术会议和中国物理学会年会等国际/国内重要学术会议上做邀请报告 60 次。主要引文评述有以下的两个大的方面。

### 一、在功能纳米量子结构的组装及机制方面

关于**通过纳米结构的选择性成像**的工作不仅扩展了人们对功能分子纳米体系 STM 成像机制的认识，完善了扫描隧道电子显微学的成像理论，还为正确理解扫描隧道显微镜图像提供了有益的参考，为将扫描隧道电子显微镜应用于低维纳米结构的组装与物性的探测奠定了基础。在国际相关领域著名学者 Ruslan Temirov 发表在 Progress in Surface Science 的综述文章中将该工作选为针尖修饰成像的 4 个代表性工作之一（其中包含发表在 Science 和 PNAS（美国国家科学院院刊）上的工作）。该工作的重要意义还有，证明通过对 STM 针尖的进一步修饰改进，可以获得表面纳米结构中更加精细的电子结构信息，这对纳米和信息科学领域具有十分重要意义，2012 年还被邀请在纪念 STM 30 周年的特刊上撰文 [Chimia 66, 31(2012)]介绍此工作。

关于**功能分子在金属表面生长过程**的研究成果不仅实现了金属表面有机半导体薄膜生长过程的原位观测，还通过外场对生长过程实现了可控调制，对功能纳米结构由准二维到二维和三维生长提供了有价值的参考，对功能低维纳米结构及其器件组装有重要意义。研究结果被广泛引用，包括 Phys. Rev. Lett., Surf. Sci. Rep.等。在关于**功能分子组装机制及表面动态过程的调控**的工作中，项目组提出了一种基于 DFT 的第一性原理静态计算与时间分辨的隧穿电流谱 (I-t) 相结合研究复杂分子表面动态系统的新方法，发表在 Phys. Rev. Lett. **104**, 166101 (2010) 上。基于该工作，第二完成人受邀在 2010 国际真空大会上做分会邀请报告，并作为联系作者受邀在《Small》杂志上撰写综述论文，该综述不仅被 Small 杂志主编高度评价，还在该期首页及 Small 杂志网站上进行了特别报道。关于锗纳米结构的工作发表后，国际知名教授 Guy Le Lay 在全球销售量最大的科技信息杂志“Popular Science”上指出该项目团队“a Chinese team became the first to create germanene”。

关于**功能纳米结构在固体表面上组装机**制的工作重新认识了共轭有机分子与金属基底的相互作用机制，同时开创了一种新的外延生长 A/B 有序纳米结构的新途径—非模板选择性自组装，对三维有序组装和各类纳米功能器件的构造具有重要的参考价值和指导意义。该成果作为该领域的代表性工作被 F. S. Tautz 在其发表在 Prog. Surf. Sci. 上的综述文章等引用。进一步的研究发现，通过改变无功能特性的烷烃侧链调控分子纳米体系的结构与性质，拓展了人们对有机功能分子纳米体系的控制能力。这部分工作是“中国科学院 2006 年十大重大创新成果”（纳米量子结构可控性实验和理论研究取得新进展）的主要内容。

关于**单分散贵金属纳米粒子的调控及其表面增强拉曼散射 (SERS) 特性**的工作在发表后被一些高水平的文章引用，同时，该方法成为一步合成单分散、尺寸可控、稳定性好的 Au 和 Ag 等贵金属纳米粒子的一种常用方法，被相关研究组广泛采用。多篇综述文章正面引用了该项研究成果。

## 二、在功能纳米量子结构的物性调控方面。

关于“**单分子转子**”的工作发表后引起了国际同行的广泛关注，相关研究结果发表在 Phys. Rev. Lett. 上，被选为 Physical Review Letters 的“Editors' Suggestions”；美国物理学会 Physics (Spotlighting Exceptional Research)、英国物理学会 PhysicsWorld (Headline News)、英国皇家化学会 Royal Society of Chemistry、Nature-Asia 和 Nature China 等对该研究结果进行了亮点报道，称该工作是“*This is a cute piece of surface engineering at the nanoscale. It is a proof-of-principle that molecular systems can be anchored onto a surface – so it is a good step forward (这是纳米尺度表面工程领域的一个精巧结构，它从原理上证实了分子体系能被固定在表面 – 因此这是表面工程向前发展的重要一步)*”，“*the finding represents an important step towards the eventual fabrication of molecular motors and generators (这一发现是最终构造出单分子马达和单分子发电机的重要一步)*”；

“*These results represent a potential step forward in the large-scale construction of arrays of molecular motors and large molecular machines (这些结果是构造大面积分子马达阵列和分子机器阵列的重要一步)*”，“*This research is a step towards integrating rotors into nanomachines that could function as power or propulsion systems (该项研究成果是利用单分子马达实现具有动力和推进系统的纳米机器的重要一步)*”，“*such machines could be used as tiny autonomous ‘nanorobots’ in the future that would perform a wide range of tasks (这样的机器可以用于动力自给‘纳米机器人’的动力系统，这样的‘纳米机器人’未来可以完成多种任务)*”等。如

果将分子中心的 Zn 原子替换成磁性原子 (Fe, Co), 可以得到在纳米尺度上旋转的磁场, 借此可以制作纳米单分子发电机。此外, 项目组利用金表面的重构结构实现了单分子转子的大面积组装, 为分子马达的集成提供了基础。

关于**单分子输运性质**的工作在理论上对分子体系的输运性质进行了统计描述, 阐明了分子-电极接触对整个纳米量子结构输运性质的影响, 给出了“平均”的平衡电导值。解决了一直以来单分子输运领域悬而未决的一个难题, 即长期以来实验与理论之间存在巨大差异的问题, 对于今后分子体系输运性质的理论研究起到了重要的指导意义。N. J. Tao 在 Nature Nanotechnology 发表的综述文章中说到 “*Owing to the lack of atomic-scale details of most experiments, the recent treatment of a range of different molecule-electrode contact geometries is an important step for a fair comparison between theories and experiments.* (由于实验上缺乏原子结构的细节信息, 近期采用不同的分子-电极界面几何构型来模拟真实体系的理论研究是理论计算可以和实验结果相比较的重要一步)”, “*Non-equilibrium Greens functions and density functional theory approaches provide reasonable descriptions of systems involving coherent tunnelling* (非平衡态格林函数与第一性原理相结合对相干隧穿系统提供了合理的描述)”。

关于**单分子自旋态的量子调控**的文章发表在 Phys. Rev. Lett. 上, 对功能分子在金属表面的 Kondo 效应给出了清晰的物理图像, 提出了调控单分子自旋量子态的可能途径。国际上该领域的著名学者 W.-D. Schneider 教授在其发表在 Review of Modern Physics 上的综述文章中将该工作选为单个磁性金属酞菁分子体系 Kondo 效应及其自旋态操纵的三个代表性工作之一。

关于**单自旋态调控**的工作在自旋态调控、表面合成、分子开关等领域受到广泛关注。包括 ACS Nano 副主编、新加坡国立大学 Andrew T. S. Wee 教授在国际知名期刊的综述文章中正面引用本文, IBM Zurich 实验室 (STM 发明地) 的 L. Gross 研究员在专著的 SPM 操纵和分子开关两个章节分别正面引用此文, 担任欧洲科学委员会成员十余年的瑞士保罗谢尔研究所 Thomas A. Jung 教授在综述中称此工作是化学开关的尺寸极限 (“possibly this provides the spatial size limit for a chemical switch” J. Phys. Chem. Lett. **4**, 2303 (2013)) 等。

## 五、代表性论文专著目录

序号	论文专著 名称/刊名 /作者	影响 因子	年卷页码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表 时间 (年 月 日)	通讯作者 (含共 同)	第一 作者 (含共 同)	国内作者	SCI 他 引 次 数	他 引 总 次 数	论 文 署 名 单 位 是 否 包 含 国 外 单 位
1	Selective Nontemplated Adsorption of Organic Molecules on Nanofacets and the Role of Bonding Patterns/Physical Review Letters/S. X. Du, H.-J. Gao, C. Seidel, L. Tsetseris, W. Ji, H. Kopf, L. F. Chi, H. Fuchs, S. J. Pennycook, and S. T. Pantelides	8.839	2006年97卷156105页	2006年10月13日	高鸿钧, S.T. Pantelides	杜世萱	杜世萱, 高鸿钧, 季威	34	34	是
2	Constructing an Array of Anchored Single-Molecule Rotors on Gold Surfaces/Physical Review Letters/L. Gao, Q. Liu, Y. Y. Zhang, N. Jiang, H. G. Zhang, Z. H. Cheng, W. F. Qiu, S. X. Du, Y. Q. Liu, W. A. Hofer, and H.-J. Gao	8.839	2008年101卷197209页	2008年11月07日	高鸿钧	高利	高利, 刘奇, 张余洋, 江楠, 张海刚, 程志海, 邱文丰, 杜世萱, 刘云圻, 高鸿钧	60	63	是
3	Conductance of an Ensemble of Molecular Wires: A Statistical Analysis/Physical Review Letters/Y. B. Hu, Y. Zhu, H.-J. Gao, H. Guo	8.839	2005年95卷156803页	2005年10月07日	无联系作者 (注: 胡亦斌是高鸿钧的学生)	胡亦斌	胡亦斌, 高鸿钧	128	130	是
4	Site-specific Kondo Effect at Ambient Temperatures in Iron-based Molecules/Physical Review Letters/L. Gao, W. Ji, Y. B. Hu, Z. H. Cheng, Z. T. Deng, Q. Liu, N.	8.839	2007年99卷106402页	2007年09月07日	高鸿钧	高利	高利, 季威, 胡亦斌, 程志海, 邓智滔, 刘	146	149	是

	Jiang, X. Lin, W. Guo, S. X. Du, W.A. Hofer, X. C. Xie, and H.-J. Gao			日			奇, 江楠, 林晓, 郭伟, 杜世萱, 高鸿钧			
5	Revealing the Atomic Site-Dependent g Factor within a Single Magnetic Molecule via the Extended Kondo Effect/ Physical Review Letters/ Liwei Liu, Kai Yang, Yuhang Jiang, Boqun Song, Wende Xiao, Shiru Song, Shixuan Du, Min Ouyang, Werner A. Hofer, Antonio H. Castro Neto, and Hong-Jun Gao	8.839	2015 年 114 卷 126601 页		高鸿钧	刘立巍	刘立巍, 杨楷, 姜宇航, 宋博群, 肖文德, 宋士儒, 杜世萱, 高鸿钧	6	7	是
6	Monodisperse Noblemetal Nanoparticles and Their Surface Enhanced Raman Scattering Properties/Chemistry of Materials/C. M. Shen, C. Hui, T. Z. Yang, C. W. Xiao, J. F. Tian, L. H. Bao, S. T. Chen, H. Ding, and H.-J. Gao	9.89	2008 年 20 卷 6939 页	2008 年 10 月 29 日	高鸿钧	申承民	申承民, 惠超, 杨天中, 肖从文, 田继发, 鲍丽宏, 陈书堂, 丁皓, 高鸿钧	142	145	否
7	Buckled Germanene Formation on Pt(111)/Advanced Materials/ Linfei Li, Shuang-zan Lu, Jinbo Pan, Zhihui Qin, Yu-qi Wang, Yeliang Wang, Geng-yu Cao, Shixuan Du, and Hong-Jun Gao	21.95	2014 年 26 卷 4820 页	2014 年 05 月 20 日	高鸿钧	李林飞	李林飞, 卢双赞, 潘金波, 秦志辉, 王裕祺, 王业亮, 曹更玉, 杜世萱, 高鸿钧	287	291	否
8	Reversible Single Spin Control of Individual Magnetic Molecule by Hydrogen Atom Adsorption/ Scientific Reports/ Liwei Liu, Kai Yang, Yuhang Jiang, Boqun Song, Wende Xiao, Linfei Li, Haitao Zhou, Yeliang Wang, Shixuan Du, Min Ouyang, Werner A. Hofer, Antonio H. Castro Neto & Hong-Jun Gao	4.122	2013 年 3 卷 1210 页	2013 年 02 月 04 日	高鸿钧	刘立巍	刘立巍, 杨楷, 姜宇航, 宋博群, 肖文德, 李林飞, 周海涛, 王业亮, 杜世萱, 高鸿钧	64	64	是
合 计								867	883	



## 六、主要完成人情况表

姓名	排名	行政职务	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目技术创造性贡献
高鸿钧	1	课题组长	研究员	中国科学院物理研究所	中国科学院物理研究所	该项目的总体学术负责人，提出该项目的总体实验方案和主要学术思想。在功能纳米量子结构及其物性调控等方面开展了系统性的工作。对科学发现点(1)、(2)、(3)、(4)、(5)、(6)、(7)、(8)做出了贡献，是这些工作的学术带头人。旁证材料见代表性论文1-8。
杜世萱	2		研究员	中国科学院物理研究所	中国科学院物理研究所	1. 项目组主要骨干。代表性论文1的第一作者，代表性论文2、4、5、7和8的共同作者。 2. 对科学发现点(1)、(2)、(3)、(6)和(8)做出了贡献，提出了功能基团对分子组装起决定性因素；提出了分子吸附位置可以调制其近藤效应；从理论上提出并证实了金增原子的存在是单分子转子的必要条件等。
申承民	3		研究员	中国科学院物理研究所	中国科学院物理研究所	1. 项目组主要骨干。是代表性论文6的第一作者。 2. 对科学发现点(4)做出了贡献，发展了一种单一溶剂中制备单分散贵金属Au、Ag及合金纳米粒子的组装方法。
王业亮	4		教授	北京理工大学	中国科学院物理研究所	1. 项目组主要骨干。是代表性论文7和8的共同作者。 2. 对科学发现点(2)和(8)做出了贡献，实现了Ge单层周期性纳米结构的构筑，实现了对MnPc分子体系单个自旋量子态的可逆控制及其极高密度信息存储的原理性应用。
林晓	5		教授	中国科学院大学	中国科学院物理研究所	1. 项目组主要骨干。是代表性论文4的共同作者。 2. 对科学发现点(1)、(3)、(5)和(8)做出了贡献，实现了单分子近藤效应的可控调制等。

## 七、完成人合作关系说明

第一完成人是该项目的总体负责人，项目中的 5 位成员均来自于中国科学院物理研究所纳米物理与器件实验室的同一研究组，高鸿钧为研究组组长，杜世萱（自 2002 年起）、申承民（自 2001 年起）为该研究组成员，王业亮与林晓当时是高鸿钧的学生。王业亮 2008 年 1 月至 2018 年 6 月为高鸿钧课题组成员，2018 年 7 月入职北京理工大学。林晓自 2013 年 9 月起在中国科学院大学物理科学学院工作。项目成果均在 2004-2015 年之间由 5 位成员合作完成。

高鸿钧与杜世萱合作了代表性论文 1、2、4、5、7 和 8；高鸿钧与申承民合作了代表性论文 6；高鸿钧与王业亮合作了代表性论文 7 和 8；高鸿钧与林晓合作了代表性论文 4。

第一完成人签名：

