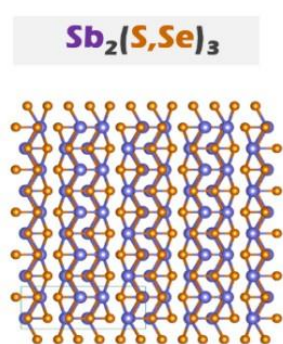
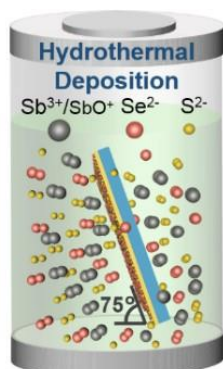


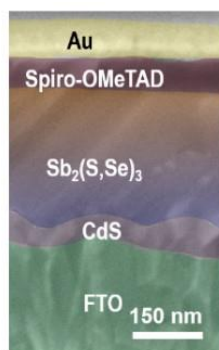
中国科大在硒硫化锑太阳能电池研究中取得重要突破



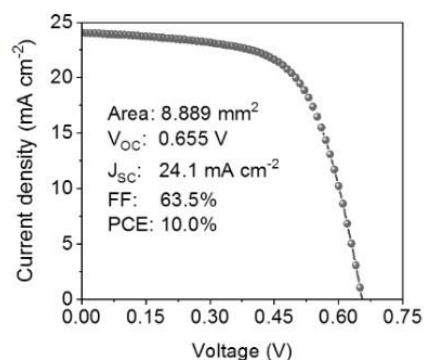
晶体结构



水热沉积



器件结构



效率认证

近日，中国科学技术大学陈涛教授、朱长飞教授团队，与新南威尔士大学的Xiaoqing Hao教授等合作，发展了水热沉积法制备硒硫化锑($Sb_2(S,Se)_3$)半导体薄膜材料并将其应用到太阳能电池中，实现了光电转换效率10%的突破。该成果以“Hydrothermal deposition of antimony selenosulfide thin films enables solar cells with 10% efficiency”为题发表在Nature Energy。

硒硫化锑，其化学式为 $Sb_2(S,Se)_3$ ，是近年来在光伏领域应用的一种新兴光伏材料，其带隙在1.1-1.7 eV范围内可调，满足最佳的太阳光谱匹配。同时， $Sb_2(S,Se)_3$ 具有较高的吸收系数，五百纳米左右厚度的薄膜即能达到最佳吸收；因此，在超轻、便携式发电器件方面也具有潜在的应用。

鉴于 $Sb_2(S,Se)_3$ 具有良好的稳定性和丰富元素储量，光电转换效率的进一步提升有望推进应用。本文发展的水热沉积法在超临界的状态下水热沉积过可以生成致密、平整且横向元素分布均匀的光吸收薄膜，从而有利于载流子的传输，结合光吸收、阴阳离子比例的调控以及点缺陷的控制，最终实现了光电转换效率的突破。从材料制备的角度来看，本文发展的水热沉积法是一种简便、低成本的薄膜制备方法。

Nature Energy审稿人给予该工作高度的评价，认为这是一个里程碑的效率（“This paper presents a landmark efficiency value for $Sb_2(S,Se)_3$ solar cells breaking the 10% barrier”），为硒硫化锑太阳能电池的发展带来新的曙光（“This achievement sheds new light on the investigation and application of $Sb_2(S,Se)_3$ ”）。

论文的共同第一作者是中国科大博士后唐荣风、博士生王小敏和连伟涛。中国科大朱长飞教授、新南威尔士大学的Xiaoqing Hao教授，中国科大陈涛教授为该论文的共同通讯作者。合作者还包括中国科大杨上峰教授、澳门大学邢贵川教授以及华东师范大学陈时友教授等。

该项研究得到了科技部、国家自然科学基金委、合肥微尺度物质科学国家研究中心的支持。

研究进展

中国科大提出并实现纳米尺度电探测新方法

中国科学技术大学中国科学院微观磁共振重点实验室杜江峰、石发展、王亚等人，在金刚石单自旋量子精密测量研究方向取得重要进展，提出并通过实验实现了一种以金刚石氮-空位（NV）色心单自旋为量子传感器（以下简称“金刚石量子传感器”）的电探测方法，并首次通过磁抑制的NV色心实现了金刚石近表面电噪声信息的提取，为金刚石量子传感器在电探测方向的应用提供新的途径。该研究成果以“编辑推荐”形式发表在近期的《物理评论快报》上 [Nanoscale Electrometry Based on a Magnetic-Field-Resistant Spin Sensor, Phys. Rev. Lett. 124, 247701 (2020)]。

本工作中设计了一种连续动力学解耦序列，形成特定的缀饰态空间，有效地抑制了NV色心对磁场的响应，同时保留对电场的线性响应，从而构建了一个更加有效的电信号量子传感器。更进一步，研究人员利用这种新的电探测方法发现除了金刚石上表面的电噪声，距离金刚石表面约10纳米深的内部（NV色心周围）的电噪声也不可忽略。通过建立模型与定量的实验研究这两处电噪声，发现它们之间存在显著的相关性。这种定量的探测和分析是以往研究方式无法实现的，而新方法对磁噪声呈现出高度抑制的作用，因此可以被用于金刚石近表面纯电噪声信息的提取。这有助于更准确地分析表面噪声的性质和来源，从而进行针对性的消除。

该实验验证了新的基于金刚石量子传感器的电探测方法，这种方法相对于以往基于NV色心的电探测方式大幅增强了对磁噪声的抑制，从而延长了其相干时间并提高了电探测的灵敏度。该方法非常适用于电磁场共存样品的表征，例如多铁材料。结合NV色心高分辨成像的特性，有望在材料的电磁性质表征领域取得重要应用。除此之外，该方法同样具有室温大气环境下单个电子电荷的探测灵敏度，其可应用于凝聚态以及半导体等材料的电信号表征。

审稿人评价此工作：“该新颖的方法是一种更容易且更通用的电测量实验方法，可为相关领域的研究人员提供技术参考。与以往此方面的研究相比，电荷噪声和屏蔽的实验结论更为坚实可靠，并且可能是真正揭示表面电荷噪声起源的第一步。”此工作被PRL编辑选作亮点文章发表。

合肥微尺度物质科学国家研究中心

中国科大在“神威·太湖之光”上首次实现千万核心并行第一性原理计算模拟

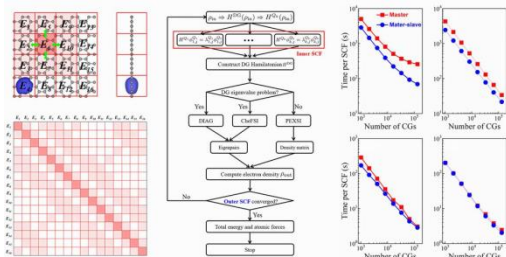


图 DGDFT的ALB基组，块状三对角Hamiltonian矩阵，流程图，神威主从核并行加速。

近日，中国科学技术大学针对大尺度数万原子分子固体体系的第一性原理计算模拟，以低标度平面波高精度计算软件DGDFT为基础，在国产神威·太湖之光超级计算机上实现了千万核超大规模并行计算，研究成果以“High performance computing of DGDFT for tens of thousands of atoms using millions of cores on Sunway TaihuLight”为题在线发表于《Science Bulletin》上。这项成果由合肥微尺度物质科学国家研究中心、化学与材料科学学院的杨金龙教授课题组，与计算机科学与技术学院安虹教授课题组联合攻关，在国家超级计算无锡中心和中国科学院软件研究所研究人员的紧密配合下完成。

超级计算机和高性能计算技术的快速发展，使得基于KS方程密度泛函理论(KS-DFT)的第一性原理计算模拟在凝聚态物理、材料科学、化学和生物等研究领域变得越来越重要。自2010年以来，中国拥有了3台世界上计算速度最快的超级计算机，其中神威·太湖之光曾4次占据世界超级计算机TOP500排行榜第一。但是，国内第一性原理高性能计算软件却远远落后于超算硬件的发展。因此，随着国产超级计算机的快速发展，很有必要发展相应的理论算法和超大规模并行计算软件，从而充分发挥出这些超级计算机强大的计算能力，模拟研究更大尺度的物理化学问题。

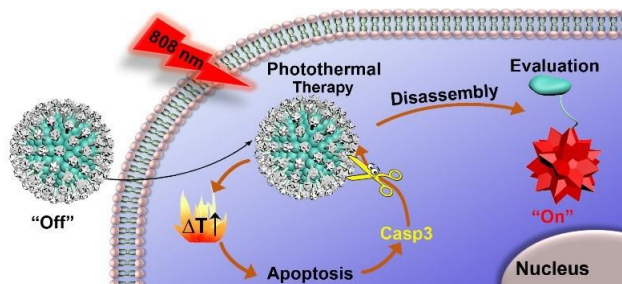
这次通过超算应用团队、软件移植和性能优化团队，与基础算法库开发团队以及国家超算中心硬件技术支持团队的紧密合作，把我校理论与计算化学的低标度理论算法与国产高性能并行计算软硬件的优势结合起来，充分发挥了国产神威·太湖之光超级计算机的强大计算能力；开发了低标度、低通讯，低内存、低访存的并行计算方法；实现了具有平面波精度的千万核超大规模高性能并行计算。同时，模拟体系的大小（数万原子）比国际同等平面波精度的计算模拟软件提高了数百倍。这一成果说明，借助当代最先进的计算方法和世界顶级高性能计算平台，大体系、长时间的高精度第一性原理材料模拟已成为现实。

简报



研究进展

中国科大实现肿瘤光热治疗和疗效实时成像评估



2020年7月29日,国际著名学术期刊《ACS Nano》在线发表了中国科学技术大学梁高林教授课题组与安徽医科大学第二附属医院王龙胜主任医师课题组的合作研究成果,文章标题为《A Self-Evaluating Photothermal Therapeutic Nanoparticle》。该文章报导了一种有机纳米粒子用于肿瘤光热治疗及疗效实时成像评估的“智能”策略,在肿瘤治疗与疗效评估一体化方面取得了重要进展(ACS Nano, 2020, DOI:10.1021/acsnano.9b10144)。

光热治疗由于其非侵入性、时空控制精确、特异性强、肿瘤破坏效率高等优点,已成为肿瘤治疗领域的研究热点,有望用于临床上多种癌症的治疗。目前临床上癌症治疗疗效评估主要依赖于细胞学、组织病理学和影像学,治疗和疗效评估是分离的。因而,临床上肿瘤治疗及其疗效评估一体化仍然面临着巨大的挑战。梁高林教授基于本课题组特色的CBT-Cys点击缩合反应,合理设计并合成了有机小分子染料Cys(StBu)-Asp-Glu-Val-Asp-Lys(Cypate)-CBT (Cy-CBT),很便捷地制备了荧光猝灭的光热纳米粒子Cy-CBT-NP。Cy-CBT-NP被肿瘤细胞摄取后,在808 nm激光照射下,肿瘤接受光热治疗。在光热治疗过程中,肿瘤细胞发生凋亡,激活凋亡蛋白酶caspase 3 (Casp3)。Casp3特异性地识别剪切Cy-CBT-NP中的DEVD序列,使得Cy-CBT-NP解组装生成小分子片段Cy-CBT-NP-Cleaved,并伴随着近红外荧光的点亮。由于光热治疗效率、Casp3活性以及近红外荧光的点亮程度三者是呈正相关关系,因此该“智能”纳米粒子Cy-CBT-NP可通过监测近红外荧光的点亮来准确、实时地评估肿瘤光热治疗效果。与传统的肿瘤疗效评估方法相比,该策略具有实时性,可帮助医生及时调整治疗方案。作者希望这种“智能”策略不久就可以用于临床实体肿瘤的光热治疗及其疗效的实时评估。



国家研究中心简讯

◆中国科大微尺度国家研究中心举行2020届研究生毕业典礼暨学位授予仪式

初心不忘,筑梦远航。7月18日,中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心2020届研究生毕业典礼暨学位授予仪式在东区理化大楼科技展厅举行。国家研究中心领导罗毅、王兵、陈旻、刘乃乐、孙梅,中国科大研究生院副院长、校学位办主任姚华建,导师代表陈腾云教授、高敏锐教授、郭昌教授、吴涛教授、肖翀教授、叶树集教授、曾华凌教授出席仪式。国家研究中心党委书记、副主任王兵主持学位授予仪式。



毕业典礼在雄壮的国歌声中拉开帷幕。随后,国家研究中心副主任陈旻宣读学位授予文件,向圆满完成学业、获得学位的同学们表示热烈的祝贺。在热烈的掌声中,国家研究中心主任罗毅发表致辞,深情寄语即将毕业的同学们,向他们表示美好的祝愿。随后,姚华建代表中国科大向顺利毕业并取得学位的同学们表示热烈的祝贺!导师代表吴涛教授、毕业生代表博士研究生徐瑛和硕士研究生房晓祥分别发言。

仪式上,王兵带领毕业生庄严宣誓:“感恩父母养育,感谢导师教诲,不忘母校培养。我们坚守母校信念,热爱科学、崇尚真理;我们传承母校精神,科教报国、追求卓越。我们用激情和智慧建设祖国,用责任和行动回馈社会,用成就和硕果回报母校。”

“迎着永恒的东风,把红旗高举起来,插上科学的高峰……”宣誓之后,现场师生一起高唱校歌《永恒的东风》,歌声响彻整个会场。最后,罗毅依次为毕业生扶正流苏,并合影留念。至此中国科大微尺度国家研究中心2020届研究生毕业典礼暨学位授予仪式圆满结束。