上海微系统所石墨烯量子点荧光发光机制研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/26649.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院上海微系统与信息技术研究所纳米材料与器件实验室丁古巧团队在石墨烯量子点制备及荧光机制研究方面取得进展。该工作深化了关于石墨烯量子点发光机理的认知，阐释了多变量体系下机器学习辅助材料制备成果所包含物理内涵。相关研究成果以*Precursor Symmetry Triggered Modulation of Fluorescence Quantum Yield in Graphene Quantum Dots*为题，发表在《先进功能材料》（*Advanced Functional Materials*）上。

近年来，以石墨烯量子点为代表的碳基量子点材料因独特的sp2－sp3杂化碳纳米结构，表现出优异的光学、电学、磁学的性质。在石墨烯量子点“自下而上”法制备中，多变量反应体系使其在合成与机制领域面临挑战。此外，机器学习以高效的分析算法和模型在复杂体系分析、新型材料设计等领域展现出优势。然而，由于缺失具备实际物理内涵的结构特征描述符，机器学习仅能得到难以阐释物理内涵的数学模型。这限制了机器学习在相关研究中的可迁移性和实用性。石墨烯粉体课题组博士研究生陈良锋、副研究员杨思维结合群论在分子结构描述上的优势，通过控制变量实验与结构化学理论的结合，将具有实际物理含义的描述符应用于机器学习，揭示了石墨烯量子点的前驱体结构与荧光量子产率间关联的物理内涵。

该研究利用高结构刚性sp3前驱体与柔性sp2结构前驱体之间的“自下而上”反应，实现了石墨烯量子点中sp2-sp3杂化碳纳米结构的调制。研究结合热动力学理论，阐明了sp3刚性结构能够通过抑制非辐射跃迁过程提高石墨烯量子点量子产率。进一步，研究借助群论在描述分子结构方面的优势，结合主成份分析，明确了石墨烯量子点制备过程中影响石墨烯量子点荧光量子产率的三个决定性因素——结构因子、温度因子和浓度因子。

与以往基于机器学习的研究工作相比，该团队基于群论的进一步研究，揭示了机器学习结果中分子的简正振动是前驱体对称性作用于石墨烯量子点量子产率增量的核心物理机制。基于上述原理的指导，该工作获得了绝对量子产率高达83%的石墨烯量子点。这一石墨烯量子点的光致发光性能在荧光信息防伪加密中具有应用前景。

研究工作得到中国科学院青年创新促进会、上海市科学技术委员会以及集成电路材料全国重点实验室开放课题等的支持。

论文链接

研究团队单位：上海微系统与信息技术研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发