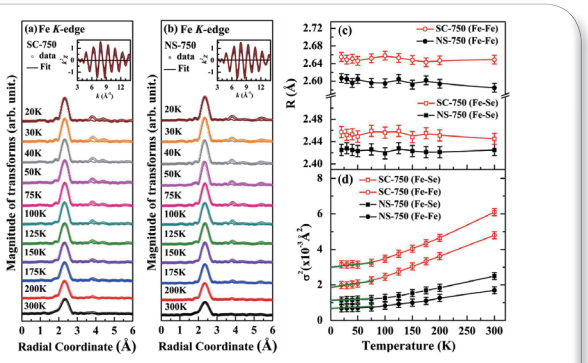
利用 X 光吸收與發射能譜術探討超導 $K_{2-x}Fe_{4+y}Se_5$ 之機制

近年鐵硒 $K_{2-x}Fe_{4+y}Se_5$ 超導系統，樣品因鐵原子濃度改變 / 缺陷引起原子結構無序 / 有序排列、影響磁性結構與超導 / 非超導現象變化，其影響機制與關聯作用一直是相關領域學者高度興趣與爭論不休的研究課題。為了深入理解與釐清此科學爭議，淡江大學物理系彭維鋒教授、中央研究院物理所吳茂昆院士、美國先進光源 (ALS) 郭晶華博士研究團隊與本中心同仁共同合作研究此課題。首先藉由提高鐵的濃度，成功生長出超導臨界溫度約 31K 多晶高溫超導樣品 ($K_{1.9}Fe_{4.2}Se_5$, SC) 與非超導樣品 ($K_2Fe_4Se_5$, NS)，利用一系列變溫 X 光吸收與非彈性發射能譜術探討此課題。此研究成果指出，超導樣品 (SC) 相對非超導樣品 (NS)，因鐵濃度增加填補其原子空缺，但其原子結構有序排列相對被破壞，導致鐵電子自旋磁距減弱，另因鐵與硒鍵長 (Fe-Se) 在超導樣品 (SC) 相對非超導樣品 (NS) 增長，導致其鐵 3*d* 與硒 4*p* 軌域的混成效應變弱，並降低其間電子轉移行為。此研究結果說明原子、電子結構、磁性彼此關聯性，並影響鐵硒 $K_{2-x}Fe_{4+y}Se_5$ 系統超導 / 非超導行為改變，有利於未來超導相關研究。此研究使用 TLS BL17C1、BL01C1 光束線。



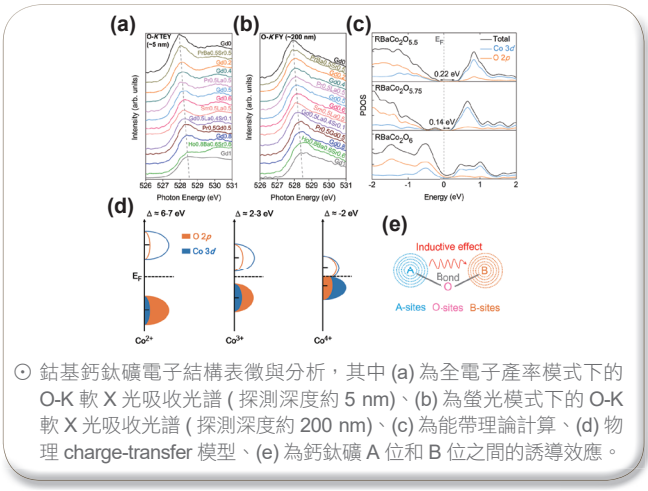
⊙ 圖 (a) 與圖 (b) 分別為超導 (SC-750) 與非超導樣品 (NS-750)，在不同溫度下鐵傅立葉轉換圖譜 (Fe *K*-edge EXAFS)；插圖為傅立葉轉換對應 *k*- 空間。
圖 (c) 與圖 (d) 分別是鍵長 (R) 與德拜瓦勒因數 [Debye-Waller factor, σ^2(T)] 在超導與非超導樣品中，其鐵硒鍵長 (Fe-Se) 和鐵鐵鍵長 (Fe-Fe) 隨著溫度變化。綠色直線表示在低溫範圍，利用外插法得到絕對溫度 0 K σ^2(T= 0) 值。

參考文獻：

H. T. Wang, A. Ghosh, C. H. Wang, S. H. Hsieh, Y. C. Shao, J. W. Chiou, C. L. Chen, C. W. Pao, J. F. Lee, Y. S. Liu, Y. D. Chuang, J. H. Guo, M. K. Wu*, and W. F. Pong*, "Evolution of Superconductivity in $K_{2-x}Fe_{4+y}Se_5$: Spectroscopic Studies of X-ray Absorption and Emission", Proc. Natl. Acad. Sci. USA **116**, 22458 (2019).

運用材料配位元化學原理巧妙設計簡便且有效的電催化活性描述符

實現快速、可靠地篩選低成本、高活性的電催化劑是水分解等能源轉化技術的關鍵問題之一。南京工業大學化工學院周嵬教授、邵宗平教授的研究團隊運用材料配位理論，引入 A 位離子電負性作為一種統一性的有效活性描述符，來預測 13 種鈷基鈣鈦礦在鹼性溶液中的析氫性能。通過理論計算結合同步輻射光譜研究，揭示了鈣鈦礦的配位環境 (A 位) 和活性位 (Co-O 位) 的潛在聯繫，包括 Co 離子價態、Co-O 鍵共價性、帶隙以及 O 2*p* 能帶位置。利用這種關聯，進一步篩選出其他幾種具有高活性的鈷基鈣鈦礦材料。此研究使用 TLS BL20A1 光束線。



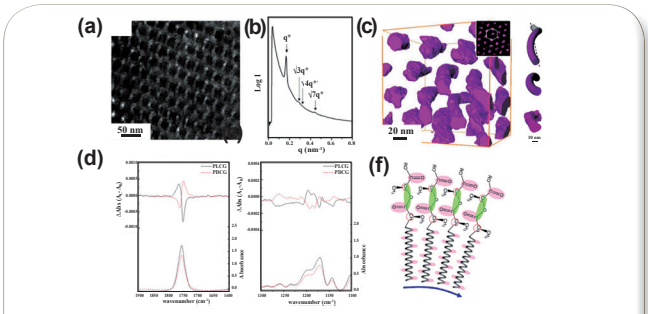
⊙ 鈷基鈣鈦礦電子結構表徵與分析，其中 (a) 為全電子產率模式下的 O-K 軟 X 光吸收光譜 (探測深度約 5 nm)、(b) 為螢光模式下的 O-K 軟 X 光吸收光譜 (探測深度約 200 nm)、(c) 為能帶理論計算、(d) 物理 charge-transfer 模型、(e) 為鈣鈦礦 A 位和 B 位之間的誘導效應。

參考文獻：

D. Guan, J. Zhou, Y.-C. Huang, C.-L. Dong, J.-Q. Wang, W. Zhou*, and Z. Shao*, "Screening Highly Active Perovskites for Hydrogen-evolving Reaction via Unifying Ionic Electronegativity Descriptor", Nat. Commun. **10**, 3755 (2019).

探究掌性嵌段共聚物自組裝螺旋結構型態形成的共通性

清華大學化工系何榮銘教授、中正大學化工系蔡敬誠教授、美國麻州大學高分子工程系 Gregory M. Grason 教授以及美國萊斯大學化學材料與奈米工程系 Edwin L. Thomas 教授共同合作，使用本中心 TLS BL23A1 光束線，研究掌性嵌段共聚物自組裝所形成特殊奈米微結構型態的共通性。此實驗成功利用簡單化學合成的分子設計概念，由掌性分子形成具掌性鏈段的嵌段共聚物，命名為掌性嵌段共聚物 (chiral block copolymer)，進行自組裝建構奈米螺旋相，更進一步驗證掌性嵌段共聚物自組裝行為的共通性。利用圓二色光譜、震動圓二色光譜與三維立體顯像電子顯微鏡，系統性地探討自組裝過程不同層級的掌性傳遞機制，提供學者研究掌性高分子與嵌段共聚物同掌性傳遞自組裝的研發手段，可作為生物型態演化與分子辨識研究的基礎。此研究成果具有成為掌性超穎材料 (metamaterials) 設計基礎的潛力，可應用於新穎光學材料的元件開發。



⊙ 掌性嵌段共聚物之 (a) 奈米螺旋微結構相電子顯微鏡投影影像；(b) 一維小角度 X 光散射結果；(c) 奈米螺旋微結構相三維立體顯像電子顯微鏡重建結果；(d) 螺旋鏈段 C=O 波段和 (e) C-O-C 波段的震動圓二色光譜圖。(f) 螺旋鏈段結構中 C=O 和 C-O-C 官能基之分子內與分子間掌性作用力造成的震動圓二色光譜儀光學訊號來源示意圖。

參考文獻：

H.-F. Wang, K.-C. Yang, W.-C. Hsu, J.-Y. Lee, J.-T. Hsu, G. M. Grason, E. L. Thomas, J.-C. Tsai*, and R.-M. Ho*, "Generalizing the Effects of Chirality on Block Copolymer Assembly", Proc. Natl. Acad. Sci. USA **116**, 4080 (2019).