

[首页](#)

理学院任伟团队在Journal of Physical Chemistry Letters发表生物铁电晶体材料论文

发布日期: 2019/02/25 投稿: 龚惠英 部门: 理学院 浏览次数: [返回](#)

近日, 上海大学量子与分子结构国际中心(ICQMS)、理学院物理系任伟团队在国际著名期刊《The Journal of Physical Chemistry Letters》(IF=8.709)上发表题为《Bio-Ferroelectric Properties of Glycine Crystals》的封面文章(DOI: 10.1021/acs.jpcllett.8b03837)

上海大学理学院化学系硕士研究生胡鹏飞同学为论文第一作者, 物理系青年东方学者李永乐副教授、东方讲座教授Alessandro Stroppa及东方学者跟踪计划入选者任伟教授为通讯作者。美国宾夕法尼亚大学Andrew Rappe教授、意大利CNR-SPIN拉奎拉大学Alessandro Stroppa研究员、上海大学Jeffrey Reimers教授、胡顺波博士、黄韵迪同学参与了该论文工作的完成, 其中上海大学为第一单位。

生物铁电晶体材料是物理化学和生物材料的一个交叉学科研究领域。自上世纪研究人员发现某些生物材料也存在一定的铁电性以来, 实验上不断发现新的生物铁电物质。但由于生物材料成分多样、结构复杂, 使得生物铁电材料的理论研究进展缓慢。甘氨酸(Glycine)是最简单的氨基酸, 也是生物材料中的基础分子。对甘氨酸铁电性质的探索是深入研究复杂生物材料物理性质的重要创新。该工作通过第一性原理计算及极化力场的分子动力学模拟系统地研究了生物材料甘氨酸两种晶型(β 相及 γ 相)的铁电性质。研究发现, γ 相甘氨酸具有与无机铁电材料相当的铁电极化值。本研究还首次通过极化力场分子动力学模拟, 成功揭示了甘氨酸晶体铁电翻转的微观动态机理, 并获得了甘氨酸晶体的铁电矫顽电场与相变温度。上述理论计算结果可以帮助人们深刻理解已报道的实验结果。生物铁电材料在医学诊断、医学芯片、生物传感等诸多高端生物医学材料领域存在应用前景, 该工作为生物铁电材料的理论研究、设计及应用提供了新的思路。

该工作得到了国家基金委、科技部、上海市教委、美国自然科学基金等项目的支持。

论文链接: <https://pubs.acs.org/ccindex.cn/doi/10.1021/acs.jpcllett.8b03837>

快速链接

钱校长百年诞辰	日程安排	党务公开	信息公开
行政办公系统	招聘信息	上大志愿者	文明校园创建
非学历招生	海外学习与实习	国际会议	校报电子版
实验教学示范中心	语言文字	校医院	网站结构化调整



版权所有 © 上海大学 沪ICP备09014157 沪公网安备31009102000049号 地址: 上海市宝山区上大路99号 邮编: 200444 电话查询
技术支持: 上海大学信息化工作办公室 联系我们