中国物理学会 Chinese Physical Society

厦門大學 XIAMEN UNIVERSITY

蘇州大學 SOOCHOW UNIVERSITY

CNCLS 23rd

第二十三届全国光散射学术会议

The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

会议摘要集

2025 年 11 月 25 日 – 28 日

中国 • 厦门



大会报告

表面增强拉曼光谱学半世纪发展史的启示

田中群

厦门大学化学系，表界面化学全国重点实验室，嘉庚创新实验室

报告人将根据四十余年的科研经历，通过多维度解析 SERS 的发现及奠基时代和全部历程，分享 SERS 从偶然发现到蓬勃发展的关键启示。1. SERS 效应的发现是多个研究团队共同创新的典范。上世纪 70 年代中期，基于当时教材和传统认识，学术界普遍认为拉曼光谱无法用于表面分析。先驱者们凭借强烈的好奇心和大胆质疑的精神，通过跨学科合作与坚持不懈的探索，最终突破了这一认知局限。这种开拓精神在后来的单分子 SERS 检测、突破衍射极限的 TERS 技术、普适性 SHINERS 方法等里程碑工作中得到延续和发扬。2. 超前时代的科学发现。作为纳米科学的重要分支，SERS 的发展比纳米科技热潮早了近二十年。若非先驱者们的大胆探索，这一现象可能要等到 90 年代纳米科技兴起时才被发现。这也解释了 SERS 在最初 20 年所经历的发展困境，同时凸显了其作为等离激元增强光谱学最早分支的独特历史地位。先驱者在学科萌芽阶段的开拓精神尤其值得学习。3. 抢占科研先机的重要性。SERS 的核心概念体系在 1974-1985 年间基本形成，包括在粗糙电极和胶体体系中的首次观测、"借力增强"策略的提出、"热点"二聚体概念的建立以及 TERS 技术的雏形等。这些超前的研究构想历经数十年才获得广泛认可。启示科研工作者应当敏锐把握机遇。4. 科学发现与认知局限的辩证关系。科学史上的重大突破往往伴随着初期的错误或不完善解释，因为这些发现常常超越当时的认知框架。SERS 早期关于电磁增强与化学增强机制的各种争论就是典型案例。学术界应当以开放包容的态度对待创新性观点，聚焦于严谨和理性的科学论证而非简单否定和预设立场的批判，这对新兴领域的健康发展至关重要。5. 科研低谷期的坚守与突破。1980 年代中期至 1990 年代中期，由于基底材料局限（仅限于 Au、Ag、Cu、Li 等特定金属）和纳米结构可控性不足等问题，SERS 研究陷入低谷长达十年。虽然多数研究团队因经费短缺而转向其他领域，但坚持下来的研究者最终实现了单分子检测等重大突破。在具有战略价值（如 SERS 所具有的超高表面检测灵敏度）的新兴领域，即使面临质疑和困难也应当坚持探索，因为机遇总是眷顾那些有准备的头脑。6. 新兴科技革命的推动作用。1990 年代中期以来，随着纳米科技革命的兴起，SERS 研究实现了跨越式发展：活性基底从粗糙电极发展为单分散纳米粒子、可控二聚体、核壳结构等；空间分辨率达到埃级（TERS 技术）；表征范围拓展至单晶表面（SHINERS 方法）。当前，SERS 研究正迎来与人工智能融合的重大机遇，AI 赋能的纳米结构设计、科学仪器和自动化制造有望突破灵敏度与稳定性之间的平衡等科学和技术难题，进而提升新高度和开拓新疆域。

参考文献：

[1] 易骏，尤恩铭，胡仁，田中群等， *Chem. Soc. Rev.*, **2025**, 54, 1453–1551.

定量拉曼光谱学

谭平恒 [1*]

[1] 半导体芯片物理与技术全国重点实验室，中国科学院半导体研究所，北京，100083

*Email: phtan@semi.ac.cn

声子是晶格集体振动的量子化激发，其行为通过声子-声子散射和电-声子耦合等机制深刻影响材料的物理性质。拉曼散射作为一种关键的光与物质相互作用手段，是探测材料中元激发（如声子、电子、激子）及其相互作用的重要工具，广泛应用于晶体结构、晶格振动、能带结构、电子态密度及电-声子耦合等研究。然而，如何基于拉曼散射原理定量解析并调控声子态的特性，一直是声子物理中的核心科学问题。尽管拉曼技术不断进步，系统灵敏度显著提升，对各拉曼模强度进行定量描述仍具挑战。近年来，以石墨烯和二硫化钼为代表的二维材料，凭借其极限厚度与优异界面特性，为前沿物性研究及光电器件应用提供了理想平台。本报告将结合研究组在二维材料及其异质结的一些列拉曼光谱研究成果，系统地阐述如何在经典与量子理论框架下定量理解层状半导体呼吸模的拉曼散射强度和各向异性半导体的角分辨拉曼光谱强度，以展现定量拉曼光谱学的潜力与魅力。

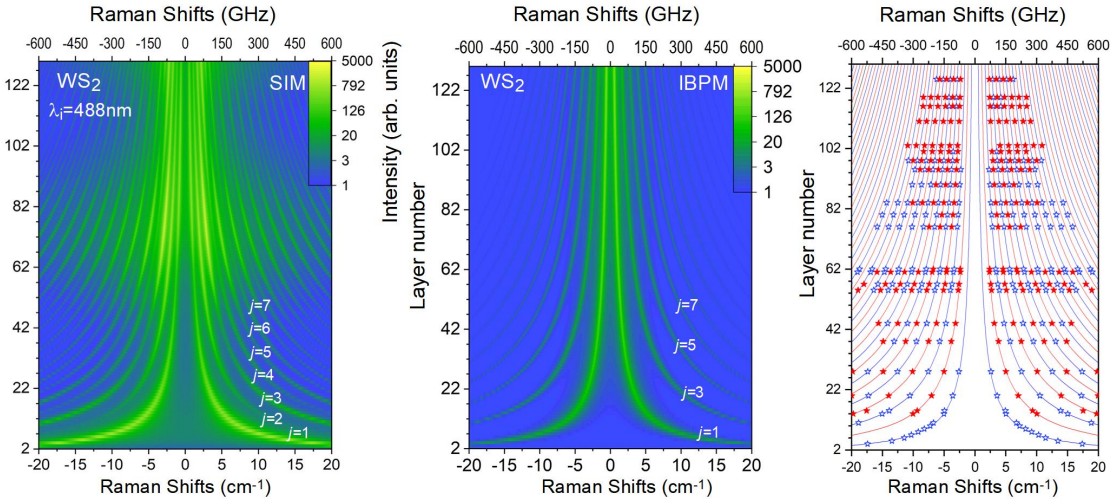


图 2：(a) 空间相干模型(SIM)、(b) 键极化率模型(IBPM)所计算 WS_2 薄片在 488nm 激发下各呼吸模的强度分布，(c)WS_2 中由传统理论预测的拉曼活性（空五星）和拉曼非活性（实五星）呼吸模.

关键词： 声子物理；键极化率模型；空间相干模型；呼吸模；各向异性材料

参考文献：

[1] Lin, M.-L.; Zhou, Y.; …; Tan, P.-H. *Nat. Commun.* **2019**, 10, 2419.

[1] Mei, R.; Lin, M.-L.; …; Tan, P.-H. *Appl. Phys. Lett*. **2024**, 16, 4004.

[2] Lin, M.-L.; Wu, J.-B.; …; Tan, P.-H. *Phys. Rev. Lett*. **2025**, 134, 096903.

[3] Xie, J.-L.; Liu, T.; …; Lin, M.-L.; Tan, P.-H. *Adv. Mater.*, **2025**, 37, 2506241.

人工智能谱学大模型的探索与思考

罗毅

肥微尺度物质科学国家研究中心，中国科学技术大学，合肥，230026

*Email: yiluo@ustc.edu.cn

光与物质相互作用是探索物质世界最重要的方式之一。光谱介于微观结构与宏观性质之间，具备可计算、可测量、可数字化、与物质结构性质均密切相关的特点，可以成为智能时代物质科学理论的基础。以光谱为核心，通过发展高通量智能谱学平台与谱学智能大模型，建立“谱-构-效”关系，有望以谱学为基础驱动化学生成和实验调控的新方法，解决传统理论难以应对的复杂体系科学问题。为此，我们构建了包含24万种分子的USTC-FG26数据库，该数据库具有均衡的官能团分布以及高质量的红外、拉曼、核磁共振、紫外-可见和X射线吸收光谱等超400万条数据。依托该数据库，构建了多模态谱-构-效智能模型，实现光谱到分子结构预测高达90%的TOP10准确率，通过多模态光谱融合演化的分子生成策略，在单目标和多目标的精准分子设计中表现出强大的性能；发展了精确预测高阶张量性质的DetaNet模型和光谱智能解析平台TranSpec，实现了分子，材料，蛋白等体系的多谱预测和光谱智能解析。同时，正在发展多谱学联用的智能平台，通过机器人驱动的标准化制样和采谱流程，实现高通量自动化的实验谱学数据采集，建立起标准化、多模态的智能谱学数据库;例如已成功开发出全自动无人值守的超快瞬态吸收光谱设备，能在一秒内采集样品从飞秒到十纳秒的全超快动力学三维光谱数据，保持数据一致性与重复性的同时极大提升了采集效率，实现秒级的物质演化过程原位探测。这些标准谱学数据和智能模型开始为具体化学问题提供高效的解决方案：使用谱学信息作为中间描述符，实现多个性能指标融合反演分子结构，精准设计出兼具对幽门螺杆菌的高效杀灭性、动物活体口服安全性、且能在胃部稳定肠道降解的分子；提出光谱生成式模型SpecGen，在光谱隐空间内进行数千万次高通量虚拟筛选，逆向解析出最优高熵催化剂配方，析氧过电位降低32 mV，稳定性超过1500小时。

关键词：机器学习；数据库；高通量；多模态

受激拉曼散射成像技术的交叉科学研究探索

季敏标 [1,*]

[1] 复旦大学物理学系，上海市杨浦区邯郸路 220 号，200433

*Email: minbiaoj@fudan.edu.cn

摘要：受激拉曼散射（SRS）显微镜是一种新型的相干拉曼散射成像技术，利用光学相干性和非线性来实现分子化学键振动信号的增强，具有无标记、分子特异性和快速成像等优势。本报告将介绍SRS成像技术的原理、发展及其在生物医学、材料科学和环境科学中的潜在应用，包括肿瘤的无标记病理学检测、二维材料表征和环境颗粒物分析等。

关键词：受激拉曼散射；无标记成像；病理诊断；生物光子学

参考文献：

[1] Liu, Z.; Chen, L.; Cheng, H.; Ao, J.; Xiong, J.; Liu, X.; Chen, Y.; Mao, Y.; Ji, M.*, *Science Advances*, **2024,** 10(13), eadn3426.

[2] Liu, Z.; Su, W.; Ao, J.; Wang, M.; Jiang, Q.; He, J.; Gao, H.; Lei, S.; Nie, J.; Yan, X.; Guo, X.; Zhou, P.*; Hu, H.*; Ji, M.*, *Nature Communications,* **2022**, 13 (1), 4050.

表面增强拉曼光谱的生物医学应用：从传感到成像



摘要：表面增强拉曼光谱（SERS）具有分子指纹光谱的高特异性和单分子水平的高灵敏度，在生物传感和医学成像等生物医学领域具有巨大的应用价值。我们将分享我们团队近年来在缝隙增强拉曼探针（GERTs）、数字胶体增强拉曼光谱（dCERS）以及 SERSome 等技术的最新进展，并重点阐述它们在代谢组学、活体成像和组织活检中的应用。

简历：叶坚，理学博士，上海交通大学生物工程学院副院长、教授、博士生导师，肿瘤系统医学全国重点实验室 PI、教育部长江特聘教授、国家自然科学基金委优秀青年基金获得者、国家级青年人才、国家重点研发计划项目首席科学家、上海市第一批（2024）颠覆性技术创新专项首席科学家、上海市东方英才计划领军项目获得者。毕业于浙江大学高分子系（2000 学士，2003 硕士）和比利时鲁汶大学化学系（2010 博士）。曾任英特尔产品（上海）有限公司材料工程师（2003-2005）、比利时微电子研究中心高级研究员（2010-2013）、美国 Rice 大学访问学者（2011）。入选英国皇家化学会 2020 Emerging Investigators，研究成果入选“2024 中国光学十大进展”，担任第三届全国生物医学拉曼光谱学术会议大会主席、第二届国际 Med-X 学术大会执行主席。在 Nature、Nature Machine Intelligence、Chem、Nature Communications 等期刊上共发表论文 140 多篇。目前任 Med-X 期刊执行主编、Journal of Innovative Optical Health Sciences、《光散射学报》等期刊编委。

光迹-腔增强拉曼增强技术与潜在应用

陈兴海 [1,*]，

[1] 北京卓立汉光仪器有限公司，北京，101102

*Email: tony-chen@zolix.com.cn

摘要

针对传统激光拉曼光谱技术在检测气体、透明液体等低吸收截面介质时存在的激发效率低、空间信号捕获率不足等问题，提出并开发了一种融合谐振腔激光增益与空间-光谱联合解析的增强型拉曼检测技术——LASE-CORE光迹-腔增强拉曼技术。该技术通过硬件光路重构，将传统点激发模式革新为线激发与腔内共振增益（CEE）相结合的模式，并采用线积分光谱收集（LIC）方式，显著提升了光子利用效率与信号收集强度。同时，通过算法双模驱动，利用面阵探测器实现了积分增强与空间成像两种探测模式的同步原位进行，可单次曝光获取“空间×光谱×强度”三维数据立方体。研究结果表明：相较于传统技术，该方案能够实现拉曼信号百倍量级的增益，检测灵敏度可达ppm级别，在气体痕量分析、液体微污染物检测等领域具备潜在应用，为透明介质的原位、高灵敏检测提供了一种创新性的解决方案。

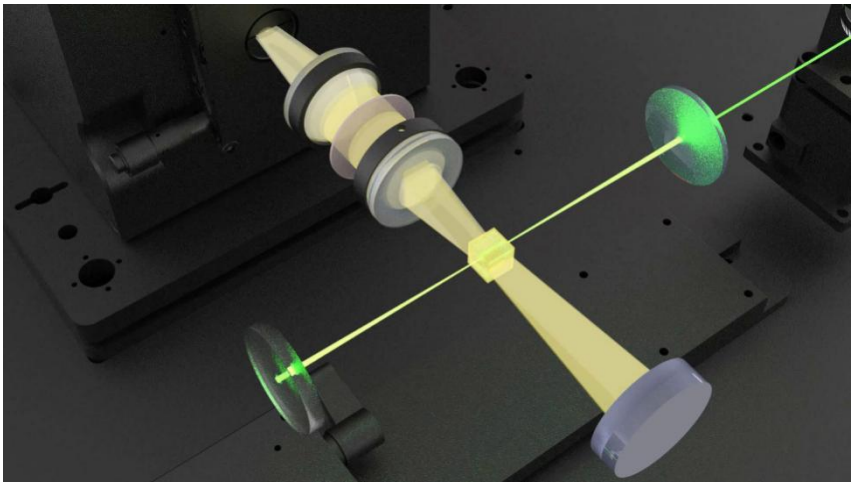


图 1：基于腔增强拉曼光谱检测系统原理图

关键词：腔增强拉曼光谱；线积分探测；空间-光谱三维成像；痕量检测

邀请报告

多物理场辅助的微流控 SERS 技术

甘愿，申珅，蒋杰，孙宁，张洁*

重庆大学光电工程学院，重庆，400044

*Email: zhangjie@cqu.edu.cn

表面增强拉曼散射（SERS）技术凭借其独特的局域表面等离子体共振（LSPR）效应，可显著增强分子拉曼信号，已成为超灵敏检测的重要工具。然而，传统静态 SERS 技术仍面临热点分布不均、信号重复性差等核心挑战。本研究提出了一种光、电、磁多场耦合协同的微流控 SERS 方法，实现了检测性能的突破。首先，利用 1550 nm 近红外激光诱导银纳米粒子定向组装，结合光热与光力效应，在微流控通道内构建出高密度、高稳定性的动态热点阵列；其次，通过在微流控芯片表面设计银纳米结构，并优化方波电位参数，实现了目标分子的高效富集与基底原位再生；进一步引入 Fe_3O_4@Ag 核壳纳米颗粒，借助外磁场精准调控颗粒空间分布，有效抑制了“咖啡环效应”，显著提升了分子吸附均匀性；进一采用数字 SERS 和动态阈值优化方法，对重金属进行检测。实验结果表明，调控策略成功解决了热点随机分布所致的信号不可重复性问题，将信号相对标准偏差（RSD）降至约 5%，检测灵敏度较传统静态 SERS 提升 1–3 个数量级。

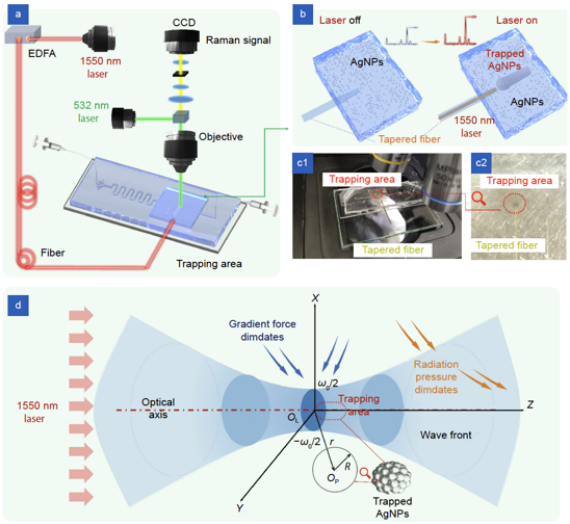


图1：光场辅助SERS原理示意图

关键词：拉曼散射，表面增强拉曼散射，动态电位调制，数字SERS

参考文献：

[1] Wang, X. ; Shen, S.; Sun, N.; Zhu, Y.; Zhang, *J. ACS Sensors*, **2025**, 10, 2, 1197–1205

[2] Sun, N.; Gan, Y.; Wu, Y.J.; Wang, X.; Shen, S.; Zhu, Y.; Zhang, *J. Opto-Electron Adv*, **2025**,8,3,240182.

[3] Sun, N.; Huang, B.; Lv, Z.Y.; Ran, N.; Gan, Y.; Zhang, J. *Analytical Chemistry*, **2024**, 96, 22, 9104–9112.

半导体 SERS 协同增强机制及其应用研究

纪伟*，王海粟，宋雨亭

东北林业大学化学化工与资源利用学院，黑龙江哈尔滨，145040

*Email: jiwei@nefu.edu.cn

在表面增强拉曼散射（surface-enhanced Raman scattering, SERS）领域，贵金属基底虽占据主导地位，但半导体纳米材料凭借其卓越的可控性与丰富的多样性，为新型高性能SERS活性材料的研发奠定了重要基础，也为SERS技术的深化发展拓宽了更多的应用可能性。近期，我们提出并构建了基于Mie共振、电荷转移共振、分子共振及激子共振的多重协同增强机制，为半导体SERS活性基底的制备和优化提供了全新理论范式。首先，基于Mie效应构筑了亚微米级球形ZnO超结构，通过精确调控其一级与二级结构，提出并验证了Mie共振与电荷转移的协同增强机制[1]；其次，基于亚微米级V_2O_5双壳层结构，实现了通过内外壳层耦合对Mie共振的精准调控[2]。结果表明，多壳层内的反射为电荷转移共振、激子共振增强提供更多的光子，显著提升半导体基底的SERS性能。再次，在协同增强机制指导下，我们成功设计并制备了多种亚微米级SERS活性半导体基底，全面验证了该协同增强机制的合理性和普适性。以此为基础，将半导体SERS技术拓展至神经递质分析、林木次生代谢产物识别、分子间非共价相互作用研究等领域[3-5]。

关键词： 半导体SERS；协同增强机制；Mie效应；电荷转移；传感应用

参考文献：

[1] Ji, W.; Li, L.; Song, W.; Wang, X.; Zhao, B.; Ozaki, Y. *Angew. Chem. Int. Edit.* **2019**, *58*, 14452.

[2] Ji, W.; Li, L.; Guan, J.; Mu, M.; Song, W.; Sun, L.; Zhao, B.; Ozaki, Y. *Adv. Opt. Mater.* **2021**, *9*, 2101866.

[3] Dong, Y.; Xie, Q.; Wu, S.; Li, J.; Sun, L.; Ji, W. *J. Phys. Chem. C* **2023**, *127*, 9418.

[4] Li, J.; Xie, Q.; Li, J.; Sun, L.; Xie, Y.; Ozaki, Y.; Ji, W. *Adv. Funct. Mater.* **2024**, *34*, 2400523.

[5] Zhao, J.; Sun, L.; Dong, Y.; Chang, Y.; Wang, H.; Liu, Z.; Li, J.; Xie, Y.; Ji, W. *Nano Lett.* **2025**, *25*, 6645.

电化学表面增强拉曼光谱及吸附分子的光电化学反应动力学研究

吴泰锐[1]，陈来科[1]，Javaid Huraiza[1]，翁婷炜[1]，Sajid Zubia[1]，张雨琲[1]，袁啸天[1]，Javed Ifrah[1]，吴小通[1]，周剑章[1]，吴德印[1,*]，田中群[1]

[1] 厦门大学化学化工学院，表界面化学全国重点实验室，福建 厦门，361005

*Email: dywu@xmu.edu.cn

本文介绍课题组在电化学表面增强拉曼光谱（SERS）研究中的化学增强机理(CM)和以及等离激元共振(SPR)光电化学反应的研究进展。首先考虑在SERS光谱研究中的化学增强机理，考虑在化学增强中最重要的电荷转转移增强，也考虑化学吸附作用对部分振动模的选择性增强以及染料分子的自身共振产生的表面共振增强拉曼散射效应。对于电荷转移增强机理，我们考虑了从金属到分子以及电荷从分子到金属两种情况。前者典型的分子体系是吡啶在银表面的吸附，而后者典型的体系是从对巯基苯胺到银表面的未占据轨道。其次，因SPR热点通常也是化学反应的热点，我们考虑了SPR弛豫产生热载流子-热电子和热空穴产生后诱导新型光电化学反应机制和反应动力学。最后，我们也简要介绍苄基硫醇吸附在金银表面SERS光谱中SERS谱线加宽机制，由确认该分子中巯基硫原子更偏向吸附在银表面的穴位。

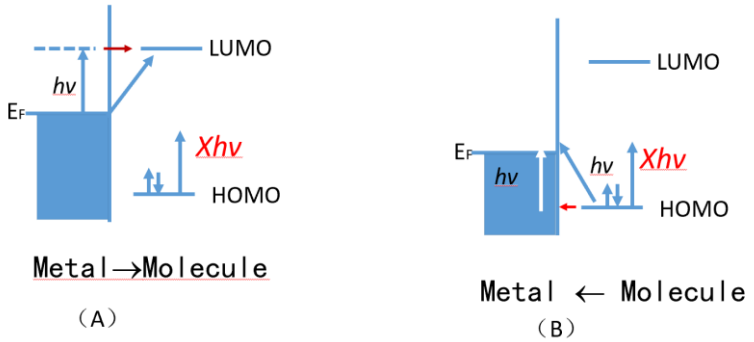


图1: SERS化学增强机理中直接和间接电荷转移机理。（a）金属到分子的电化学转移；（b）分子到金属的电荷转移机理.

关键词： SERS，SPR，银金纳米结构电极，电荷转移机理，等离激元共振光电化学

新污染物超灵敏 SERS 分析与挑战

占金华[1,*]，王彤[1]，李舒[1]，陈静[1,*]

[1] 山东大学化学与化工学院，中国山东省济南市山大南路 27 号，250100

*Email: jhzhan@sdu.edu.cn

新污染物（ECs）引起了世界各地的广泛关注[1]。ECs在环境中的含量很低且形态复杂，开发简便、高灵敏的新污染物动态分析方法尤为重要。表面增强拉曼光谱（SERS）作为分子特异性的超灵敏分析技术，有望成为一种普适性的新污染物检测手段[2]。作为一种表面敏感技术，待测物必须足够靠近SERS基底表面才能获得有效信号增强[3]。由于ECs与SERS基底的亲和力较弱，实际样品中ECs的浓度低以及样品基质的干扰，通常需要进行必要的预处理。样品前处理和SERS的集成是实现ECs超灵敏和原位动态SERS分析的前提和关键。我们课题组开发了一系列针对小分子和离子污染物的萃取-SERS（Ex-SERS）技术[4-5]。为实现对真实环境体系中ECs的动态监测，我们在SPME-SERS的基础上配备了电增强吸附（EE−SPME−SERS），以进行快速可逆吸附，实现对药物和个人护理产品的原位动态监测[6]。针对颗粒污染物的形态特点，我们提出了膜过滤和SERS联用方法，通过双功能银纳米线膜实现对痕量纳塑料的高效富集和灵敏检测[7]，并进一步将尺寸分级过滤与SERS相结合，提出了将拉曼或SERS与尺寸分馏过滤（SFF-R/S）相结合的系统定量方法和斜率匹配策略，实现对微纳塑料的逐级分析和准确定量[8]。为了更快地实现对纳塑料的尺寸分辨检测，我们基于纳塑料的胶体性质，利用不同尺寸纳塑料之间电迁移行为的差异，建立电吸附与SERS联用技术（ES-SERS）[9]，通过调节电吸附时间，选择性地吸附和检测不同尺寸下的纳塑料，为纳塑料的尺寸分辨检测提供了一种简单而高效的SERS分析方法。

关键词： SERS；新污染物；样品前处理；微纳塑料

参考文献：

[1] Zhou, Y.; Zhang, C.; Huang, D.; Wang, W.; Zhai, Y.; Liang, Q.; Yang, Y.; Tian, S.; Luo, H.; Qin, D. *Appl. Catal. B: Environ.* **2011**, *301*, 120749.

[2] Zong, C.; Xu, M.; Xu, L.-J.; Wei, T.; Ma, X.; Zheng, X.-S.; Hu, R.; Ren, B. *Chem. Rev.* **2018**, *118*, 4946−4980.

[3] Wang, W.; Li, Z.; Gu, B.; Zhang, Z.; Xu, H. *ACS Nano* **2009**, *3*, 3493−3496.

[4] Lai, Y.; Cui, J.; Jiang, X.; Zhu, S.; Zhan, J. *Analyst* **2013**, *138*, 2598-2603.

[5] Shi, Y.; Wang, W.; Zhan, J. *Nano Res.* **2016**, *9*, 2487-2497.

[6] Li, S.; Lv, X.; Yang, Q.; Zhang, S.; Su, J.; Cheng, S., Lai, Y.; Chen, J.; Zhan, J. *Anal. Chem.* **2022**, *94*, 9270-9277.

[7] Yang, Q.; Zhang, S.; Su, J.; Li, S.; Lv, X.; Chen, J.; Lai, Y.; Zhan, J. *Environ. Sci. Technol.* **2022**, *56*, 10818-10828.

[8] Guo, X.; Li, S.; Wang, T.; Su, J.; Liu, Y.; Chen, J.; Zhan, J.; *J. Harzard. Mater.* **2025**, *494*, 138488.

[9] Wang, T.; Li, S.; Mu, R.; Lu, Z.; Su, J.; Chen, J.; Zhan, J. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 19545-19552.

柔性拉曼传感器的气体小分子精准测量研究

李丹*

上海应用技术大学，上海市奉贤区海泉路 100 号，201418

*Email: dany@sit.edu.cn

本研究发展一种纸基传感器件（PAD），可实现二氧化硫（SO_2）比色法和表面增强拉曼光谱（SERS）双传感检测（Fig.1）。该纸基传感器件具有特征的紫外吸收峰且呈现深蓝色，当加入SO_2后会诱导卡尔-费休反应，导致其表面褪色并产生明显的SERS信号，因此，该纸基传感器不仅可用于SO2的比色传感器，还可作为一种高灵敏SERS基底用于SO_2的分析检测。该纸基传感器件对于实际酒样中SO_2的检测结果与传统Monier-Williams法分析结果匹配度较好，因而在气体分子即时检测和精准分析中显示出巨大的应用潜能。

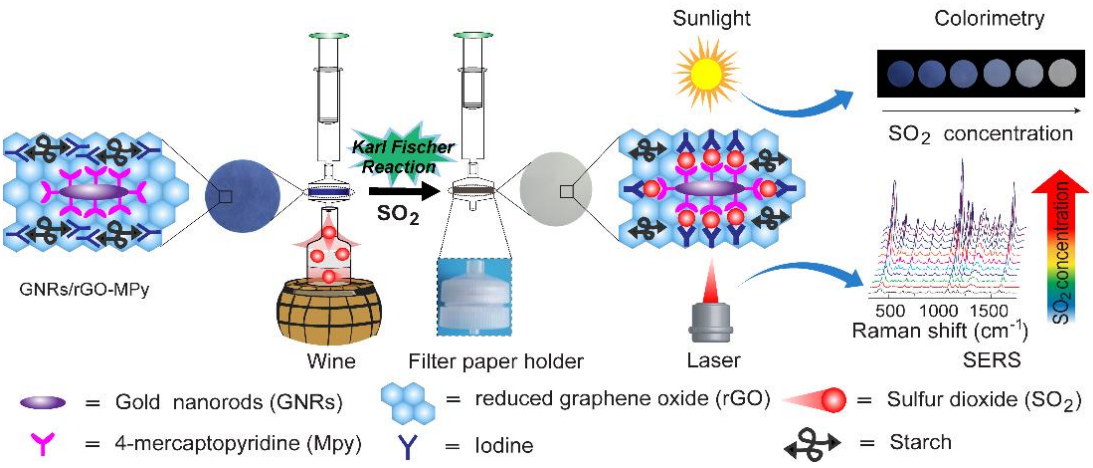


Fig. 1 Schematic illustration of the PAD procedure and its dual-modal sensing of SO_2 in wine.

关键词： 拉曼光谱；柔性材料；气体分子；精准分析

参考文献：

[1] Li, D.; et. al., *Anal. Chem.* (Cover Paper) **2024**, *96*, 15117-15125.
[2] Li, D.; et. al., *Anal. Chem.* (Cover Paper) **2024**, *96*, 9834-9841.
[3] Li, D.; et. al., *Anal. Chem.* (Cover Paper) **2021**, ***93***, 4924-4931.
[4] Li, D.; et. al., *Anal. Chem.* **2019**, ***91***, 11192-11199.
[5] Li, D.; et. al., *Anal. Chem.* **2018**, ***90***, 5719-5727.

“Particle-in-Cavity”SERS结构的设计策略及应用

郁菁[1,*]，赵晓菲[1]，李振[1]，张超[1]

[11] 山东师范大学物理与电子科学学院，济南市长清区大学科技园大学路1号，邮编：250358

*Email: yujing1608@126.com

摘要正文：表面增强拉曼散射（SERS）技术作为一种高灵敏无损“指纹”光谱技术，在微观物化特性分析方面具有不可替代的作用，不断优化SERS技术对于研究纳米尺度下的新奇物理、化学现象具有重要的现实意义。“热点”构筑是SERS领域常用的关键技术之一，可以有效调控待测位点内局域电场分布及电场强度，提高热点内分析物散射截面，进而提升SERS检测灵敏度。然而，随着“热点”构筑技术的不断完善，SERS最低检测限已达单分子水平，检测灵敏度不再是制约SERS检测发展的主要因素。目前，如何针对具体的SERS应用环境，发展面向不同应用场景的“指向性”SERS“热点”，并进一步拓展SERS技术的应用范围，是现阶段SERS技术发展过程中面临的瓶颈问题之一。针对此问题，我们结合“Particle-in-Cavity”杂化模型，发展了一系列适用于不同检测场景的SERS基底[1-5]，并获得了部分令人满意的结果。

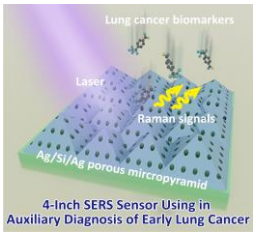


图1：硅基“Particle-in-Cavity”SERS衬底用于癌症患者呼出气体中VOCs检测示意图

关键词：表面增强拉曼散射；热点调控；“Particle-in-Cavity”结构

参考文献：

[1] X. Lin; F. Lei*; X. Liang; Y. Jiao; X. Zhao; Z. Li; C. Zhang*; **J. Yu***, ***Opto-Electronic Advances***, **2025**, *8*, 240260.

[2] X. Guo; X. Cai; F. Lei*; Y. Jiao; X. Zhao; Z. Li; C. Zhang*; B. Man*; **J. Yu***, ***Advanced Functional Materials***, 2024, *35*, 202416769.

[3] L. Wang; C. Li*; C. Cao; F. Lei*; X. Zhao; Z. Li; C. Zhang; Y. Jiao*; **J. Yu***, ***Advanced Functional Materials***, 2024, *35*, 202416789.

[4] Y. Che; Y. Ni; Y. Jiao; F. Lei*; C. Liu; X. Zhao; Z. Li; C. Zhang*; **J. Yu***, ***ACS Photonics***, 2024, *11*, 3331.

[5] Y. Gao; H. Zhu; X. Wang; R. Shen; X. Zhou; X. Zhao; Z. Li; C. Zhang; F. Lei*; **J. Yu***, ***Small***, 2023, *19*, 2207324.

电荷转移 SERS-催化协同分析

宋薇*

吉林大学，吉林省长春市，130012

*Email: weisong@jlu.edu.cn

表面增强拉曼散射（SERS）以其超高的灵敏度，是揭示纳米材料表面分子特性及分子-基底相互作用的理想工具。我们聚焦于合理设计与构筑兼具优异SERS活性与催化功能（催化-SERS协同）的纳米材料。此类材料不仅为深入探究催化反应机制提供了独特窗口，也为实现基于催化的超灵敏分析检测奠定了关键基础。我们成功构筑了多种复合纳米材物，利用其显著的催化-SERS协同效应，实现了对外泌体、总抗氧化能力等目标物的超灵敏、高选择性SERS检测[1-2]。我们开发了高熵合金材料，创新性的提出了原子轨道驱动的电荷转移SERS增强机制[3]。进一步地，我们开发了半导体/半导体复合纳米材料体系，利用SERS光谱实时监测界面电荷转移过程，并将其作为探针成功预测了材料的光催化活性，为理性设计高效催化剂提供了重要的光谱学依据[4]。利用SERS技术原位、实时地研究催化反应动力学，追踪表面物种、反应中间体及反应路径，从而深入解析催化机制。这种将催化功能与SERS检测能力集成的协同策略，在环境污染物的实时监控和生物医学诊断与治疗监测等领域展现出广阔的应用前景。

关键词： 催化；表面增强拉曼光谱；电荷转移；检测

参考文献：

[1] Zhao, Q.; Cheng, X.; Hu, S.; Zhao, M.; Chen, J.; Mu, M.; Yang, Y.; Liu, H.; Hu, L.; Zhao, B.; Song, W. Biosens. Bioelectron. 2024, 258. 116349.

[2] Shang, L.; Wen, S.; Liu, D.; Chen, J.; Mu, M.; Duan, X.; Xu, M.; Yang, J.; Wu, Y.; Zhao, B.; Song, W. Sensor Actuat. B-Chem. 2024, 417. 136075.

[3] Liu, D.; Duan, P.; Chen, J.; Mu, M.; Yang, Y.; Ma, F.; Zhao, B.; Song, W.; Laser Photonics Rev. 2025, e01214.

[4] Chen, J.; Li, M.; Wang, X.; Liu, H.; Jiang, W.; Zhao, B.; Song, W. Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202424986.

催化剂表面化学反应的“核-卫星”增强拉曼研究

张茂笛，王腾，杜晓萌，胡策军，胡艳芳，谢微*

南开大学化学学院

*Email: wei.xie@nankai.edu.cn

纳米颗粒催化体系成分复杂难以表征，检测其表面中间物种和寻找催化活性位点是多相催化表征的关键。表面增强拉曼光谱（SERS）是一种高灵敏度和高特异性的检测方法，且具有很好的表面选择性，可专注检测表界面物种而不会受到其它组分信号的干扰，进而分析反应物种的变化过程。对催化反应进行SERS检测的关键在于制备同时具有催化和等离激元活性的金属纳米结构。我们设计合成了“核-卫星”双功能SERS基底纳米粒子，其中“核”为金、银纳米粒子增强基底，“卫星”则是催化剂，包括金属及金属氧化物纳米粒子，实现了多种类型催化反应的SERS检测。我们在一些本身不具备等离激元活性的纳米粒子表面检测反应中间物种[1,2]，并且可以通过关键中间物种的特征振动频率变化判断吸附位点[3,4]。研究结果对于理解界面化学反应机制并进一步设计制备高活性和高稳定性纳米催化剂具有重要的意义。

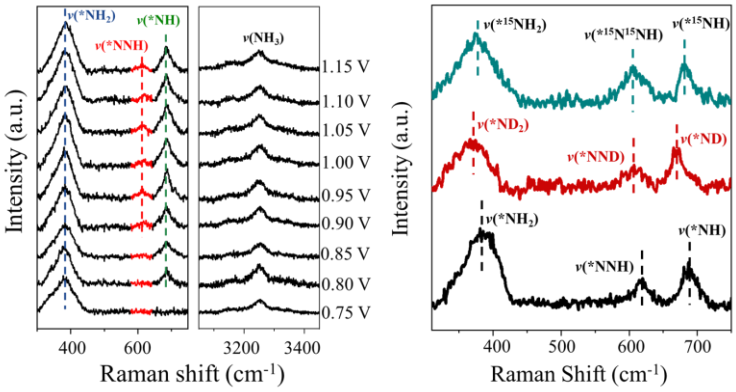


图1：纳米催化剂表面化学反应的增强拉曼光谱

关键词：SERS；纳米粒子；催化反应

参考文献：

[1] Zhang, M. D.; Wang, T.; Du, X. M.; Mao, Y.; Zhu, A. N.; Tong, L. B.; Xie, W. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 28331.

[2] Du, X. M.; Du, A. X.; Wang, D.; Mao, Y.; Zhang, Z.; Xie, W. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 8083-8087.

[3] Wang, Y.; Li, Y. L.; Yang, X.; Wang, T.; Du, X. M.; Zhu, A. N.; Xie, W. W.; Xie, W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *63*, e202318817.

[4] Hu, C. J.; Hu, Y. F.; Fan, C. H.; Yang, L.; Zhang, Y. T.; Li, H. X.; Xie, W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 19774.

准金属表面增强拉曼光谱基底的发现和应用

席广成

中国质量检验检测科学研究院，工业与消费品安全研究所，北京亦庄荣华南路 11 号，100176

*Email: xiguangcheng@caiq.org.cn

随着我国消费品市场的高速增长，消费品重大安全事件屡见报道，如“毒跑道”、“毒沙发”、“致癌性婴童用品”等，严重威胁消费者生命健康。针对公共安全检测领域国家重大需求为导向，以发展 SERS 新原理和新方法为目标，开创了准金属 SERS 研究，取得了以下成果：(1) 区别于传统贵金属和半导体 SERS 基底，提出了准金属 SERS 新概念，发展了基于准金属的等离子体共振效应协同界面电荷传输的 SERS 增强新机制,为高性能SERS 传感材料的选择和设计提供了指导。(2) 发展了准金属柔性 SERS 基底的有害物检测新策略，构建了大面积信号均匀准金属氮化物/碳化物纳米结构基底，大幅提升了非贵金属 SERS 基底的信号均匀性、稳定性和灵敏度。(3) 初步建立了基于准金属 SERS 基底的分离/分析集成式检测方法，实现了消费品等复杂基质产品中多组分禁限用物质的连续在线分离和高通量检测，为高灵敏、低成本现场快速检测新型 SERS 器件研制提供了新思路。

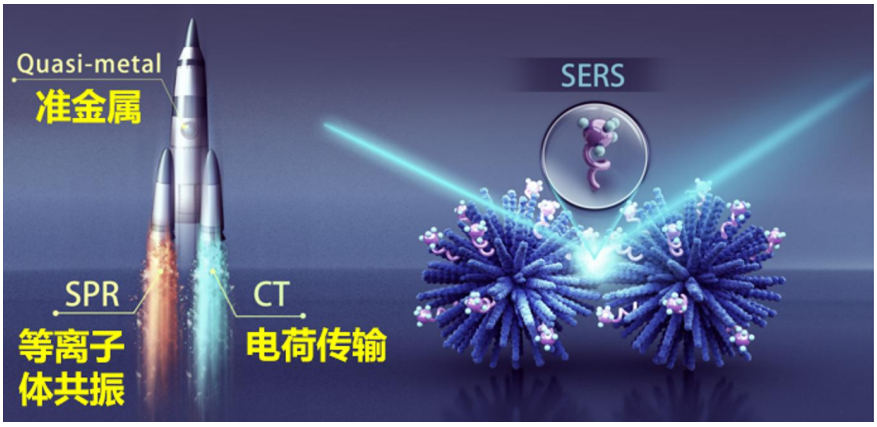


图1：基于准金属纳米结构的表面增强拉曼光谱增强机制示意图

关键词：表面增强拉曼光谱；准金属；协同增强；纳米结构；消费品检测

参考文献：

[1] Zhang, L.; Li, J. F.; Wei, G. Y.; Yang, H. F.; Bai, H.; Xi, G. C.* *Angew. Chem. Int. Ed*. **2024**, *63*, e202316936.

[2] Song, X. Y.; Li, Y. H.; Yin, M.; Li, J. F.; Yang, H. F.; Liu, W.; Wang, X. T.; Xi, G. C.* *Nat. Commun*. **2025**. *16*, 2678.

新型光镊-拉曼光谱联用技术对生物分子进行从单分子到单细胞水平的表征

黄晋卿 [1,*]

[1] 香港科技大学，清水湾，香港

*Email: jqhuang@ust.hk

在生理环境中对单个或少量生物分子进行精准表征，面临着难以排除周围环境干扰、无法捕捉分子稀有构象的挑战。本研究提出一种新型光镊耦合拉曼光谱技术，可实现从单分子到单细胞水平的原位表征，为解决上述挑战提供关键工具。这个新技术的核心源于两种技术的协同互补：其一，单分子表面增强拉曼光谱（SERS）作为表面敏感技术，能直接探测单个分子的振动特征，突破依靠集体信号取平均的常规宏观测量局限，获取独特的分子微观信息；其信号放大依赖金属纳米结构中局域表面等离激元共振的激发，进一步突破纳米级空间探测的光学衍射极限。其二，光镊技术可对目标物体进行高精度三维操控，实现主动控制，且具备亚毫秒级时间反馈精度、亚皮牛顿级力分辨率与亚纳米级距离灵敏度。二者结合构建了“主动操控-动态检测”的新型测量模式，带来了前所未有的时空分辨率与操控能力。

基于该技术平台，本研究通过控制两颗包覆银纳米颗粒的二氧化硅微球，对溶液中目标蛋白质进行检测，成功实现可调控、可重复的 SERS 信号增强，检测灵敏度达到单分子水平。在具体应用中，该技术首次解析了生理浓度下 α-突触核蛋白（α-synuclein）的少量瞬时构象体，这类构象体是该蛋白发生淀粉样聚集（与帕金森病直接相关）的关键诱因，过去一直被传统宏观测量的平均信号掩盖 [1]；同时，通过激光开关控制等离子体捕获以构建动态纳米腔，该技术还实现了对 pH 敏感型人胰岛淀粉样多肽（hIAPP）稀有构象体的高灵敏度、高效率检测 [2]。此外，该集成平台还可拓展至蛋白质液-液相分离过程监测、细胞增殖动态追踪等场景，为复杂生命体系中单个生物分子的结构解析与功能调控开辟了新路径 [3]。

关键词：单分子表面增强拉曼光谱；光镊；单分子力学操控；新技术研发；蛋白结构解析

参考文献：

[1] Dai, X., Fu, W., Chi, H., Mesias, V., Zhu, H., Leung, C. W., Liu, W.*, Huang, J.* *Nat. Comm.* **2021**, 12, 1292.

[2] Fu, W., Chi, H., Dai, X., Zhu, H., Mesias, V., Liu, W.*, Huang, J.* *Nat. Comm.* **2023**, 14, 6996.

[3] Yi, Q., Dai, X., Park, B. M., Gu, J., Luo, J., Wang, R., Yu, C., Kou, S., Huang, J.* Lakerveld, R.*, Sun F.* *Sci. Adv.* **2022**, 8 (44), eade0073.

SERS 精准检测突破：可控取向、主动传质与数字化定量

李俊容

华中师范大学，湖北 武汉，430079

*Email: junrong.li@ccnu.edu.cn

表面增强拉曼光谱（SERS）技术结合纳米材料独特的光学和物理学的性质以及与生物体系良好的兼容性等优势，已成功应用于呼吸道传染性疾病和癌症相关生物标志物的检测。然而，现有 SERS 平台在复杂人体液分析中仍面临一些瓶颈：例如目标物识别效率因分子取向随机性而限制检测灵敏度、被动传质动力学速率不足制约响应速度、以及电磁场异质性导致的信号波动阻碍精准定量。鉴于上述挑战，我们开展了如下工作：1）**创新开发兼具识别位点最优取向与高效功能化特性的纳米酵母试剂，建立了高灵敏与简便易行的SERS分析平台**[1]；2）**发展了基于电流体动力学的主动传质调控新技术，更好的满足了SERS分析平台在快速检测方面的需求**[2]；3）**建立了数字化SERS单分子水平检测新方法，打破了传统SERS分析中拉曼信号强度波动大对定量的限制，实现了SERS准确定量分析**[3]。

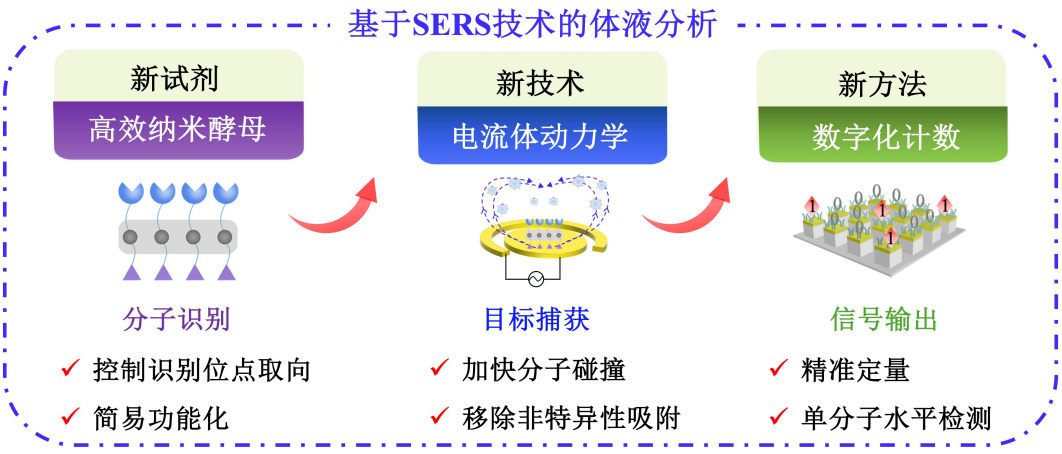


图1：发展融入纳米酵母、电流体动力学和数字化技术的SERS平台用于液体活检

关键词：表面增强拉曼光谱；液体活检；纳米酵母；电流体动力学；数字化检测

参考文献：

[1] **Junrong Li,** Christopher B Howard*, Shuvashis Dey, Kym Lowry, David M. Whiley, Simon Puttick, Stephen Rose, Richard J. Lobb, Alain Wuethrich*, Selvakumar Edwardraja*, and Matt Trau*. *Nat. Nanotechnol.* **2023**, 18, 1222-1229.

[2] Tuotuo Zhang, Bin Li, Alain Wuethrich, Huixing Liu, Quan Zhou, Zhuoran Hu, Huiling Wang, Matt Trau, Feng Bao, *Jian Li, *Yao Sun, and **Junrong Li***. *Anal. Chem.* 2025, DOI: 10.1021/acs.analchem.5c02349.

[3] **Junrong Li,** Alain Wuethrich*, Abu A.I. Sina, Han-Hao Cheng, Yuling Wang*, Andreas Behren, Paul N. Mainwaring, and Matt Trau*. *Nat. Commun.* **2021**, 12, 1087.

等离子体纳米孔捕获单粒子：迈向单分子拉曼序列分析

黄建安 [1,*]

[1]University of Oulu，Aapiestie 5A，90220 Oulu, Finland

*Email: jianan.huang@oulu.fi

蛋白质是生物系统中的“主力军”，可作为生物标志物用于表征细胞功能和疾病进展。由于蛋白质无法扩增，导致蛋白质组学严重落后于基因组学和转录组学，这不仅阻碍了其机制研究，也阻碍了其临床应用。与DNA相比，蛋白质具有折叠的三维结构，由20种带不同电荷的氨基酸组成。这些特性限制了单分子基因测序方法（荧光或者电流）难以用于单分子蛋白质测序，因为它们只能检测构成蛋白质一级序列的4种氨基酸。

在本次报告中，我将介绍我团队最近利用等离子体纳米孔用于单分子拉曼光谱分析的研究成果。事实上，每个氨基酸分子都有其独特的指纹拉曼散射信号可用于测序。但单个氨基酸的拉曼信号过于微弱，即使使用表面增强拉曼光谱 (SERS) 也无法检测到。我们的工作利用金纳米孔捕获单个金纳米粒子来产生单个等离子体热点（图1），通过SERS检测单条多肽链上的单个氨基酸证实了热点的高分辨率，并实现对构成蛋白质的所有20种氨基酸的单分子拉曼检测[1]。配合深度学习模型，我们首次在单分子水平上检测到了微小的翻译后修饰：17 Da的羟基化[2]。我们进一步利用拉曼相关光谱，可以长时间地观察DNA在金粒子表面漂移的动力学[3]。我们的工作为增强拉曼单分子测序技术打下了坚实的基础。

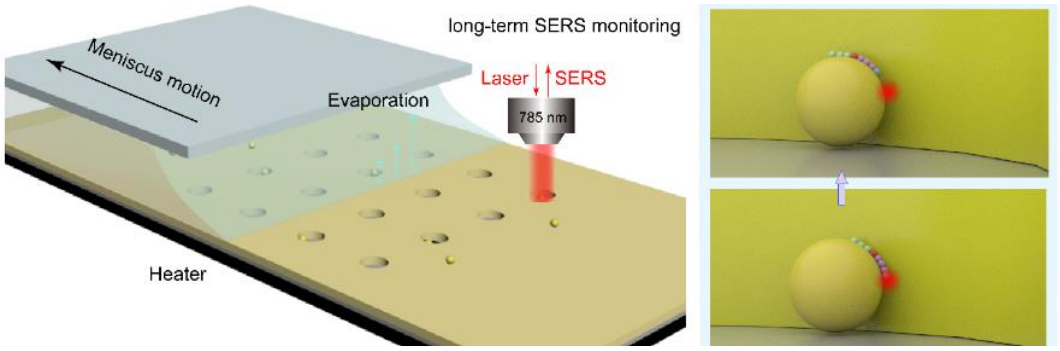


图1：金纳米孔俘获单个金粒子构建单个等离子体热点用于增强拉曼观测单分子DNA动力学[3]

关键词：纳米孔；表面增强拉曼光谱；单分子测序；深度学习模型；DNA

参考文献：

[1] Y. Zhao, et al., *ACS Photonics*, **2022**, 9 (3), 730-742.

[2] Y. Zhao, et al., *Nano Letters,* **2025**, 25, 18, 7499–7506

[3] P. Xin, et al., *ACS Nano,* **2025**, in press, https://doi.org/10.1021/acsnano.5c12000

SERS 中泊松统计分布与定量检测技术

李志鹏[1,*]，杨龙坤[1]，魏越[1]

[1] 首都师范大学，纳米光电子学北京市重点实验室，北京市西三环北路 105 号，100048

*Email: zpli@cnu.edu.cn

表面增强拉曼散射（SERS）能够在纳米尺度实现分子结构信息的超灵敏/超痕量检测，在生物检测、电化学、催化、环境监测与传感等领域展现出重要应用价值[1]。然而，SERS涉及复杂的纳米结构-分子-光相互作用，为其定量化研究带来了巨大挑战。当待测物浓度降至nM以下（甚至低至pM），SERS信号的一致性变差。当浓度进一步降至fM量级时，SERS便进入单分子光谱测量范畴——此时单分子光谱的波动特性使得光谱强度与浓度变化无关，传统基于强度的定量方法失去了物理基础。我们将SERS成功概率作为观测参量(图1)，提出了一种新的超灵敏SERS定量物理原理[2, 3]。实现了1 fM浓度下的定量检测。基于SERS概率与分子数量关系的泊松统计，实验室上利用双分析物实验确定了SERS成功率与光谱平均分子数的关联，揭示了SERS成功率的物理微观本质[3]。

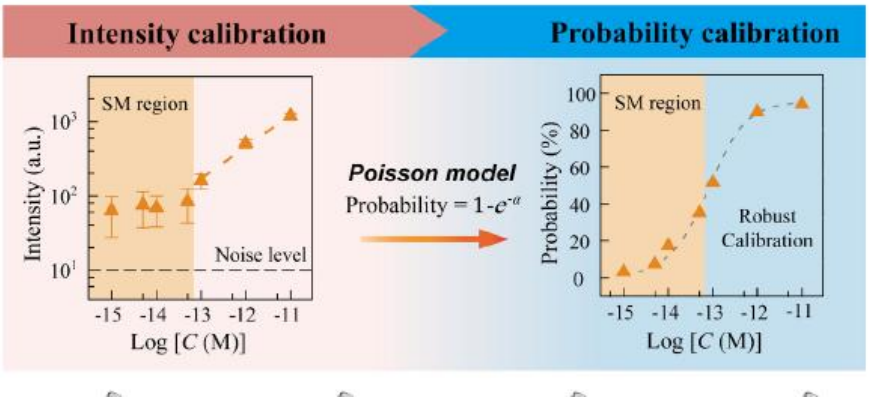


图1：SERS成功率的泊松统计模型

关键词：SERS；定量检测；泊松分布；单分子检测

参考文献：

[1] Xu, H. X.; Bjerneld, J.; Käll M.; Börjesson, L.; *Phys. Rev. Lett.* **1999**, *83,* 4357.

[2]Yan, W. J.; Yang, L. K.; Chen, J. N.; Wu, Y. Q.; Wang, P. J.; Li, Z. P. *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1702893.

[3] Zhang, H.; Yang, L. K.; Zhang, M.; Wei, H.; Tong, L. M.; Xu, H. X.; Li, Z. P. *Nano Lett*. **2024**, *24*, 11116-11123.

SERS 纳米阵列的电子能量调控及等离激元催化应用

郝祺 [1,*]

[1] 东南大学物理学院，量子材料与信息器件教育部重点实验室，江苏南京，211189

*Email: qihao@seu.edu.cn

等离激元共振 (LSPRs) 会产生高能量的热载流子，这些载流子会诱导一系列复杂的表界面过程，其物理机制难以确认。本文将通过纳米阵列技术对上述问题开展研究，这种技术有两个主要优势：1. 表面没有活性剂。表面活性剂不仅可能导致表界面副反应，还会改变纳米材料的费米能级，从而干扰原有的研究过程；2. 纳米阵列结构稳定，能够有效抵抗酸碱盐、光、热等外部刺激，为研究提供稳定可持续的LSPRs模式。

基于上述优势，我们通过纳米阵列，并结合液相SERS技术，针对等离激元表界面的光与物质相互作用开展了一系列研究。通过这些研究成果，本报告将尝试回答以下主要问题：1) 激光与载流子的关系是什么，为什么非共振激光可以诱导表界面过程；2) LSPRs中的分子氧化和还原的机制是什么，热载流子与这些机制是否直接相关；3) 这些研究成果对认识Au、Ag等LSPRs材料的意义是什么，能够从哪些角度拓展LSPRs和SERS的应用领域。

关键词：等离激元；表面增强拉曼散射；纳米阵列；催化；表界面

参考文献：

1. Y. Wei, X. Fan, D. Chen, X. Zhu, L. Yao, X. Zhao, X. Tang, J. Wang, Y. Zhang, T. Qiu,* and Q. Hao*, Probing Oxidation Mechanisms in Plasmonic Catalysis: Unraveling the Role of Reactive Oxygen Species, *Nano Lett*. 24, 2110-2117 (**2024**)

2. Y. Wei, D. Chen, X. Fan, X. Tang, L. Yao, X. Zhao, Q. Li, J. Wang, T. Qiu, and Q. Hao*, Unveiling Plasmon-Induced Suzuki–Miyaura Reactions on Silver Nanoparticles via Raman Spectroscopy, *ACS Catal*. 14, 15043-15051 (**2024**)

3. Y. Wei†, Q. Hao*†, X. Fan, M. Li, L. Yao, G. Li, X. Zhao, H. Huang and T. Qiu, Investigation of the Plasmon-Activated C-C Coupling Reactions by Liquid-State SERS Measurement. *ACS. Appl. Mater. Interfaces.* 14, 54320-54327 (**2022**).

题目：电调控表面增强拉曼散射研究

表面增强拉曼散射（SERS）已发展成为一种强大的分子检测技术。然而，对于微量检测应用而言，其灵敏度和选择性检测能力仍需进一步提高。单纯依靠贵金属纳米结构的结构优化来提高 SERS 增强效果已发展了五十年，且已达到极限。必须探索新的策略来进一步增强 SERS 能力。能否将自供电材料电场与 SERS 效应的电磁场增强和电荷转移机制相结合，以进一步增强 SERS 效果？因此，在近期工作中，我们将热释电、磁电和挠曲电效应引入 SERS 基底的制备中，使基底的 SERS 活性进一步提高了三个数量级，并引入了一些其他特性。此外，在一定程度上解决了选择性检测的难题。我们相信这一策略有望在 SERS 领域得到广泛应用。

实测挑战下的 SERS 基底构建：从热点调控到空间信号解耦

王艳玲 [1*]

[1] 湘潭大学湖南先进传感与信息技术创新研究院，湖南，411105

*Email : yling_wang@xtu.edu.cn

表面增强拉曼散射（SERS）技术凭借其超高灵敏度和分子指纹识别能力，在生化环境检测等领域应用前景广阔。然而，在真实测量环境中，受光场覆盖有限、热点分布不均、背景干扰及空间采样随机性等影响，其信号可重复性与定量分析精度受限。针对此，我们以晶体生长理论为设计基石，提出绿色可控构筑高密度束缚热点的清洁 SERS 基底策略，实现了结构精密性与表面洁净度的双重优化。借助等离子体加工与电子束曝光技术，在与实际光场条件高度一致的环境中，实现了对热点位置与强度的无盲选可设计化调控。通过提出空间信号解耦机制，在有限光场下高效采集并有效分离重叠目标信号，显著提升信号的均一性与可靠性；最终或可通过算法对多光谱数据集进行降噪与信息可靠转化，以期为 SERS 技术迈向复杂实际场景的精准可靠应用提供一些研究思路与尝试。

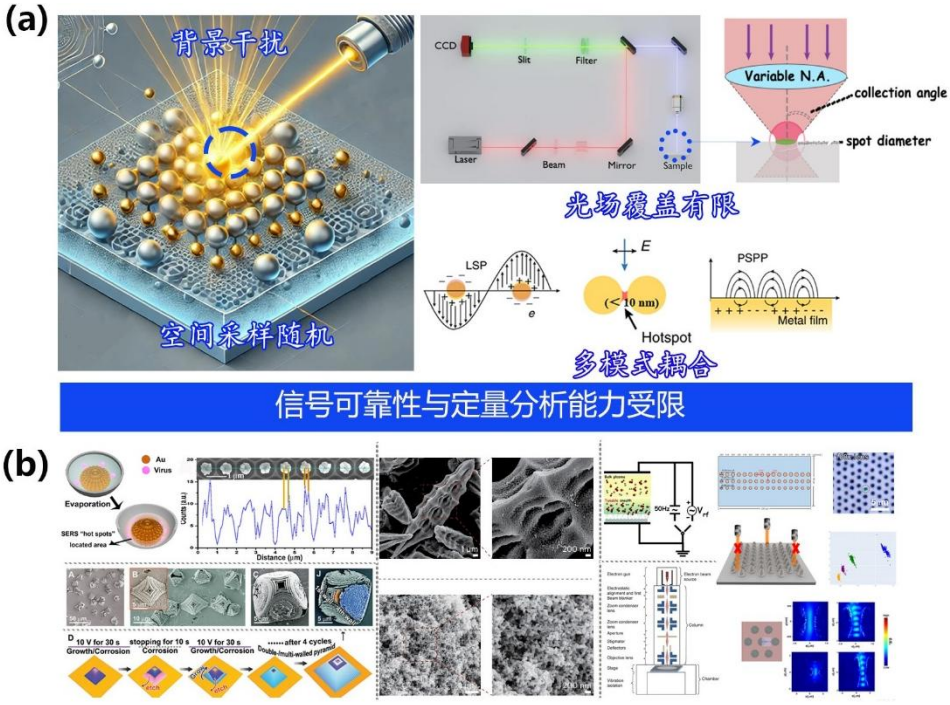


图1：（a）可靠SERS技术限制因素；（b）报告人相关工作概览.

关键词：表面增强拉曼散射；纳米光子学；热点与光场调控。

污水多维 SERS 化学指纹信息表征策略与深度学习解析

范美坤*，王雪擎，唐鹏，魏岚

[1] 西南交通大学，四川成都，610011

*Email: mkfan@swjtu.edu.cn

为应对严峻的水环境污染问题，构建快速、精准的污染源识别与追溯技术至关重要。SERS技术因其高灵敏度与指纹识别特性，在获取污水整体化学信息方面潜力巨大，但传统的无标记SERS策略易受组分竞争吸附等因素影响，难以识别组分相似或浓度差异微弱的样本。为解决此局限，本文提出了一种多维度SERS化学指纹表征新策略。该策略从基底表面特性、样本物化状态（pH）及组分分子结构（氧化还原）三个维度入手，通过构建多通道调控方法差异化激发污水组分的SERS响应，生成信息更丰富的融合指纹图谱，并结合深度学习模型进行高效解析。

研究首先构建了基于基底调制、pH调控及氧化还原调控的三种多通道SERS策略。实验结果表明，通过调控样本pH值或氧化还原状态，能显著增强对污水样本的区分能力。结合二维卷积神经网络（2D-CNN）及其衍生模型（如2D-CNN-SA等），优化后的策略对不同类型及混合污水样本的识别准确率最高可达99.61%，显著优于传统机器学习模型。同时，该方法实现了对污水稀释比例的精准预测，相关系数（R^2）超过0.97，预测误差可缩小至±2%以内，有效解决了低浓度条件下的识别难题。

为验证该策略的实际应用价值，本研究将pH与氧化还原调控策略应用于真实污染场景的溯源任务中。通过对受污染水体进行指纹图谱分析，模型成功锁定主要污染源为制药厂废水，该结论得到了三维荧光光谱法（EEM）的交叉验证。综上，本研究建立的多维度SERS指纹表征与深度学习解析方法，为实现高灵敏、高准确性的水污染溯源提供了强有力的技术支持与全新思路。

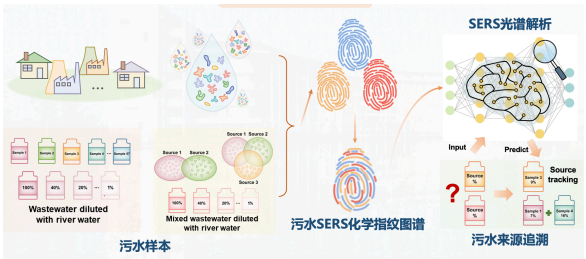


图1：污水多维SERS化学指纹的构建与解析示意图

关键词：水污染溯源；SERS；机器学习

参考文献：

[1] X. Wang, L. Wei, F. Li, Z. Hu and M. Fan, Anal Chem, 2025, 97, 13551-13560.

[2] Y. Huang, B. Yuan, X. Wang, Y. Dai, D. Wang, Z. Gong, J. Chen, L. Shen, M. Fan and Z. Li, Water Res., 2023, 232, 119662

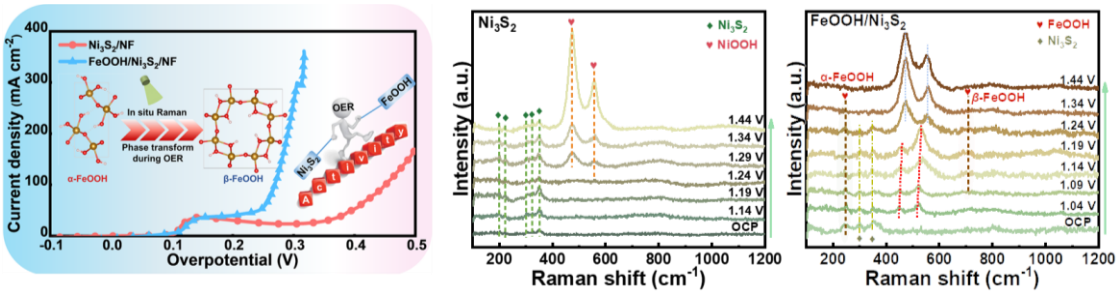
镍基硫化物析氧反应的表面重构研究

陈孟新[1]，谢思琪[1]，王斯腾[1]，徐平[1*]

[1] 哈尔滨工业大学化工与化学学院，哈尔滨，150001

*Email: pxu@hit.edu.cn

电解水制氢是应对全球碳中和挑战的核心技术之一，其效率受制于析氧反应（OER）四电子转移路径的缓慢动力学。研究表明。在电化学反应中，催化剂表面原子是动态变化的，即在外电压的作用下，催化剂的表面组分发生变化而引起表面重构。镍基硫化物因其成本低且催化性能优异，被视为理想的OER催化剂。特别地，非金属掺杂及构筑异质结构调控镍基硫化物的表面重构过程，进而优化电子结构能显著提升OER活性。利用原位拉曼技术实现镍基硫化物催化剂表面重构过程的监测，揭示催化剂重构物种与催化活性之间的关联，为设计高效稳定的电催化剂提供技术支撑。



In Situ Raman Study of Surface Reconstruction of FeOOH/Ni_3S_2 Oxygen Evolution Reaction Electrocatalysts

图1：FeOOH/Ni_3S_2复合结构的构筑及原位表面重构增强电催化析氧活性

关键词：镍基硫化物；析氧反应；表面重构；原位拉曼

参考文献：

[1] Chen, M.; Zhang, Y.; Chen, J.; Wang, R.; Zhang, B.; Song, B.; Xu, P. *Small*, **2024**, *20*, 2309371.

[2] Chen, M.; Zhang, Y.; Wang, R.; Zhang, B.; Song, B.; Guan, Y.; Li, S.; Xu, P. *J. Energy Chem.* **2023**, *84*, 173.

[3] Duan, Y.; Yu, Z. Y.; Hu, S.; Zheng, X.; Zhang, C.; Ding, H; Hu, B.; Fu, Q.; Yu, Z.; Zheng, X.; Zhu, J.; Gao, M.; Yu, S., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 15772.

[4] Zhang, Y.; Fu, Q.; Song, B.; Xu, P., *Acc. Mater. Res.* **2022**, *3*, 1088.

单原子尺度精准的半导体界面点缺陷的光谱表征

刘雷[1,2]，申德振[1,2]，

[1] 安徽大学，合肥市经济技术开发区九龙路 111 号，邮编 230601
[2] 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所，长春市二道区东南湖大路 3888 号，邮编 130033

*Email: liulei@ahu.edu.cn

缺陷，特别是点缺陷，对半导体的物理特性有着至关重要的影响，决定其电、光学行为，并决定器件的性能优劣。随着半导体器件向尺寸更微小、结构更复杂、功能更强大的不断发展，点缺陷对半导体器件性能的影响更加放大，对点缺陷调控提出了更精准的需求。报告将讨论针对半导体界面点缺陷的单体表征与控制的单原子尺度精准光谱表征的科学问题及其在半导体光电器件研发的应用前景。

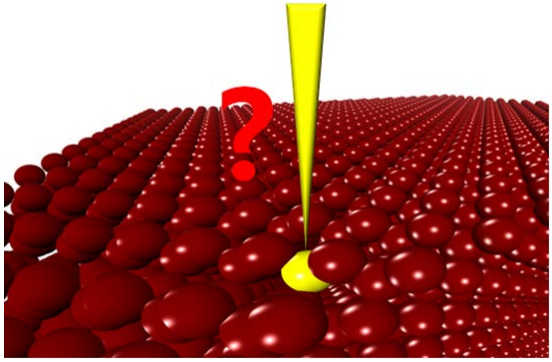


图1：半导体点缺陷光电特性的单体表征

关键词： 单体点缺陷，半导体掺杂，STM, 针尖增强光谱

参考文献：

[1] Bao, Y. et al. Making Patterned Single Defects in MoS2 Thermally with the MoS2/Au Moiré Interface. ACS Nano, doi:10.1021/acsnano.4c07212 (2024).

[2] Liu, L. et al. p-Type Conductivity in N-Doped ZnO: The Role of the NZn-V-O Complex. Phys. Rev. Lett. 108, 215501, doi:10.1103/PhysRevLett.108.215501 (2012).

[3] Liu, L., Yu, P. Y., Chen, X. B., Mao, S. S. & Shen, D. Z. Hydrogenation and Disorder in Engineered Black TiO2. Phys. Rev. Lett. 111, 065505 doi:10.1103/PhysRevLett.111.065505 (2013).

报告题目：SERS 方法快速识别尿液中的病原微生物

摘要：尿液样本中病原微生物的快速、稳定检测对于尿路感染的即时临床诊断具有重要意义。传统检测方法耗时长，不能满足快速判断的现实需求。表面增强拉曼光谱(SERS)方法因其快速、高灵敏性与指纹特征备受关注。本研究提出了利用抗生素介导的病原微生物形态变化的检测策略，结合氧化石墨烯-银纳米颗粒复合 SERS 基底，采用动态表面增强拉曼光谱方法实现了多种病原菌稳定、快速的检测。该方法能够同时对病原微生物与其代谢物进行双重检测。在 20 分钟内能够完成常见病原菌的分类识别。这些探索为尿路感染的诊断提供了一种快速、简便且稳定的策略，在临床病原微生物检测识别领域具有广阔的应用前景。

个人简介：杨良保，博士生导师，研究员，中国科学院“优秀导师”，安徽省医学物理与技术重点实验室主任，国家技术发明二等奖和安徽省自然科学一等奖获得者。国家“863”项目首席、“国家重大科学仪器设备开发专项”项目课题负责人和“国家重大新药创制专项”项目课题负责人，“中国科学院科研仪器设备研制”项目主持人。已在 J. Am. Chem. Soc.，Chem. Soc. Rev., Anal. Chem.等杂志上发表文章 100 余篇、论文引用次数 5900 余次。主要从事表面增强拉曼光谱检测新方法、快速检测仪器研制及其应用研究。

纳米组装 SERS 传感器在生命分析中的应用研究

刘康[2]，赵伟东[1,*]

[1] 北京理工大学生命学院，北京，100081
[2] 深圳康华君泰生物科技有限公司，深圳，518063

*Email: zhaoweidong@bit.edu.cn

体液在我们生命运转过程中起着重要作用，其中含有很多复杂的生物成分。这些成分的含量与我们生理状况具有一定的生物关联性，所以通过监测这些成分指标可实现疾病的诊断。目前，各种检测技术相继发展，如比色传感、电化学传感、拉曼检测芯片等，为在线体外疾病检测提供了新的策略。然而，人体代谢体液的复杂性、目标物含量低、干扰因素多等问题为纳米传感技术在体外检测实际应用提出了更多挑战。

表面增强拉曼光谱（SERS）由于其具有抗漂白性、半峰宽窄、不受水环境影响等优势成为一种很好的生物分析检测工具，可以提供生物分子的指纹信息。但面对实际样品的检测，SERS传感芯片目前也存在一些问题，比如：一、由于物质扩散慢而导致的传感器对目标物捕获效率低的问题，进而影响检测的灵敏性；二、生物样品是一个复杂体系，干扰物质多降低了检测重现性；三、批次间结构的稳定性和力学稳定性问题也影响了SERS信号的稳定性。所以，如何构建多模式耦合、抗干扰、稳定性高的高性能SERS传感芯片是当前的关键科学问题。针对这些问题，我们通过增强传质、尺寸选择、打印组装的策略来分别提高SERS的灵敏性、重现性、稳定性的问题，为SERS在疾病早期诊断领域提供了理论和实验基础。

关键词： 自组装；表面增强拉曼光谱；生物分析；光子晶体

参考文献：

[1] Ye, H.; Chen, X.; Huang, X.; Li, C.; **Zhao, W.;*** Wang, T.* ***Nano Lett.***, 2024, 24, 11082.
[2] **Zhao**, **W.#;** Ye, H.#; Li, X.; Liu, Xue, J.;* Yang, Z.;* Wang, T.* ***Chem***, 2023, 9, 2194.
[3] **Zhao**, **W.#;** Li, J.; Xue, Z.; Qiao, X.; Feng, Y.*; Yang, Z.;* Wang, T.* A Separation-Sensing Platform Performing Accurate Diagnosis of Jaundice in Complex Biological Tear Fluids. ***Angew. Chem. Int. Ed.***, 2022, 61, e202205628.

机器学习助力 SERS 研究核酸二级结构

国新华*，许官通

吉林大学化学学院，长春市前进大街 2699 号，130012

*Email: guoxh@jlu.edu.cn

携带基因信息的 DNA 分子主要以双螺旋 B 型 DNA 的结构形式存在。然而，越来越多的研究显示，生物体中的核酸分子可以形成多种不同的二级结构，例如：富含 G 碱基重复序列可形成 G 四链体结构，富含 C 碱基重复序列可形成的 i-motif。此外，还有三螺旋，发卡型和回文结构等。变化的核酸二级结构不仅具有其特殊和重要的生物功能，例如，影响基因的复制，与癌症等许多疾病的发生密切联系；而且作为 DNA 纳米材料的构筑单元在生物传感、纳米机器人及信息存储等方面也发挥着重要的作用。

NMR 和 X-光晶体衍射技术在核酸结构分析中发挥了重要作用，但是难以满足核酸二级结构分析的需求。我们最近的研究显示：使用铝离子将核酸分子聚集在银纳米粒子之间，可以获得大量强化的核酸二级结构相关的分子中化学键振动的指纹图谱信息[1]。而使用镁离子聚集金纳米粒子，可以在强酸性条件下检测到 AA 碱基间弱的氢键相互作用[2]。卤素离子溴和碘能有效减少柠檬酸的干扰。我们利用机器学习对不同阳离子和阴离子的组合进行优化，发现优化后金属阳离子聚集剂和卤素阴离子清洁剂与金和银纳米粒子结合，可以获得更加丰富核酸结构细节信息[3]。利用机器学习对核酸拉曼指纹图谱进行分析，实现了核酸序列形成二级结构的准确快速分类[4]。

关键词：核酸二级结构；SERS；机器学习；金和银纳米粒子

参考文献：

[1] Li, Y.；Gao，T. Y.；Xu，G. T.；Xiang, X. X.；Han, X. X.；Zhao, B. Guo，X. H. *J. Phys. Chem. Lett.* **2019,** *10*, 3013−3018.

[2] Zhang, Y. J.；Xiang, X. X.; Bao, Y.; Xu, G. T.; Luo, H.; Tian, Y.; Guo, X. H. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 4884−4890.

[3] Xu, G.T.; Zhang, Y. J.; Xiang, X. X.; Luo, H.; Han, X. X.; Zhao, B.; Guo. X. H. *Talanta*, **2025**, *291*, 127869

[4] Xu, G. T.; Bao, Y.; Zhang, Y. J.; Xiang, X. X.; Luo, H,; Guo, X. H. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 17109−17117

选择性和稳定性重塑高灵敏生物医学诊断边界-半导体 SERS 探针

林杰*，吴爱国*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所，浙江宁波，315201

*Email: linjie@nimte.ac.cn

边界生物医学是研究疾病病灶形成、边界判别及演进过程中关键问题的前沿交叉学科。与组织活检相比，体外液体活检技术具有快速、简便和无损伤等优势。当影像学检查还没有发现任何病灶前，外周血液中生物标志物检测可为疾病早期诊断和预后评估提供重要依据。生物标志物的高效检测可有效地应用于体外早期诊断、预后及存活时间判断、快速判断治疗效果、体内耐药性检测、个体化治疗、疾病复发检测等，具有重要的科学意义和临床应用价值。表面增强拉曼散射光谱（SERS）技术是高灵敏的指纹光谱分析技术，具有快速、精准、无损检测等优势，可适用于固相、液相等复杂的检测体系。SERS 纳米生物探针与谱学/影像技术的结合，为实现生物标志物的精准诊断带来新的契机。研发功能型半导体 SERS 纳米生物探针，随后结合具有光、电、磁场响应的半导体 SERS 探针试剂盒仪器设备，完成生物标志物的快速富集、高效分离、准确检测和分型鉴定，从而通过 SERS 光谱/图像分析实现疾病的精准诊断应用突破，并开发可推广的检测试剂盒。重点突破液体活检发展中检测成本高、耗时长、细胞富集难和靶向性差等难题。

关键词： 半导体SERS探针，拉曼光谱，表面SERS，液体活检，生物标志物

参考文献：

1. ***Angew. Chem. Int. Ed.*** 2024, 63, e202407597.

2.. ***Angew. Chem. Int. Ed.*** 2024, 63, e20231612

3. ***Angew. Chem. Int. Ed.***, 2025, 64, e202508674

4. ***J. Am. Chem. Soc.***, 2022, 144, 21908-21915.

5. ***Research***, 2025, 8, 0841.

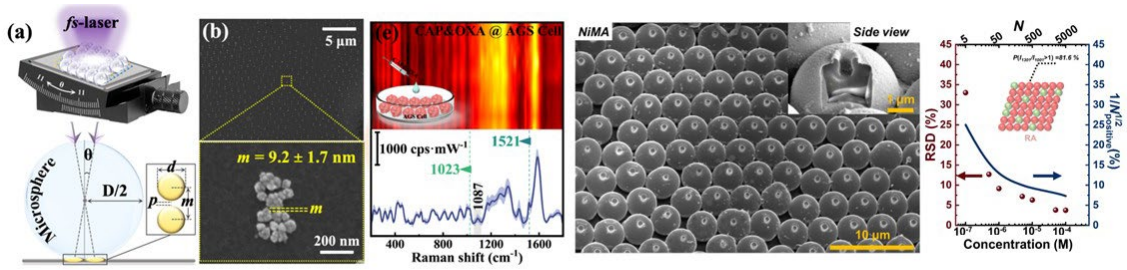
飞秒激光并行制造 SERS 衬底及其在生物医学中的应用

闫胤洲 [1,*]，赵艳 [1]，蒋毅坚 [1]

[1] 北京工业大学，物理与光电工程学院，北京，100124

*Email: yyan@bjut.edu.cn

飞秒激光因其超快（脉宽10^{-15} s）、超强（功率密度10^{15} W/cm^2）脉冲特性，广泛用于金属、半导体、介质等材料的超精密柔性制造（精度10^{-9} m）。但传统飞秒激光加工策略存在精度与效率的固有矛盾，对大幅面跨尺度微纳结构的加工存在技术瓶颈，难以应用于表面增强拉曼光谱（SERS）衬底的制备。研究团队提出基于微球阵列光场调控的飞秒激光并行纳米制造技术，利用飞秒激光与物质相互作用的非线性过程，实现多种超痕量功能SERS衬底的高通量制备，包括：（1）光学杠杆调控飞秒激光单脉冲并行直写2D-TMDs相变SERS衬底，加工精度9.2 nm、加工效率10^6 s^{-1}·mm^{-2}，检出限达到飞摩量级，成功用于胃腺癌活细胞药物代谢拉曼光谱组学分析[1]；（2）飞秒激光并行超隐切Nanohole-in-Microsphere-Array结构，加工效率约5500孔·s^{-1}，具有阿升（10^{-18} L）血清采样能力，为基于泊松统计特性的单分子级拉曼定量分析提供稳健的数字SERS衬底，实现了类风湿关节炎外周血生物标志物诊断[2]。微球阵列调控飞秒激光并行制造技术为周期微纳结构单元的跨尺度制备提供了灵活多样的解决方案[3]，在新型SERS衬底高效制造方面展示出独特优势，助力拉曼光谱在生物医学领域中的应用。



飞秒激光并行直写2D-$MoTe_2$相变SERS衬底　　飞秒激光并行超隐切NiMA-dSERS衬底

图1：微球阵列光场调控飞秒激光并行纳米制造功能SERS衬底

关键词：SERS；飞秒激光；微纳制造；周期微纳结构衬底；生物拉曼光谱

参考文献：

[1] Y. Yao#, Y. Zhao#, X. Yan*, Y. Yan*, *et al*. *ACS Nano.* **2025**, *19*, 16732.

[2] M. Wang#, L. Cao#, …, Z. Li*, Y. Yan*, *et al*. *Biosens. Bioelectron.* **2025**, *287*, 117655.

[3] Z. Gao#, Z. Xu#*, …, Y. Yan*, *et al*. *Opt. Lett.* **2025**, *50*, 1248

从靶标发现到纳米抗体功能化探针构建：SERS 在未知与已知靶标疾病检测中的双路径策略

王静 [1,*]

[1] 教育部医学光电科学与技术重点实验室，福建省光子技术重点实验室，福建师范大学，福州 350117

*Email: jing.wang@fjnu.edu.cn

表面增强拉曼散射（SERS）因其高灵敏度、多重检测能力及光稳定性，在疾病液体活检中展现出巨大潜力。然而，其应用往往依赖已知且可获得抗体的特定靶标，这在靶标未知或缺乏配套抗体的疾病检测中构成瓶颈。本报告围绕两条技术路径展开，探讨如何在不同靶标可及性条件下推进SERS检测体系的构建与应用。

第一部分聚焦于靶标不确定的疾病，以微乳头状肺腺癌（MPP$^+$ LUAD）为例，提出一种“从生物标志物发现到SERS检测平台”的一体化流程。我们整合4D无标记定量蛋白质组学、纳米搅拌增强微流控芯片与多重SERS探针，实现了血液差异蛋白的系统筛选与多指标并行检测。通过机器学习模型，显著提升了MPP$^+$ LUAD的无创诊断准确性，为SERS在未知靶标疾病中的应用提供了可复制范式。

第二部分针对靶标已明确但缺乏商业化抗体的情况，介绍了多价纳米抗体（mNb）功能化SERS探针的制备与应用。我们利用基因工程手段在哺乳细胞中高效表达多价纳米抗体，并与金银合金纳米盒结合，构建高亲和力、高特异性的多价探针（MVP）。该探针与微流控免疫分析结合，实现了SARS-CoV-2多株变异株刺突蛋白及病毒颗粒的高灵敏检测，并在临床样本中表现出与RT-qPCR高度一致的诊断性能。

本研究展示了在“靶标发现—检测平台构建”以及无可及性抗体条件下，SERS技术的可行性与拓展性，为其在复杂疾病检测与新发病原体监测中的转化应用提供了技术支撑。

关键词： SERS；微流控芯片；蛋白质组学；纳米抗体；液体活检

参考文献：

[1] Zhang, D.#; Peng, K.#; Xu, H.; Chen, Y.; Wang, J.*, *Adv. Sci.* **2025**, 2501336.

[2] Wang, J#*.; Zhou, Q.#; Lowry, K.; Howard, C. B.*; Trau, M.*, *Biosens. Bioelectron.* **2025,** *278*, 117292.

SERS 技术在毒物分析与临床毒检的应用

曹玥 1 *

[1] 南京医科大学，江苏省南京市龙眠大道 101 号，211166

*E-mail：ycao@njmu.edu.cn

毒物的快速精准鉴定一直是毒物分析领域里至关重要的问题之一，但许多传统分析方法都具有繁琐耗时长、灵敏度低以及对操作人员技术要求高等局限性。在此，我们借助表面增强拉曼光谱SERS技术开发了一系列针对环境和生物体内多种物质的精准鉴定方法，为毒物的检验分析提供了新思路和新手段。在环境毒物检测中，我们开发了一种新型的双模分离PA-6/AuNRs@ZIF-8膜，用于对西维因的快速原位检测。PA-6用于待测物质的初始分离，ZIF-8通过化学增强机制放大拉曼信号的同时通过其多孔结构实现分析物的富集和二次分离。利用该薄膜对湖水中的西维因的检出限低至1×10-9M，显著低于现有标准。开发了高通量可抛式AuBPs@MoS2@tinfoil试剂盒用于敌草快的快速定量检测，此方法对敌草快的检测限达到了1×10-15M，且在检测范围内具有良好的线性关系。在临床检验方面，我们利用SERS和静电纺丝技术设计了能够对唾液样本中COVID-19蛋白进行特异性识别的可穿戴性柔性纤维膜，该薄膜的检测限低至10TU/mL。我们构建Coral-SERS传感器检测富血小板血浆(PRP)中特异生物标志物MIF(巨噬细胞迁移抑制因子)浓度，提高PRP技术的有效性。对于细胞微环境中的小分子。基于拉曼光谱技术，我们实现了对2型晶体肾病石蜡包埋组织和活检标本中草酸钙晶体的原位鉴定，这为分析组织中的未知晶体提供了一种有效且有前途的方法。SERS技术在毒物分析领域的应用不仅显著提高了检测的灵敏度和准确性，而且为环境监测、疾病诊断和生物医学研究提供了更为高效和精确的工具。

关键词： SERS；超灵敏检测；原位分析；特异性识别

参考文献：

[1] Ding, Yan, et al. Dual-Mode Separation and SERS Detection of Carbaryl with PA-6/AuNRs@ ZIF-8 Films.Analytical Chemistry 96.5 (2024): 1941-1947.

[2] Jiang, Qiao-Yan, et al. Recyclable and green AuBPs@ MoS2@ tinfoil box for high throughput SERS tracking of diquat in complex compounds. Sensors and Actuators B: Chemical 344 (2021): 130290.

[3] Sun, Yang, et al. Fabrication of flexible electrospinning nano-fiber membrane for detection of respiratory tract transmission virus based on SERS. Talanta 266 (2024): 125127.

[4] Zhu, Yiran, et al. Construction of “Coral” SERS sensor for ultrasensitive and rapid detection of harmful component macrophage migration inhibitory factor in Platelet-rich Plasma. Biosensors and Bioelectronics 242 (2023): 115718.

[5] Yu, Youjia, et al. In Situ Identification of Unknown Crystals in Acute Kidney Injury Using Raman Spectroscopy. Nanomaterials 12.14 (2022): 2395.

实时瞬态吸收光谱用于在体糖化血红蛋白检测

王璞 [1,2,*]

[1] 北京航空航天大学生物与医学工程学院，北京市海淀区学院路 37 号，100191
[2] 振电（苏州）医疗科技有限公司，苏州市星湖街 218 号苏州生物医药产业园，215009

*Email: 10318@buaa.edu.cn

糖化血红蛋白（HbA1c）是糖尿病诊断及长期血糖控制评价的关键生物标志物，可反映红细胞生命周期内的平均血糖水平。与瞬时血糖测量不同，HbA1c浓度不受短期血糖波动或禁食时长的影响，因而能够提供更稳定、可靠的血糖状态评估。然而，目前的HbA1c检测严重依赖于有创血液采样和离体分析，限制了其在生理条件下捕获蛋白质修饰动态的能力。我们提出一种基于瞬时吸收显微镜（TAM）的体内无标记HbA1c定量方法。通过结合高速角度-延迟转换器，实现了瞬态吸收光谱的实时采集，基于相量分析法特异性识别并量化糖化与非糖化血红蛋白在激发态动力学上的差异，首次在活体动物循环红细胞中实现了HbA1c的直接可视化与定量测定。

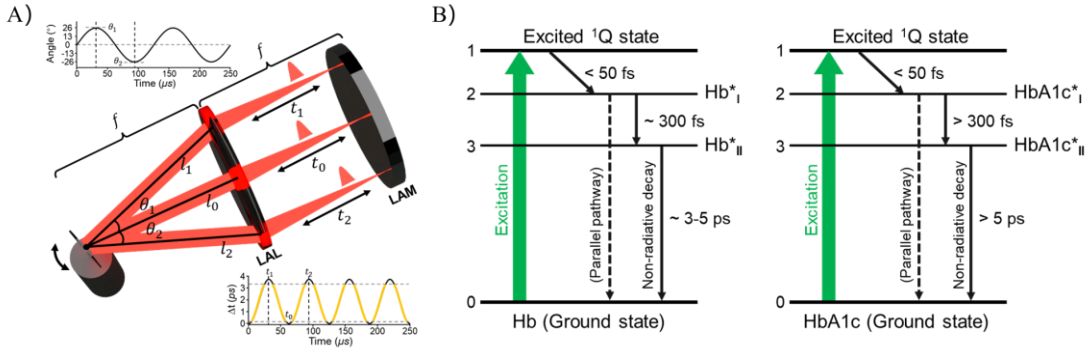


图1： A) 高速角度-延迟转换器; B)血红蛋白与糖化血红蛋白在520 nm泵浦和780 nm探测时的激发态通路。

关键词： 瞬态吸收光谱；糖化血红蛋白检测；无标记成像；相量分析

参考文献：

[1] Dong, P.T.; Lin H.N.; Huang K.C.; Cheng J.X. *Science advances*, **2019**, 5(5), eaav0561.
[2] Robles, F.E.; Wilson, J.W.; Fischer, M.C.; Warren, W.S. *Optics Express*, **2012**, 20(15), 17082.
[3] Sahi, A.K.; Verma, P.; Varshney, N.; Gundu, S.; Mahto, S.K. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, **2022**, *194*(6), 2831.

Next-generation time-domain stimulated Raman scattering spectroscopy and imaging for biomedical applications

Hanqing Xiong[1]，Jin Guo[1]，Qiaozhi Yu[1]，Haojie Zhang[1]，Wenhao Yu[1]，Hanqing Xiong[1]*，

[1] College of Future Technology, Peking University, Beijing 100871, China

*Email: xiong.hanqing@pku.edu.cn

Stimulated Raman scattering (SRS) has emerged as a powerful quantitative contrast mechanism for chemical imaging in recent years. Conventional SRS techniques, which operate in the frequency domain, face a fundamental trade-off between excitation efficiency and spectral resolution: while the nonlinear process benefits from ultrafast pulsed excitations, the time-energy uncertainty principle intrinsically limits spectral resolution. Additionally, spectral range and acquisition speed are mutually constrained. In this talk, I will present a novel time-domain excitation strategy developed in our lab that circumvents these limitations. By encoding Raman free-induction decays into time-domain stimulated Raman loss (SRL) signals through vibrational wave packet interference, we reconstruct the Raman spectrum via Fourier transform of the time-domain SRL signal. This approach achieves natural-linewidth-limit spectral line shapes, a spectral range determined by the laser bandwidth, and enhanced sensitivity. I will discuss our progress in obtaining self-calibrated standard Raman spectra and high-speed super-broadband Raman imaging, along with the advantages and limitations of this method for biomedical imaging applications.

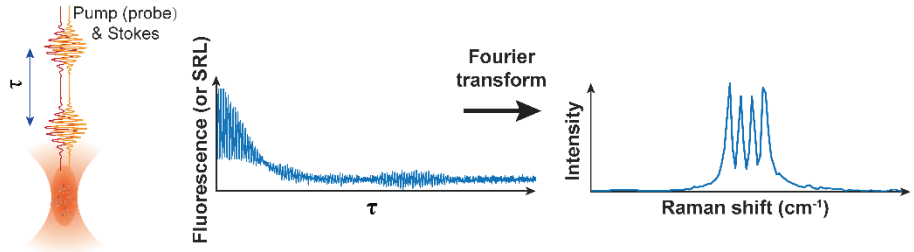


Figure 1: Principle of transient stimulated Raman spectroscopy.

关键词：stimulated Raman scattering；ultrafast spectroscopy； Free-induction decay

参考文献：

[1] Guo, J., Zhang, L., Yu, Q., Qi, Y., Zhang, H., Zhang, L., ... & Xiong, H., *Analytical Chemistry*, **2025**, 97, 8499-8505.

[2] Yu, Q., Yao, Z., Zhou, J., Yu, W., Zhuang, C., Qi, Y., & Xiong, H., *Light: Science & Applications*, **2024**, *13*, 70.

拉曼光谱学与 AI 的多技术生物医学应用

尹建华*，尚林伟

南京航空航天大学生物医学工程系，南京，211106

*Email: yin@nuaa.edu.cn

近年来拉曼光谱学和人工智能AI用于生物医学的研究越来越广泛和深入，有了很多的理论和应用成果，但现实研究中因为样本来源、位置、成分的复杂性和个例差异等因素所引发的各种的瓶颈却依然存在，譬如拉曼光谱技术的生物医学临场检测、切缘判定和取样、临床原位探测、实时诊断以及相应大模型的选择和构建等。本研究针对不同形态的乳腺癌取样组织进行拉曼光谱学研究并和AI方法相结合实现光谱分析和检测、智能分类和诊断，包括采用共焦（偏振）显微拉曼光谱技术及其和荧光成像融合的多模技术针对无标记乳腺癌切片组织进行切片病理检测和分析诊断（图1）、对细胞层次的创新SERS检测和乳腺癌亚型分类研究、最直接的组织原位检测和光谱诊断，最终探寻相关的组织癌变机制、拉曼光谱技术原位检测和实时智能诊断的临床应用潜力。

关键词：拉曼光谱学；人工智能AI；多技术联用；癌症诊断；生物医学

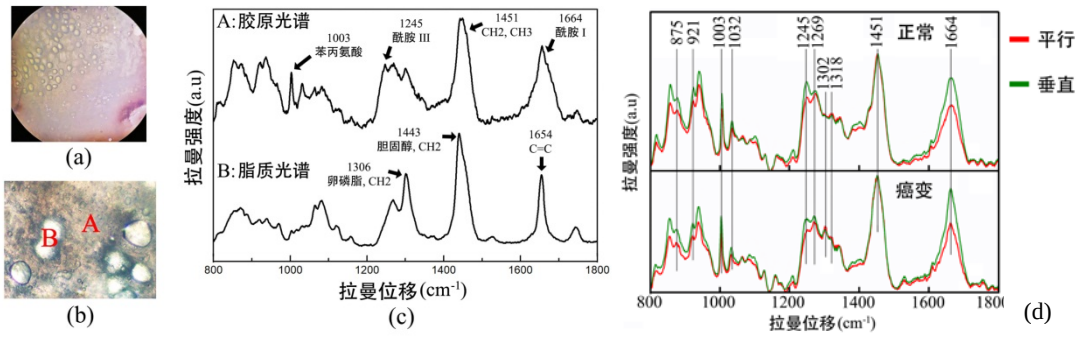


图1：乳腺组织的明场图像(a)和荧光图像(b)、主成分的拉曼光谱(c)及胶原成分的偏振拉曼光谱(d)。

基于固体纳米孔道的单分子时间分辨光电测量系统

刘少创，龙亿涛*

南京大学化学化工学院

*Email: shaochuangliu@nju.edu.cn; yitaolong@nju.edu.cn

单分子动态变化的测量是理解其生物学功能的重要途径。尽管冷冻电镜等技术能够揭示蛋白质的高分辨率静态结构，但难以捕捉蛋白质在功能过程中发生的构象变化和分子间相互作用。因此，发展具备时间分辨能力的单分子分析技术和配套设备，对深入理解单分子水平的动态过程具有重要意义。

纳米孔道技术是一种无标记、实时的单分子分析技术。其中，固态纳米孔道因其机械稳定性高、几何结构可控以及优良的光学兼容性，在单分子的动态分析中展现出独特优势。通过拉曼光谱等光学手段与纳米孔检测相融合，可进一步提升纳米孔的检测能力，在单分子水平同时获取化学组分和电流信息。基于这一思路，我们开发了一套基于固态纳米孔的时间分辨单分子测量系统。该平台集成了自主设计的光电同步测量系统、可控的电化学纳米孔制备与测量装置，以及功能完善的数据分析软件。该系统能够在溶液环境中探测蛋白质亚毫秒级别的构象动力学及其相互作用，为研究蛋白质动态变化和生物分子相互作用提供了一种新的技术手段。

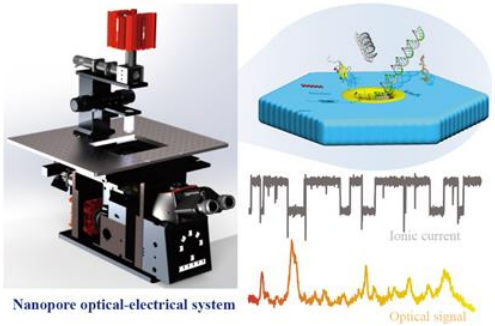


图 1 纳米孔道单分子光电同步测量系统

关键词： 固体纳米孔道，单分子分析，散射光谱

参考文献：

[1] Zhou, Z.-Q.; Liu, S.-C.; Wang, J.; Chen, K.-L.; Xie, B.-K.; Ying, Y.-L.; Long, Y.-T. Chem. Sci. 2025, 16, 8501-8508.

[2] Wang, J.; Liu, S.-C.; Hu, Z.-L.; Ying, Y.-L.; Long, Y.-T. J. Am. Chem. Soc. 2025, 147 (2), 1781–1791.

[3] Liu, S.-C.; Xie, B.-K.; Zhong, C.-B.; Wang, J.; Ying, Y.-L.; Long, Y.-T. , *Review of Scientific Instruments*, **2021**, 92, 121301.

[4] Liu, S.-C.; Ying, Y.-L; Li, W.-H.; Wan, Y.-J.; Long, Y.-T., *Chemical Science*, **2021**, 2, 3282-3289.

中红外光热成像新维度：从分子识别到超分辨定位

张德龙[1]，

[1] 浙江大学物理学院，杭州，310027

*Email: dlzhang@zju.edu.cn

生物体内分子的高分辨原位探测是光学探测的核心挑战之一。中红外光热成像 (MIP) 作为新兴的无标记分子成像技术，通过光热效应探测手段，将传统FTIR光谱学的分子特异性拓展到三维亚微米生物成像。本报告将介绍课题组近期在中红外光热成像领域的系列成果：光热弛豫定位 (PEARL) 突破了非荧光分子的亚百纳米超分辨定位；结构光照明MIP (SIMIP) 实现了分子选择性的宽场超分辨成像；原位泵浦-探测红外与拉曼激发 (INSPIRE) 达成了完整分子振动模态的探测。这些技术开发推动了从"看得见"到"看得清、看得准"的跨越，为生物代谢、病理诊断和材料科学研究提供有力工具。

关键词：红外光热成像；受激拉曼散射；超分辨成像；结构光照明

参考文献：

[1] Zhang, D.; Li, C.; Zhang, C.; Slipchenko, M. N.; Eakins, G.; Cheng, J.-X. *Sci. Adv.* **2016**, *2*, e1600521.

[2] Fu, P.; Cao, W.; Chen, T.; Huang, X.; Le, T.; Zhu, S.; Wang, D.-W.; Lee, H. J.; Zhang, D. *Nature Photon.* **2023**, *17*, 330-337.

[3] Fu, P.; Chen, B.; Zhang, Y.; Chen, L.; Lee, H. J.; Zhang, D. *Adv. Photon.* **2025**, *7*, 036003.

[4] Fu, P.; Zhang, Y.; Wang, S.; Ye, X.; Wu, Y.; Yu, M.; Zhu, S.; Lee, H. J.; Zhang, D. *Sci. Adv.* **2024**, *10*, eadm7687.

[5] Zhang, Y.; Deng, X.; Wang, S.; Zhou, W.; Wu, Z.; Tang, X.; Lee, H. J.; Zhang, D. *Angewandte Chem.* **2025**, e202505038.

手性等离激元结构的设计合成：从诱导手性到本征手性

牛文新 [1,*]

[1]中国科学院长春应用化学研究所，长春，中国，130022

*Email: niuwx@ciac.ac.cn

手性等离激元结构因其独特的光学活性与表面增强效应，在生物传感、对映体识别和手性催化等领域展现出重要的应用潜力。本报告系统梳理了我们课题组近年来从诱导手性到本征手性等离激元结构的设计与合成策略，重点介绍我们在该领域取得的一系列研究进展[1-4]。在诱导手性方面，我们基于等离激元增强圆二色谱技术，提出了通过手性分子修饰诱导银纳米结构产生可控手性光学响应的方法。通过调控分子吸附构型和纳米结构形貌，有效提升了手性光学不对称因子（g-factor）及体系的稳定性。在本征手性构筑方面，我们突破了传统手性氨基酸导向合成方法的限制，发展出一种基于手性纳米限域效应的通用合成策略，实现了多种本征手性等离激元结构的精准构建。进一步地，通过调控手性金纳米核与Cu_2O壳之间的介电耦合，实现了近红外区强手性光学响应的调制。这些本征手性结构展现出优异的光电性能，已被应用于手性等离激元光学传感、以及手性等离激元增强的电化学手性识别和对映体选择性拉曼光谱，为构建高性能手性光学器件和高灵敏手性分析技术提供了新思路。

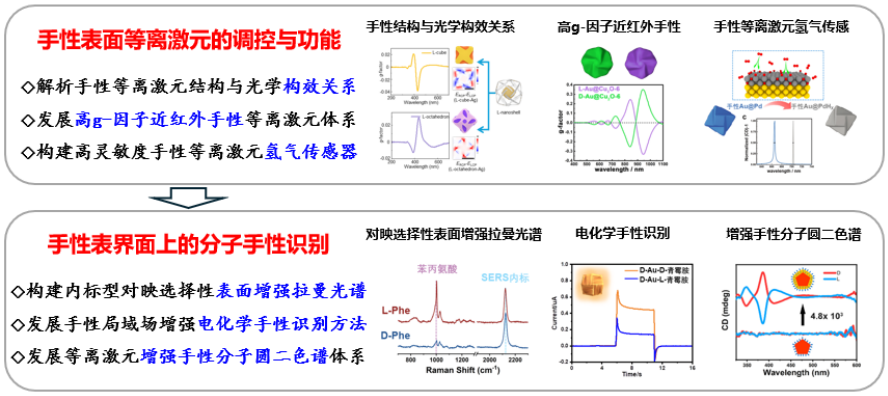


图1：手性等离激元结构的设计合成与应用

关键词：手性等离激元；等离激元增强圆二色谱；手性识别；表面增强拉曼散射

参考文献：

[1] Luan, X.; Tian, Y.; Wu, F.; Cheng, L.; Lv, X.; Wei, H.; Wang, X.; Li, F.; Xu, G.; Niu, W. *Nat. Commun.*, **2025**, *16*, 2418.

[2] Y. Tian, F. Wu, X. Lv, X. Luan, F. Li, G. Xu, W. Niu, *Adv. Mater.* **2024**, *36*, 2403373.

[3] X. Lv, Y. Tian,[a] F. Wu, X. Luan, F. Li, Z. Shen, G. Xu, K. Liu, W. Niu, *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 9234.

[4] Lv, X.; Wu, F.; Tian, Y.; Zuo, P.; Li, F.; Xu, G.; Niu, W. *Adv. Mater.*, **2023**, 35, 2305429.

酸碱两性纳米氧化物界面水质子转移的拉曼光谱测量

高婷娟 [1,*]，马玮玮 [1]，唐浴尘 [1]

[1] 华中师范大学，武汉，430079

*Email: tingao@ccnu.edu.cn

固体与水在两者界面上的相互作用催化着多种基本反应，对许多自然与人为控制过程具有重要意义。除惰性金属等少数单质外，大多数固体表面被氧化，其表面羟基具有酸碱解离的两性性质，微妙地调节着界面水中的质子转移方向，进而影响界面催化反应的关键路径。由于界面水与体相水在化学反应平衡和动力学方面存在显著差异，深入理解与调控界面化学行为亟需原位表征两性固体氧化物在界面水中的质子转移过程。

固体表面与界面水之间的质子转移会改变固液界面的酸度，可通过界面酸度来衡量。然而，固液界面的空间尺度仅为亚纳米至纳米级，电化学技术的空间分辨率不足，而二次谐波、和频光谱、表面增强拉曼等光谱技术易受体系本底信号干扰，难以建立界面酸度的准确标定方法。我们采用偶氮增强拉曼散射技术，通过分子内增强的设计策略，拓展 pH 分子探针的响应范围至 pH 3.4 – 8.6（适用于大多数固体氧化物）。借助有效的表面锚定基团，界面 pH 探针能够定位各种纳米氧化物表面，实现界面酸度的直接原位测量。进一步，通过定量界面水与体相水之间的 pH 差异，我们发现纳米氧化物的中心元素及其价态、表面修饰的官能团类型、体相溶液的 pH 值与离子强度等因素，共同决定了固体表面与界面水之间的质子转移过程。本研究发展了测定界面酸度与界面 pH 差异的新工具，阐明了纳米氧化物与界面水之间的质子转移机制，为调控界面性质与反应路径提供了重要的理论依据和研究手段。

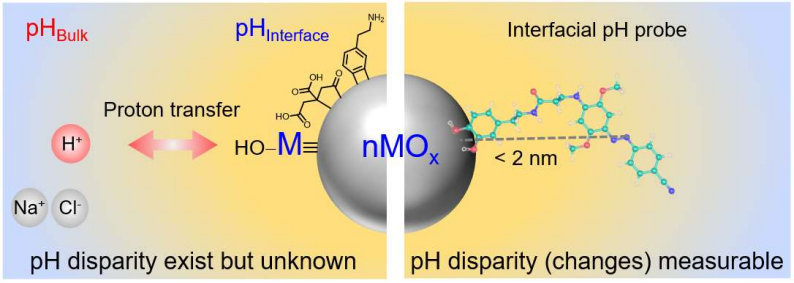


图1：酸碱两性纳米氧化物界面水质子转移的影响因素

关键词：界面水；质子转移；偶氮增强拉曼散射；界面 pH 探针；纳米氧化物

参考文献：

[1] Ma, W.; Tang, Y.; Gao, T. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 32785.

[2] Tang, Y.; Zhuang, Y.; Gao, T. et al. *ACS Cent. Sci.* **2021**, 7, 768.

Circular Dichroism for Exploration in Chirality Manipulation and Transfer at Inorganic Surfaces

Zhifeng Huang [1,*]

[1]Department of Chemistry, The Chinese University of Hong Kong, Shatin, N.T., Hong Kong SAR, China

*Email: zfhuang@cuhk.edu.hk

Manipulation of chirality is one of fundamentally important topics in modern chemistry, essentially due to ubiquitous existence of homochirality in biological systems. Chiral objects exhibit unique optical activities, which have been widely characterized by circular dichroism (CD) denoting differential extinction (including optical absorption, reflection and scattering) of left-handed and right-handed circularly polarized light by chiral solids. In this talk, we will introduce our works in applying the CD technique to study the formation of chiral inorganic nanostructures,[1] manipulation of inorganic surface handedness at the atomic scale,[2, 3] amplification of molecular optical activities,[4] operation of asymmetric photo-induced synthesis,[5] and control of symmetry breaking at the inorganic surfaces.[6]

Keywords: circular dichroism; chirality; Inorganic chiral surfaces; symmetry breaking

References:

(1) Deng, J. H.; Fu, J. X.; Ng, J.; Huang, Z. F. Tailorable chiroptical activity of metallic nanospiral arrays. *Nanoscale* **2016**, *8*, 4504-4510.

(2) Liu, J. J.; Ni, Z. Y.; Nandi, P.; Mirsaidov, U.; Huang, Z. F. Chirality Transfer in Galvanic Replacement Reactions. *Nano Lett* **2019**, *19*, 7427-7433.

(3) Ni, Z. Y.; Zhu, Y. M.; Liu, J. J.; Yang, L.; Sun, P.; Gu, M.; Huang, Z. F. Extension of Compositional Space to the Ternary in Alloy Chiral Nanoparticles through Galvanic Replacement Reactions. *Adv. Sci.* **2020**, *7*, 2001321.

(4) Yang, L.; Kwan, C. S.; Zhang, L. L.; Li, X. H.; Han, Y.; Leung, K. C. F.; Yang, Y. G.; Huang, Z. F. Chiral Nanoparticle-Induced Enantioselective Amplification of Molecular Optical Activity. *Adv Funct Mater* **2019**, *29*, 1807307.

(5) Wei, X. Q.; Liu, J. J.; Xia, G. J.; Deng, J. H.; Sun, P.; Chruma, J. J.; Wu, W. H.; Yang, C.; Wang, Y. G.; Huang, Z. F. Enantioselective photoinduced cyclodimerization of a prochiral anthracene derivative adsorbed on helical metal nanostructures. *Nat Chem* **2020**, *12*, 551-559.

(6) Qin, P.; Liu, J. J.; Zhang, M.; Yang, L.; Zhong X. Y.; Xia, G. J.; Shen, C. S.; Qiu, H. B.; Huang, Z. F. Dynamic Kinetic Resolution of Helical Polycyclic Arenes Directed at Inorganic Chiral Surfaces Deposited via Substrate Rotation, ***Chem*** 2026, 12, 102720.

悬浮单液滴测量学

张韫宏 [1, *]

[1] 北京理工大学，北京中关村南大街 5 号，100081

*Email: yhz@bit.edu.cn

大气中存在着大量的悬浮颗粒物，亦称大气气溶胶。人类活动排放的一次气态污染气体如SO_2、VOC、NOx等，在气溶胶微液滴中发生复杂的二次转化，形成二次无机气溶胶和二次有机气溶胶，由此带来了雾霾污染事件频繁发生。如何悬浮气溶胶单液滴，实现气粒分配、气粒反应的精确测量，是揭示雾霾形成机制的关键。光镊悬浮单液滴，可以稳定悬浮数天，利用自发受激拉曼技术，在接近大气实际条件下完成单液滴物理化学过程的关键理化参数的测量。本文报道悬浮单液滴测量技术及其在表面加速反应、饱和蒸气压测量以及传质扩散等方面的应用。

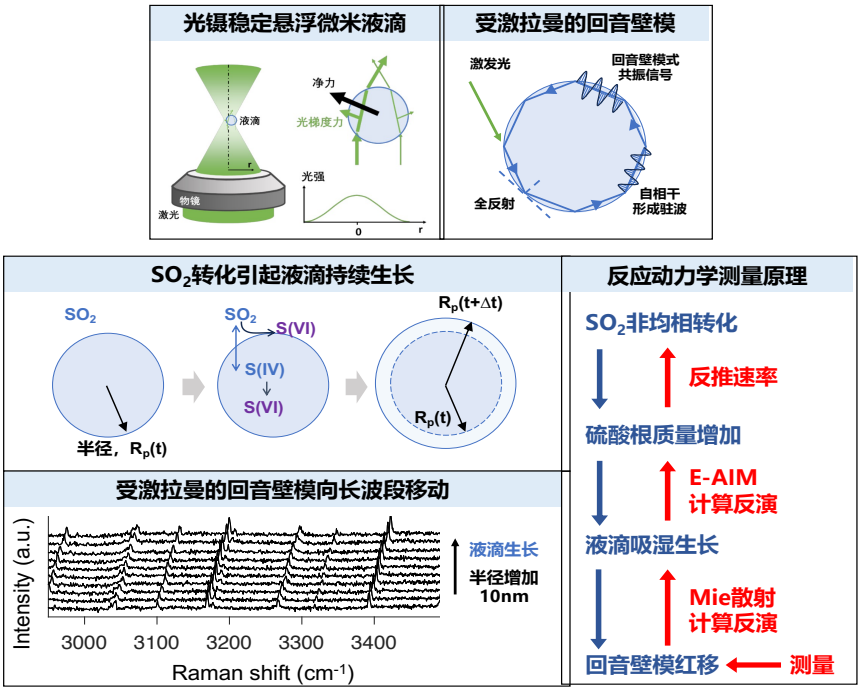


图1：光镊/受激拉曼联用原位测量一次污染气体与单个悬浮微米液滴非均相反应动力学

关键词：光镊；受激拉曼；气溶胶

参考文献：

[1], Z Chen, P Liu, W Wang, X Cao, Y Liu, Y Zhang, and M Ge, *EST*, **2022**, *56 (12),* 7637-7646.
[2] X Zhang, Q Huang, Y Liu, J Yin, S Pang, P Liu, Y Zhang, and M Ge, *J Am Chem Socy*, **2025**, *147*, 19595-19601

复杂样品快速制备 SERS 检测一体化方法研究进展

李攻科*，夏　凌，张卓旻，肖小华，胡玉斐

中山大学化学学院，广东省广州市，510006
* Email: cesgkl@mail.sysu.edu.cn

样品制备作为分析过程中最耗时、易引起误差的关键环节，严重制约了复杂样品SERS快速检测的速度、准确度和精密度。样品制备是将被分析物从样品基体转移到定性、定量评价的过程。从混沌到有序，这种传质过程不会自动发生，加速样品制备的策略是如何使热力学第二定律的自发过程逆转并快速定量进行。为提高样品制备效率，包括分离和富集过程，必须在传质系统中引入能量以减少熵增。通过引入新相、膜和场，改变系统中化学势的分布，是降低系统熵，提高制样效率的有效途径。随着SERS检测技术的发展，复杂样品快速制备技术成为SERS检测的瓶颈。为提高样品制样速度，在样品制备过程中引入额外的能量有助于加速传质和换热，利用声波、微波和电场等辅助场，可提高样品制样效率。其次，通过引入新相加速制样过程中传质，包括相吸附、相分配、化学转化、空间识别以加速传质。第三，减少样品量缩短样品制备时间，包括微萃取、微流体分离等。第四，阵列/集成策略，同时完成一批样品制备，结合高通量分析技术可减少单样平均制备时间。分离富集与SERS传感检测一体化将加快检测速度。本文报道了复杂样品快速制备SERS检测一体化方法的研究进展。

关键词：样品制备；SERS检测；一体化；复杂样品。

参考文献：

1. L.Xia, J.N.Yang, R.H. Su, W.J Zhou, Y.S.Zhang, Y.H.Zhong, S.M. Huang, Y.L.Chen, G.K. Li, ***Analytical Chemistry***, 2020, 92:34-48.
2. H.D. Zhang, H.S. Lai, X.R.Wu, G.K.Li, Y.F.Hu, ***Analytical Chemistry***, 2020, 92:4607-4613.
3. J.N.Yang, X.H. Xiao, L.Xia, G.K.Li, L.L.Shui, ***Analytical Chemistry***, 2021, 93:8273-8280.
4. H.S.Lai, Z.Y.Chen, G.K.Li, Z.M.Zhang, ***Analytical Chemistry***, 2022, 94:16275-16281.
5. J.W.Dong, G.K.Li, L.Xia, ***Analytical Chemistry***, 2022, 94:16901-1616909.
6. R.H.Su, G.K.Li,X.H. Xiao, ***Analytical Chemistry***, 2023, 95:6399-6409.
7. H.S.Lai, G.K.Li, Z.M.Zhang, ***Analytical Chemistry***, 2023, 95:18149-18157.
8. D.Li, Z.M.Huo, L.Xia, X.H.Xiao, G.K.Li, ***Analytical Chemistry***, 2024, 96:5369-5374.
9. B.Y.Huo, L. Xia, Y.L. Hu, G.K.Li, ***Biosensors and Bioelectronics***, 2024, 255:116227.
10. L.H.Yin, B.Y.Huo, L.Xia, G.K.Li, ***Analytical Chemistry***，2024, 96:11036-11043.
11. W.Y.Hu, L.Xia, Y.F.Hu, G.K.Li, ***Analytical Chemistry,*** 2025, 97:1347-1356.
12. D.Li, L.Xia, G.K.Li, ***Analytical Chemistry***，2025, 97: 15482-15491.

*基金项目：国家自然科学基金重点项目（No.22134007）、国家自然科学基金面上项目（No. 22576240）和广东省自然科学基金项目（No.2019B020211001）。

时-空分辨拉曼光谱超快组织成像及肿瘤外泌体异质性初探

方吉祥*，杨慧茹，郭雨

西安交通大学，生命科学与技术学院，西安 710049

*Email: jxfang@mail.xjtu.edu.cn

当前，临床上，肿瘤病理诊断仍然存在耗时长、依赖病理医生主观和经验性判断等技术瓶颈问题。目前，肿瘤病理诊断正面临从传统形态学向分子、数字、智能化及快速实时等转变的重大需求。另外，外泌体作为肿瘤重要标志物，其在液体活检中的准确度和特异性，将决定了其作为癌症早筛的重要判断依据。

拉曼光谱作为一种非侵入性、无标记、高灵敏、高特异性的检测手段，能提供肿瘤组织分子组成及结构信息，在肿瘤病理诊断及癌症早期检测等诸多领域具有重要应用前景。然而，现有生物组织拉曼光谱成像中，采用基于显微系统的逐点扫描成像模式，成像速度慢、分辨率低、信号弱及荧光干扰等问题，无法满足快速、在体成像诊断的要求，阻碍了拉曼光谱的组分分析和指纹谱学识别优势的有效发挥，限制了其在临床的应用推广。

本课题组在前期国防重大、重点项目及省重点研发项目的支持下，攻克了国外技术壁垒，研制了远程大型车载和国内首款背负式小型化远程激光拉曼光谱检测装备。我们采用了单光子计数的皮秒时间门控时序选通技术与空间分辨独立选通技术耦合的时-空分辨并行采谱技术，突破了拉曼光谱超快大面积成像难题。在危害物质快速检测与成像，以及生物组织快速成像中，显著提高了检测速度及灵敏度。目前，正在研究基于人工智能光谱-空间交互神经网络深度学习算法，对肿瘤组织图像及不同类型肿瘤来源外泌体分类识别进行解析，以获得肿瘤不同分型、分级和分期的肿瘤病理诊断拉曼光谱特征、组学基本规律及差异化水平与拉曼光谱特性之间的基本规律，阐明不同类型肿瘤的分子生物学特征与拉曼组学的影响规律，初步建立基于拉曼光谱技术的肿瘤快速识别与精准区分的病理诊断模型及基本理论。

关键词：拉曼光谱；快速成像；肿瘤病理诊断；人工智能；新概念科学仪器

参考文献：

[1] Yafei Shi, Yanqi Wang, Xiang Li, Jixiang Fang*, Time-Gated Raman Spectroscopy Combined with Deep Learning for Rapid, Label-Free Histopathological Discrimination of Gastric Cancer, to be submitted. Analytical Chemistry, 2025.

[2] Yu Guo, Jixiang Fang*, Accurate Droplet Manipulation on the Central Radiant Grating Pattern: toward Ultrasensitive Enrichment and Label-Free SERS Detection of Exosomes, ACS Sensors, 2025.

[3] Ruiyuan Zhang, Yu Guo, Chen Huang, Jixiang Fang*, Label-free SERS analysis of biological and physical information heterogeneity of nanoscale extracellular vesicle by matching specific sizes of enhanced particles, Small, 2024, 2409806.

拉曼组分析及分选技术赋能单细胞多组学研究

郑晓姗[1]，孙鲁阳[1]，徐健[1,*]

[1] 中国科学院青岛生物能源与过程研究所，山东省青岛市崂山区松岭路 189 号，266101

*Email: zhengxs@qibebt.ac.cn

开发快速、准确、低成本、单细胞精度、可识别分选功能异质性单细胞并耦合多组学分析的检测手段，是当前单细胞分析领域的迫切需求。本报告聚焦于拉曼光谱技术在单细胞分析中的应用潜力，系统阐述了拉曼组（Ramanome）作为一种无需标记、非破坏性的单细胞表型分析手段，如何与分选技术结合，推动单细胞多组学研究的发展。报告将介绍单细胞拉曼组分析在揭示细胞代谢状态、功能异质性及环境响应等方面的独特优势，并重点探讨了拉曼激活细胞分选（RACS）技术的最新进展，包括与转录组、基因组和代谢组等下游多组学技术的整合策略。通过典型案例分析，展示了该技术在微生物药敏检测、益生菌质检、菌群资源挖掘以及肿瘤异质性研究中的实际应用。单细胞拉曼组分析与分选技术的融合有望突破传统单细胞测序“先裂解后分析”的局限，实现“先分析后分选”的新范式，为单细胞多组学研究提供更高内涵、高维度、更贴近功能状态的数据支持。

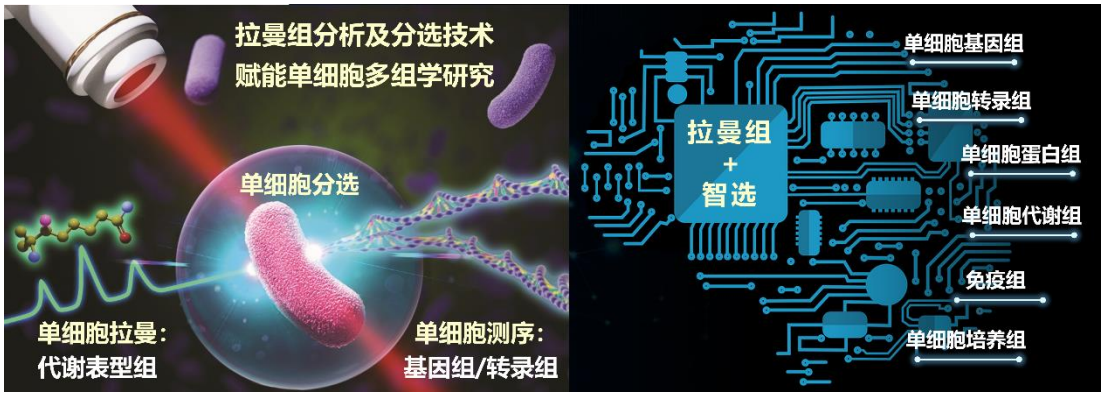


图1：拉曼组分析及分选技术赋能单细胞多组学研究

关键词：拉曼组；单细胞分析；单细胞分选；多组学研究

参考文献：

[1] Zheng, X.; Li, R.; Wang, T.; Li, X.; Han, X.; Dai, Y.; Liu, J.; Xu, J. *Anal. Chem.* **2025**, 97, 9202.

[2] Liu, M.; Zhu, P.; Zhang, L.; Gong, Y.; Wang, C.; Sun, L.; Wang, L.; Chen, R.; Mao, Y.; Fu, X.; Zhang, L.; Xu, T.; Ji, Y.; Dong, Q.; Ma, B.; Zhang, J.; Xu, J. *Clin. Chem.* **2022**, 68, 1064.

高通量拉曼流式分选仪服务全基因组突变体库筛选

王喜先[1]，王森[1]，刁志钿[1]，侯喜报[2]，徐健[1]，马波[1,*]

[1]山东能源研究院，山东省青岛市崂山区松岭路189号，266101
[2]青岛星赛生物科技有限公司，山东省青岛市崂山区株洲路187-1号，266101

*Email: mabo@qibebt.ac.cn

细胞资源挖掘所面临的瓶颈之一是目标功能表型的识别及分选。单细胞拉曼光谱（SCRS）能够在非标记状态下全景式识别单个细胞的复杂功能表型。因此，基于SCRS的拉曼流式分选（RACS）成为极具潜力的功能单细胞高效分选平台。但如何提升RACS的通量、普适性和稳定性是技术难题。本文通过采用微流控宽流场高流量上样策略，有效防止细胞沉降，提升稳定性；开发介电操控技术，实现宽场中单细胞的高效聚焦（保证细胞流经检测位点从而提高检测效率）、灵活捕获（可延长采集时间获取高质量弱拉曼信号从而提高普适性）和快速分选（毫秒级单细胞偏转从而提升分选通量）。最终研制了国内外首台高通量拉曼流式分选仪FlowRACS并已实现产业化。其最高分选通量≥2000个events/分钟，分选准确率≥95%，稳定运行时间≥10小时。基于FlowRACS，成功从裂殖壶菌全基因组突变体库中筛选到多株高产DHA菌株，最高产一株产量较野生型提高>58%，且该菌株已实现产业转化。这是首次基于RACS实现突变体库筛选，FlowRACS将为细胞资源挖掘提供全新视角。

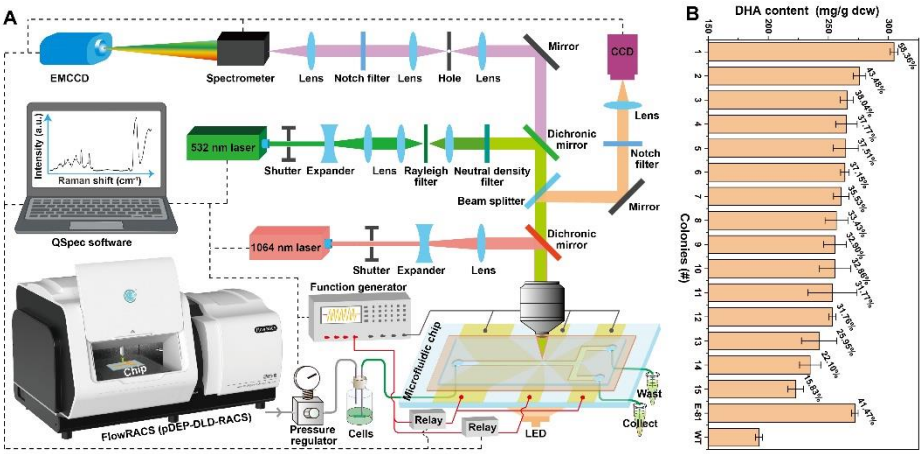


图1：基于FlowRACS的高产DHA裂殖壶菌突变体库筛选。（A）FlowRACS系统示意图；（B）随机挑选分选后15个单克隆的DHA产量。

关键词：拉曼流式；微流控；单细胞；高通量分选；DHA

参考文献：

[1] Xixian Wang#, Lihui Ren#, Zhidian Diao#, Yuehui He#, Jiaping Zhang, Min Liu, Yuandong Li, Lijun Sun, Rongze Chen, Yuetong Ji, Jian Xu*, Bo Ma*, *Adv. Sci.*, **2023**, 10(16): e2207497.

[2] Xixian Wang#, Sen Wang#, Zhidian Diao#, Xibao Hou#, Yanhai Gong, Qing Sun, Jiaping Zhang, Lihui Ren, Yuandong Li, Yuetong Ji, Wei Shen, Yifeng Yin, Shi Huang, Xiaojin Song, Qiu Cui, Yingang Feng*, Jian Xu*, Bo Ma*, *PNAS*, **2025**, 122(22): e2503641122.

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

拉曼光谱结合人工智能快速鉴定和表征微生物

张子怡[1,2]，刘蓓敏[3]，郭宁[4]，徐显扬[1,2]，卢维来[1]，付钰[1,2,5*]

[1]微生物多样性与资源创新利用全国重点实验室，中国科学院微生物研究所，北京，100101
[2]中国科学院大学医学院，北京，100049
[3]山东第一医科大学，山东 济南，250117
[4]沈阳药科大学，辽宁 沈阳，110016
[5]中南民族大学，湖北 武汉，430074

*Email: fuyu@im.ac.cn

微生物的快速种属鉴定以及药敏、毒力等生理生化特征的检测在健康、安全和工农业生产等众多领域有大量的需求。当前微生物的鉴定和检测还很大程度上依赖于分离培养，进而通过形态表型、代谢特性分析或分子生物学手段进行鉴定和检测。但是，分离培养通常耗时长，操作繁琐，并且很多微生物尚无法实现实验室纯培养，亟需研发新的检测技术手段。

拉曼散射是光子与化学物质分子之间产生的一种非弹性光学散射，根据拉曼光谱的特征峰位置、强度和线宽可以鉴定化学分子，因此拉曼光谱被称为化学分子的“指纹图谱”。同时，拉曼光谱的采集具有无损、快速、无需标记、特异性高、非接触、水干扰小等特点，可以在不同温度、压力、pH，盐度等各种物理化学条件下采集，具备先天的方法学优势。一个微生物细胞的拉曼光谱涵括了细胞内所有化学分子的组成信息，可以用来鉴定微生物的种类和表征微生物的生理生化特征。但是，典型的单细胞拉曼光谱400-1800cm^{-1}指纹区域非常复杂，由许多重叠的谱带组成，将拉曼光谱转化为有意义的微生物学数据是一项重大的挑战。人工智能强大的模式识别、数据挖掘和监督下自主学习能力使得其十分契合处理分析拉曼光谱海量复杂数据的需求，能够深入挖掘微生物拉曼光谱与生物特征的潜在关联和非线性模式。

本实验室自主搭建的激光拉曼光镊系统利用785 nm单色连续激光光源捕获微生物单细胞，在操纵单细胞的同时激发细胞产生拉曼散射。通过采集微生物单细胞的拉曼光谱，利用卷积神经网络等深度学习算法建立识别模型，实现了常见微生物的快速鉴定，鉴定正确率达到90.73 %以上，整个鉴定过程在2分钟内完成。单细胞拉曼光谱不仅可以用于快速鉴定微生物的种属，还能够直接对微生物的药敏特性进行预测，区分鲍曼不动杆菌耐药菌株和敏感菌株准确率超过98%。对于多重耐药的鲍曼不动杆菌，基于单细胞拉曼光谱推荐有效抗生素类型的正确率高于73.08%。此外，根据拉曼光谱，我们在单细胞水平准确预测耳念球菌是否可以形成聚集细胞和菌丝态等毒力特征，预测正确率分别为100%和97%。结合拉曼光谱和人工智能技术，我们建立了通过单细胞拉曼光谱对高毒力多重耐药肺炎克雷伯菌的荚膜型进行原位鉴定的体系，依此能够快速筛选裂解性噬菌体，为临床噬菌体治疗提供技术支撑。这些结果表明拉曼光谱技术能够不依赖于培养，快速对微生物进行近似原位的鉴定和生理生化特性表征，具有广泛的应用前景。

关键词：拉曼光谱；人工智能；微生物鉴定与表征；微生物耐药；噬菌体治疗

表面增强共振拉曼散射（SERRS）成像引导的肿瘤切缘划定与术中导航

杨江 [1]

[1] 华南恶性肿瘤防治全国重点实验室，广东省恶性肿瘤临床医学研究中心，中山大学肿瘤防治中心，广州，510060

*Email: yangjiang@sysucc.org.cn

精确的术中肿瘤切缘划定仍是实现根治性肿瘤切除的关键挑战。我们提出了一种创新策略，利用多功能金纳米星（AuNSs），基于表面增强共振拉曼散射（SERRS）成像，实现肿瘤手术边界的实时、高灵敏可视化与导航。其核心在于利用AuNSs尖端结构在共振条件下产生的强局域电场增强效应，显著放大吸附在其表面的拉曼报告分子的SERRS信号，从而克服传统成像手段在术中识别微小肿瘤浸润区域灵敏度不足的限制。通过对AuNSs的表面功能化修饰，使其能够特异性富集于肿瘤细胞或正常肝组织，大幅降低背景信号干扰。 肿瘤浸润区域由于AuNSs的高度聚集而呈现强烈且特征明确的SERRS信号，与正常组织形成显著对比，实现毫米级精度的真实手术边界可视化，引导术中动态切除策略，最大化肿瘤切除同时保留健康组织。此外，该策略亦可灵敏识别残余微小病灶，体现“可视并即时切除（see-and-excise）”的手术理念，从而降低术后复发风险。我们在多种实体瘤模型（包括皮下、原位、PDX 及 GEMM 模型）的术中场景中验证了此成像方法，SERRS信号增强及肿瘤边界定位精度达到微米级，显著优于肉眼判断，并与术中冰冻切片结果良好一致。因此，基于AuNSs的SERRS成像导航有望提高手术清除肿瘤病灶的彻底性。该技术实现了术中实时、高分辨率、高特异性的肿瘤边界可视化与精准切除引导，为精准肿瘤外科手术和改善患者预后提供了突破性进展。

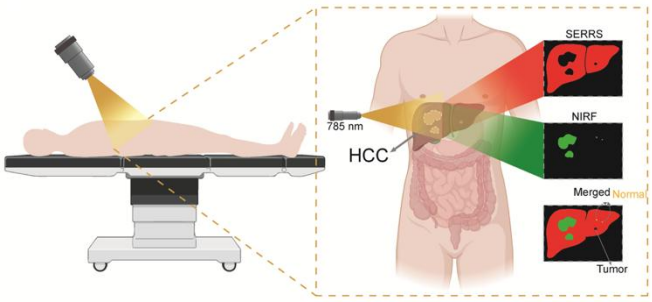


图 1：表面增强共振拉曼散射成像在肝细胞癌（HCC）中与近红外荧光成像的联合术中导航应用

关键词：表面增强拉曼散射；金纳米星；术中导航；肿瘤成像；正负造影

时间门控拉曼还原皮肤指纹光谱

张莉丽[1*]，薛兴梅[2]，陈昌[1,3*]

[1] 上海交通大学附属瑞金医院医学芯片研究所，上海，200025
[2] 上海大学微电子学院，上海，201899
[3] 上海近观科技有限责任公司，上海，200443

*Email: lili.zhang@photonicview.com, changchen@sjtu.edu.cn.

本团队近期研发的基于拉曼光谱的mμSORS无创血糖检测技术广受关注[1]，但很多皮肤拉曼信号被组织自发荧光淹没，“本真”分子指纹难以获取，限制了无标记在体诊断检测的时间和精度。本报告将介绍时间门控拉曼光谱系统的工作原理，基于不同层皮肤的荧光寿命特性研究揭示时间门控拉曼光谱在皮肤荧光抑制方面的巨大优势，基于数十例人群的在体时间门控拉曼光谱研究，展示时间门控拉曼光谱技术还原不同层皮肤指纹光谱的能力，探讨其在高精准、快速无创血糖检测方面的应用潜力。

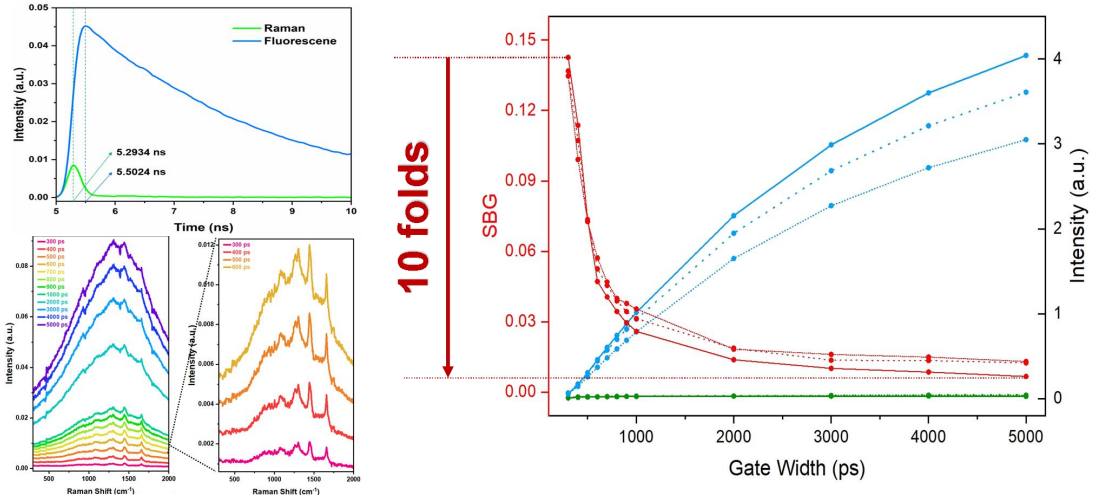


图1：基于皮肤拉曼和荧光时间分辨特性，利用时间门控技术还原皮肤指纹拉曼光谱

关键词：时间门控拉曼光谱；mμSORS无创血糖；皮肤；荧光抑制

参考文献：

[1] Zhang, Y., Zhang, L., Wang, L. et al. Subcutaneous depth-selective spectral imaging with mμSORS enables noninvasive glucose monitoring. Nature Metabolism 7, 421–433 (2025).

单金纳米棒等离子体与单层 WS_2 激子强耦合暗场散射与光致发光（PL）光谱研究

李京[1]，尤卿章[2]，薄文静，米笑晨，王培杰[1*]

[1]首都师范大学，西三环北路 105 号，100048

*pjwang@cnu.edu

在量子纳米光子学领域，等离激元-激子强耦合系统因其独特的量子态杂化特性，为探索光-物质相互作用的新奇特性和开发新型量子光学器件提供了重要平台。传统上，强耦合的判定主要依据散射光谱中的反交叉行为，但该方法易受等离激元多模干涉和 Fano 共振等效应的干扰。相比之下，光致发光（PL）光谱能直接反映激子态的真实能级，是验证强耦合的更可靠手段，但由于辐射效率低、信号弱等问题，相关实验观测仍具挑战性[1]。本研究构建了金纳米棒-单层 WS_2 异质结构强耦合体系，通过系统测量 150 组单个纳米棒与单层 WS_2 耦合结构的暗场散射光谱和 PL 光谱，有力地证明了明确的强耦合产生。另外，统计分析了散射光谱与 PL 光谱的双峰劈裂峰值能量分布，观测到明显的拉比劈裂。其中散射光谱拉比劈裂的平均值为 106 meV，PL 光谱拉比劈裂的平均值为 45 meV（图 B）。由于在 405nm 激光激发下 PL 双峰劈裂对应真实的极化激元态能级，其显著小于散射光谱拉比劈裂，原因在于 PL 光谱仅反映激子主导的辐射复合过程，避开了等离激元多模干涉的影响。利用双振子耦合模型进行数值解析计算，其模拟结果与实验高度吻合（图 B）。该研究在单颗粒强耦合体系中同时实现了散射与 PL 光谱的拉比劈裂测量，为探索室温下量子光学特性提供了有力参考。

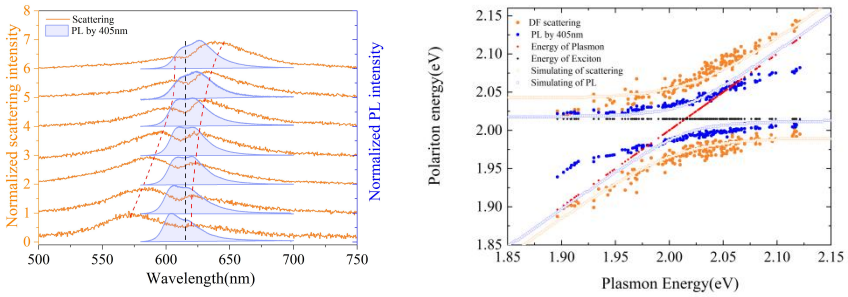


图1：图A，典型单个纳米棒与单层WS_2 耦合结构的暗场散射光谱及PL光谱（405 nm 波长激发）。图B，150组单个纳米棒与单层WS_2 耦合结构散射光谱及PL光谱劈裂峰值能量散点分布图及反交叉曲线。

关键词：拉比劈裂；强耦合；暗场散射光谱；光致发光（PL）光谱

参考文献：

[1] Baumberg, J. J. (2024); Robust consistent single quantum dot strong coupling in plasmonic nanocavities. Nature Communications, 15(1).

微纳光腔等离激元近场调控非线性效应研究

陈环[1]，张正龙[1,*]，郑海荣[1,*]

[1] 陕西师范大学，陕西西安，710119

*Email: hchen@snnu.edu.cn

纳米光腔等离激元将光限制在远小于自由空间波长的尺度，耦合了光场和电子激发，为在纳米尺度下研究光与物质相互作用提供了新途径。本研究旨在利用片上等离激元纳米光腔有效调控稀土离子上转换发光，显著压缩稀土离子荧光寿命，提升上转换发光效率，揭示等离激元近场调控上转换过程的新机理，发展纳米光腔调控上转换发光手性及其自身二次谐波效应的新方法，为在纳米尺度操控非线性光学效应提供新方法。研究结果将加深等离激元近场与稀土离子的光与物质相互作用新机制的认识，促进稀土发光单色性、稳定性、相干性等方面优势的完全发挥，有效地推动片上微光源、超分辨非线性生物成像、自旋操纵单光子源、量子加密通信和纳米激光器的发展。

关键词：非线性光学效应；稀土离子；上转换发光；表面等离激元；纳米光腔

参考文献：

[1] Huan Chen, Zihe Jiang, et.al, Sub-50-ns ultrafast upconversion luminescence of a rare-earth-doped nanoparticle. *Nature Photonics*, 2022, 16(9), 651-657.

[2] Lei Guo, Min Ji, et.al, Plasmon-assisted mode selection lasing in a lanthanide-based microcavity. *Advanced Photonics*, 2024, 6(03), 035001.

基于表面等离激元的稀土掺杂发光晶体结构优化与光信息存储研究

张成云[1*]，高伟[1]，董军[1]，张正龙[2,*]，郑海荣[2,*]

[1] 西安邮电大学电子工程学院，西安 710121
[2] 陕西师范大学物理学与信息技术学院，西安 710119

*Email:cyzhang@xupt.edu.cn

随着光子技术的高度集成化发展，传统退火方法因空间分辨率低、无法实时原位无损监测晶体结构和局域温度，已难以满足纳米材料选择性可控优化的需求。本研究以Eu^{3+}离子作为局域结构的光谱探针，以特定晶相转化速率作为局域温度传感器，以金纳米颗粒为高效光吸收-光热转换元件，构建了微纳晶体热等离激元辅助快速原位热处理方案。实验表明，热等离激元不仅能辅助实现纳米结构中离子掺杂的精准调控，还可使材料在单晶，多晶与非晶态间转变。此外，局域表面等离激元共振的强光场约束与超快热响应特性，使得转化后的Y_2O_3-Au颗粒可在两种发光态间快速切换，展现出超高开关比（10^4）和优异谱线分辨率。基于Y_2O_3-Au"增强-猝灭"态发光切换特性，实现了自加密全光存储器。通过调控辐照光功率即可完成全光信息写入、读取、擦除与加密，无需外接设备或操作。特别地，触发等离激元热效应辅助发光猝灭的前提条件（读取密钥）已在颗粒生成（数据写入）时确立，唯有当光频率与功率密度严格符合预设条件时，存储信息才能被有效读取，显著提升了数据加密与防伪的安全性。



图1 基于等离激元和稀土掺杂发光晶体复合结构的光信息存储应用

关键词： 表面等离激元共振；稀土离子发光；晶体结构；发光切换；光存储

参考文献：

[1] Zhang C., Yin Q., Ge S., Zhang H. et al., *Advanced Optical Materials* **2025**, 13, 24, 202500245. （封面文章）

[2] Zhang C., Zhou X., Kong T. et al., *J. Mater. Chem. C* **2024**, 12 2849-2858.

[3] Zhang C., Ji M., Zhou X. et al., *Advanced Functional Materials* **2022**, 33, 2208561. （封面文章）

[4] Zhang C., Lu J., Jin N. et al., *Small* **2019**, 15, 1901286.

低温高压原位光谱测量系统的研制及应用

雷力*、吴彬彬

四川大学 原子与分子物理研究所

Email：lei@scu.edu.cn

摘要：

高压光谱学是研究高压相变、高压化学反应机理、高压下材料的物性的重要原位实验测量手段。目前大多数高压光谱研究主要在室温条件下进行，而低温高压光谱实验主要以高压冷却降温为主的研究手段。由于设备和技术等方面的限制，在低温等温压缩的条件下开展高压原位光谱测量的研究仍相对较少。因此，开发低温等温压缩下进行光谱测量，不仅可以通过实验确定 *P-T* 斜率较大相边界，还可以研究低温条件下声子等元激发对压力的响应特性。

我们的研究团队面向低温高压原位光谱测量的实验需求，自主设计发展研制了一套低温高压原位光谱测量系统[1]。利用该系统，我们首次通过实验确定了四种典型半导体材料（ZnO，GaN，AlN 和 $LiGaO_2$）在低温下的 B4-B1 相界，并获得了相应的负克拉珀龙斜率参数及其与熵的密切关系[2]。同时我们还利用该系统揭示了低温下 ZnS 的 B3-B1 相边界和声子模的温度和压力依赖性[3]。此外，我们的研究团队在自主设计搭建的综合极端条件光谱平台上，沿着四条独立的 *P-T* 实验路径首次获得了 U_3O_8 的低温高压谱学数据，给出了 U_3O_8 的 *P-T* 相图[4]。我们还在低温高压下揭示了应力诱导的金刚石荧光与温度和压力之间的关系，并进一步探讨了电子-声子相互作用对金刚石能隙的影响[5]。

低温高压等温压缩光谱测量技术的发展，为高压低温物态研究、相变探索及行星物理研究提供了实验技术支撑，对高压科学与技术、激光光散射谱学、凝聚态物理、材料科学、地球与行星科学等领域的前沿研究具有重要意义。

关键词：高压低温实验技术；拉曼光谱；半导体相变

参考文献

1. 雷力，吴彬彬.一种原位测量组装件。发明专利/实用新型（ZL 202320995223.0）
2. B. Wu, Y. Li, Y. Lin, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2025**, 126: 112109.
3. B. Wu, Y. Lin, Y. Li, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2025**, 126: 102103.
4. Y. Wang, B. Wu, J. Liu, *J. Raman Spectrosc.* **2024**, 55(9): 997.
5. Y. Li, B. Wu, J. Liu, *et al.*, *Solid State Commun.* **2024**, 390: 115609.

基金项目：国家自然科学基金(NO. 11774247，NO. 12374013)，中央高校基本科研业务费专项资金(2020SCUNL107)
通讯作者：雷力，男，四川大学研究员，博士生导师，主要从事极端光谱学研究。Email：lei@scu.edu.cn

圆极化声子的光谱测量与第一性原理计算

张田田[1*]，张帅[1]，车梦倩[2]，杨润[3,*]，杨鲁懿[2,*]，Martin Dressel[4,*]

[1]中国科学院理论物理研究所，北京市海淀区中关村东路 55 号，100190
[2]清华大学，北京市海淀区双清路 30 号，100084
[3]江苏省南京市玄武区四牌楼 2 号，210096
[4] Kepler Street 7, Stuttgart, Germany, 70174

*Email: ttzhang@itp.ac.cn; ryang@seu.edu.cn; luyi-yang@mail.tsinghua.edu.cn;
dressel@pi1.physik.uni-stuttgart.de

固体中的（准）粒子种类繁多。其中，作为晶格振动的“元激发”，太赫兹量级的声子直接影响着固体材料的载流子迁移率、热导率等物性，并在结构相变、传统超导、光散射等物理机制中起着重要作用。然而，“零自旋”和电中性的属性使得声子难以被操控，限制了其参与调控、影响的物理过程。近些年随着“拓扑”和“手性”这两个自由度在太赫兹量级声子谱中的成功引入，不仅为声子提供了“调控手柄”，也为理解声子是如何影响导热、超导等基本物理现象提供了新的思路。在报告的前半部分，我将介绍几种拓扑声子的分类和判别方法，以及相关材料的预测和实验验证。如首个拓扑声子材料FeSi[1]。报告中部则重点介绍圆极化声子的手性定义及其相关的几个概念，以及光谱实验探测[2-5]。最后，我将介绍我组开发的第一性原理计算方法，用于计算和预言磁性材料中固有磁矩诱导的圆极化声子，以及详细解释电子序是如何破坏晶格动力学中的对称性的[5]。

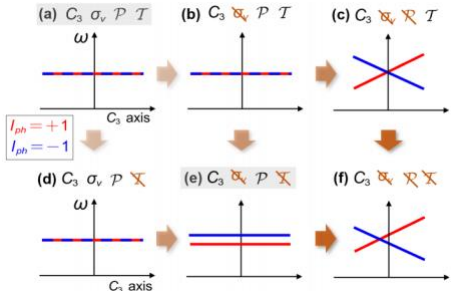


图1：$Co_3Sn_2S_2$ 中晶格动力学对称性破缺的过程。其中(a)对应居里温度以上，(d)对应居里温度以下实验探测的结果。

关键词：圆极化声子；拓扑声子；拉曼散射；红外吸收谱；第一性原理计算

参考文献：

[1] Zhang, T.; et al. *Physical Review Letters*, **2018**, 120, 016401.
[2] Yang, R.; ... Zhang, T.; Dressel, M. *Physical Review Letters*, **2025**, 134, 196905.
[3] Che, M.; ...Zhang, T.;Yang, L. (2025). *Physical Review Letters*, **2025**, 134, 196906.
[4] 杨鲁懿，杨润，张田田。*物理*, **2025**, 54, 503-506.
[5] Zhang, S.; Wang, M.; Zhang, T. *arXiv:* **2025**, 2509.09253.

高压下碳基分子晶体的结构与光学性质研究

翟春光 [1,*]

[1] 吉林大学，吉林省长春市，130000

*Email: zhaicg@jlu.edu.cn

反常压致发光响应材料在传感器、光学防伪、发光器件等领域具有重要的应用前景，成为近年来的研究热点，其中压致蓝移增强材料在深海探测等高色温环境中有重要作用。sp^2杂化的碳基分子具有独特的p/π电子结构，适合可见光激发，为构筑反常压致发光响应材料提供了重要来源。然而，通常在压力下分子间相互作用的增强及晶体能隙的减小，使得构筑反常压致发光响应的材料极具挑战。基于此，我们提出“分子插入”“跨环共轭”和“原子轨道共享”等设计思路，构筑出多个反常压致发光响应的新型功能材料。其中，利用“分子插入”，通过高压调制共晶材料中各组分电子结构，构筑了压致荧光蓝移增强的材料，并进一步推广了该策略在CTF中再次复现这一策略。利用“碘原子轨道共享”，通过高压调控1,4-DITFB分子晶体中的分子间相互作用，成功构筑了压致从无到有、蓝移增强和寿命延长的室温磷光材料。

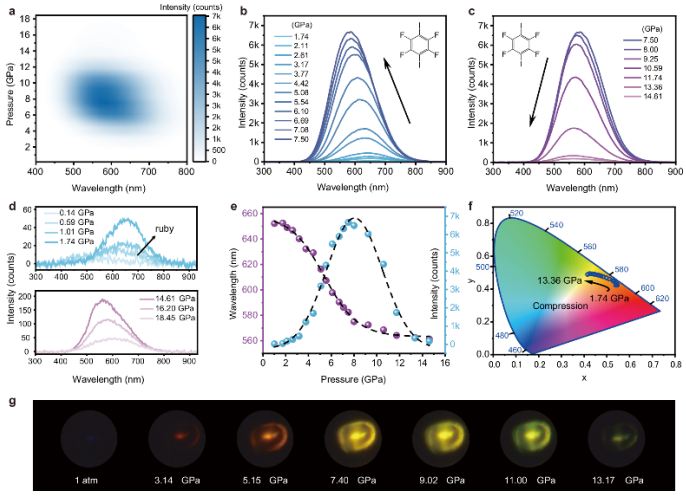


图1： 1,4-DITFB分子晶体的压致发光特性。

关键词： 压致变色材料，蓝移增强发射，碳基分子材料

参考文献：

[1] Zhai, C.; Yin, X.; Niu, S.; Yao, M.*; Hu, S.; Dong, J.; Shang, Y.; Wang, Z.; Li, Q.; Sundqvist, B.; Liu B.* Nature Communications **2021**, 12, 4084.

[2] Yang, Z.; Zhai, C.*; Dang, L.; Niu, Z.; Shang, Y.; Hu, X.; Wang, Y.; Zhou, T.; Yao, M.* Angewandte Chemie International Edition **2025**, 64, e202509398.

[3] Xu, T.; Zhai, C.*; Liu, Z.; Yang, X.; Hu, S.; Shang, Y.; Yue, L.; Dong, J.; Liu, R.; Li, Q.; Yao, M.* ; Liu B. Nature Communications **2025**, 16, 3550.

等离激元纳腔-2D 单激子室温强耦合作用量子调控

刘仁明[1,*]，罗婷[1]，冯世豪[1]，毛艳丽[1]

[1] 河南大学物理与电子学院，河南省高效能量转化科学与技术重点实验室、河南省新能源材料与器件国际联合实验室，开封，475004

*Email: liurm@henu.edu.cn

等离激元纳腔-单激子强耦合作用为人们在室温、单光子水平上制备和操纵量子态提供了一个有力手段[1-3]。因此，其长期以来一直是量子光学及量子电动力学等领域的核心研究内容之一。近年来，二维过渡金属硫化物（2D-TMD）单层因其具有原子级厚度、直接带隙、激子束缚能大、机械强度高、集成性好等突出优势，成为光-物质相互作用研究的理想材料，已广泛应用于强耦合作用。然而，2D-TMD 中较高的激子密度和小的激子波尔半径令其单个 2D 激子的精确控制与激发变得极其困难，导致基于此类材料的光子-2D 单激子强耦合成的实现为了一个瓶颈问题。本文基于等离激元纳腔电磁热点多维精确调控实现等离激元纳腔电磁热点精确调控。通过构建银包金纳米圆盘对儿等离激元纳腔（图. 1），使其光场在 2D-TMD 表面达到亚 10 nm2 超聚焦，实现对其 2D 单激子的精确控制与激发。最后，利用光子衬底布洛赫表面波调控等离激元电场方向使之与激子面内跃迁偶极矩相匹配，增强耦合强度，实现等离激元-2D 单激子强耦合，并揭示其极化激元的光学响应特性。

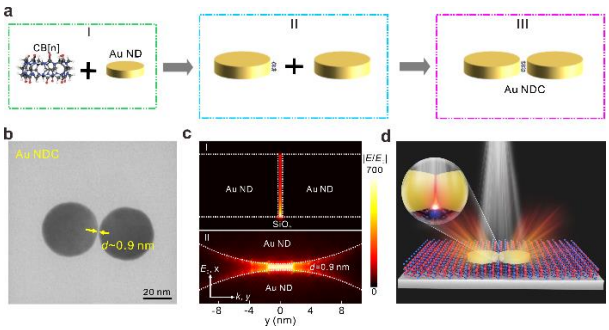


图 1：(a) 金纳米圆盘二聚体等离激元纳腔的制备示意图。(b) 金纳米圆盘二聚体等离激元纳腔的 TEM 形貌图。(c) 金纳米圆盘二聚体等离激元纳腔间隙中心的电场分布仿真计算结果。(d) 金纳米圆盘二聚体等离激元纳腔与 2D 单激子室温强耦合作用示意图。

关键词： 等离激元纳腔；2D单激子；强耦合；室温；量子态

参考文献：

[1] Liu, R. M.*; Geng, M.; Ai, J. D.; Fan X. Y.; et al. *Nat. Commun*. **2024**, 15, 4103.
[2] Li, W.; Liu, R. M.*, Li, J. Y.; Wang, X. -H.*; et al. *Phys. Rev. Lett*. **2023**, 130, 143601.
[3] Liu, R. M.; Zhou Z. -K.; Yu Y. -C.; Wang, X. -H.*; et al. *Phys. Rev. Lett*. **2017**, 118, 237401.

Giant thermal contraction driven by Jahn-Teller effect

梁二军[1*]，曾高杰[1]，梁源[2]，郝向凯[1]，任霄[1]，郭娟[1]

[1] 郑州大学物理学院与中原之光实验室，郑州市科学大道 100 号，450001
[2] 东华大学物理学院，上海市松江区人民北路 2999 号，201620

*ejliang@zzu.edu.cn

Negative thermal expansion not only challenges the concept of conventional lattice dynamics, but also has potential applications in a variety of fields. Recently we proposed a new mechanism for negative thermal expansion, i,e. Jahn-Teller effect (JTE) or pseudo-Jahn-Teller effect (PJTE) which is confirmed in a series of materials such as $Fe_2P_2O_7$, $Cr_2P_2O_7$, $Zn_2P_2O_7$, and so on. Herin we introduce briefly the physics of JTE and PJTE, corelate the distortion of polyhedra and negative thermal expansion with the vibronic coupling and adiabatic potential energy surface (APES) as shown in Fig. 1a. Next we report the experimental demonstration of the proposal.Experimental results show that materials with the formula $M_2P_2O_7$ (M=Mg, Cr, Ni, Co, Fe, Cu, Zn) exhibit successively low or negative, giant negative and normal thermal expansion behaviors with the increase of temperature accompaniend by structure phase transition (Fig. 1b), corresponding well to the transition from strong vibronic coupling to pure anharmonic phonon dominated potential wells. This is confirmed by Raman spectroscopy.

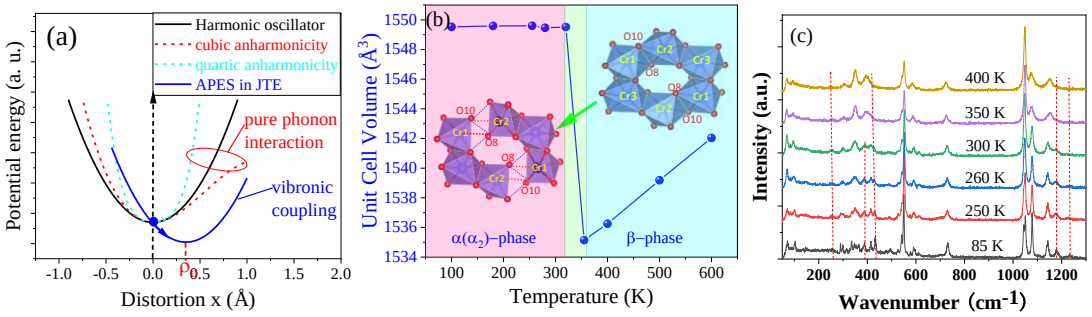


FIG. 1 (a) Comparison of potential energy for harmonic oscillator, and with cubic and quartic anharmonicity and Jahn-Teller effect; (b) Structure and lattice volume evolution with temperature and (c) Raman spectra of $Cr_2P_2O_7$.

Keywords: Jahn-Teller effect; lattice dynamics; vibronic coupling; negative thermal expansion

References:

[1] Liang Y.; Zeng G.; Hao X; et al. *Appl. Phys. Lett.* **2024**, *125*, 162201.
[2] Liang Y.; Zeng G.; Hao X; et al. *Phys. Rev. B*, **2025**, 112, 104307.

高温水氧原位拉曼表征技术及应用

程国峰

[1] 工中国科学院上海硅酸盐研究所，上海，200050

*Email: gfcheng@mail.sic.ac.cn

通过搭建高温水氧环境原位表征装置，实现了室温到1400℃的温度范围，0-10wt%的水蒸气浓度范围的高温水氧耦合环境下进行拉曼光谱的原位表征，并研究了SiC_f/SiC复合材料在高温环境中不同氧化环境下的氧化行为。结果表明，干氧氧化会抑制Si、C原子在原胞内的相对振动，而水蒸气的存在可以消除高温氧化过程中对Si-C原子相对振动的抑制作用。此外，SiC_f/SiC复合材料的氧化临界温度为1000℃，BN界面相在1000℃时完全氧化挥发。进一步利用纳米压痕仪研究了复合材料的微观力学性能如硬度和杨氏模量。氧化前，基体的硬度和杨氏模量分别为19GPa和314GPa。高温干氧氧化后Si-C键的断裂导致复合材料的硬度和杨氏模量都下降，并且水蒸气的存在加剧了Si-C键的断裂，加速了材料寿命性能的衰退。

关键词： SiC_f/SiC；高温水氧；拉曼光谱；硬度；杨氏模量

参考文献：

[1] S. Agarwal; Q. Chen;T. Koyanagi;Y. Zhao; S.J. Zinkle; W.J. Weber.*J. Nucl. Mater.* **2019**, 526

[2]W.C. Oliver; G.M. Pharr. J. Mater. Res.2004, 19, 3.

二维半导体中光子-电子-声子耦合空间相干的拉曼散射

林妙玲 [1,*]，谭平恒 [1,*]

[1] 中国科学院半导体研究所，半导体芯片物理与技术全国重点实验室，北京，100083

*Email: linmiaoling@semi.ac.cn; phtan@semi.ac.cn

基于电偶极近似和群论对称性分析所建立的拉曼张量，构成了拉曼选择定则的基础，即拉曼实验中只能观察到拉曼活性的声子模，而观察不到拉曼禁戒的声子模。这些结论与激发光波长以及样品所在的衬底无关。该理论框架几乎可以理解所有的拉曼散射结果。我们研究发现少层（小于10层）二维半导体只能观察到拉曼允许的层间呼吸声子，但是在厚层二维半导体中，既能观察到拉曼允许的层间呼吸声子，也能观察到拉曼禁戒的层间呼吸声子，且拉曼禁戒的层间呼吸声子模式的强度依赖于层数、衬底和激发光波长，无法用电偶极近似下的理论框架来理解。经研究发现，二维半导体层间呼吸声子的振动形式具有驻波特征，形成了天然的声子腔，二维半导体厚度增加可使得声子腔可能与光子波矢大小相当，电偶极近似的前提条件不再成立；同时，放置在衬底上的二维半导体可形成空气/二维半导体/衬底多层结构的法布里珀罗腔，在空间上调制了光子-电子相互作用。声子腔和光学腔的共同作用，形成了空间调制的光子-电子和电子-声子相互作用，我们由此提出了空间调制的光子-声子耦合拉曼散射理论，建立了光子-声子耦合的空间相干模型，定量揭示二维半导体中层间呼吸声子的拉曼强度随厚度、激发光波长和材料与衬底间折射率失配度变化的演变规律。该研究揭示了受光学腔和声子腔调控的光子和声子场空间相干性对声子激发的重要影响。

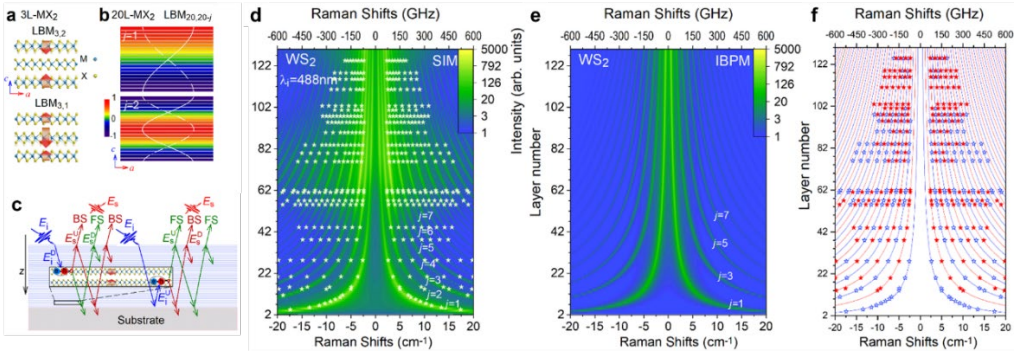


图 1 (a) 3层二维半导体（用3L-MX_2表示）的LBM振动形式，(b) 20L-MX_2中$LBM_{N,N-j}$（j=1，j=2）的振动形式，(c) 二维半导体光学腔，(d)SIM、(e)IBPM所计算的WS_2在488nm激发下的LBMs强度分布，(f)WS_2中由传统理论预测的拉曼活性（空五星）和拉曼非活性（实五星）LBMs

关键词： 二维半导体；层间呼吸声子；空间相干；拉曼禁戒

参考文献：

[1] Lin, M.-L.; Wu, J.-B.; Liu, X.-L.; et al. Phys. Rev. Lett. **2025**, *134*: 096903.

柔性基底二维异质结界面力学行为的多光谱原位实验研究

仇巍 [1, 2, 3,*]，许超宸 [1]，邢华丹 [1]，刘纪斌 [1]，王苗菁 [1]，李如冰 [1]，杜红志 [1]，谢海妹 [1, 2, 3]，张茜 [1, 2, 3]，亢一澜 [1]

[1] 天津大学机械工程学院力学系，天津市南开区卫津路 92 号，300072
[2] 天津大学天津现代工程重点实验室，天津市南开区卫津路 92 号，300072
[3] 车用动力系统全国重点实验室，天津市南开区卫津路 92 号，300072

*Email: qiuwei@tju.edu.cn

二维材料及其异质结的界面力学行为是多尺度力学及相关领域共同关注的前沿热点，也是实现二维材料器件批量制造与应用必须解决的工程问题。本工作开展了柔性基底二维材料异质结界面力学行为的原位多光谱学实验研究。将显微拉曼光谱与显微荧光光路原位联用，开展了不同载荷状态下界面变形传递的实验测量；提出了有限弹性界面模型，解释了柔性基底石墨烯-二硫化钼范德华异质结等多层二维结构的界面竞争机制及其尺寸依赖性；提出了基于二次谐波表征应变状态的实验新方法，构建了二硫化钼面内三个应变分量与二次谐波偏振-强度谱瓣膜比之间的解析关系模型，搭建了显微拉曼光谱、光致发光光谱和二次谐波同轴的原位多光谱系统，实验验证了所提出方法和装置的可靠性、准确性和适用性，实现了二维材料复杂变形状态的应变分量解耦分析。

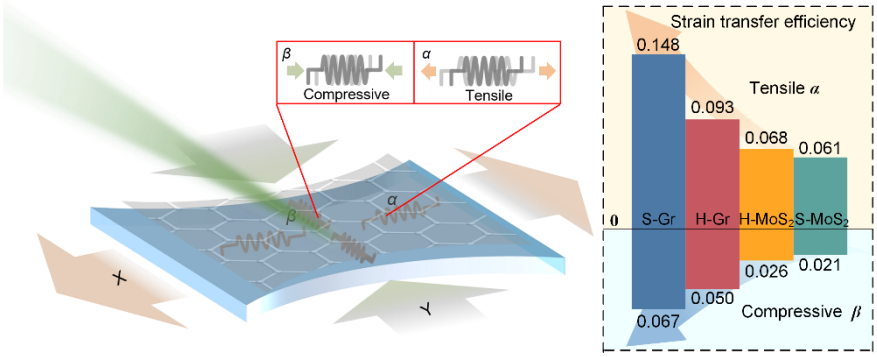


图1：二维材料-软基底间应变传递行为的光谱力学研究

关键词：二维材料；柔性基底；范德华异质结；原位多光谱；界面力学行为；有限弹性界面模型；二次谐波

参考文献：

[1] Xing, H.; Wang, X.; Xu, C.; Du, H. *Carbon*. **2023**, *204*, 566-574.
[2] Xing, H.; Liu, J.; Zhao, Z.; He, X. *Commun. Physics*. **2024**, *7*, 382.

国产时间门控拉曼光谱仪的研发及其在强荧光背景物质检测中的应用研究

王振友[1,*]，方广有[1]

[1]广东大湾区空天信息研究院，广东省广州市黄埔区开源大道 11 号科技企业加速器 B7 栋 501 室，510530

*Email: wangzhenyou@aircas.ac.cn

拉曼光谱技术因其高选择性与非破坏性，在材料科学、能源技术、生物医药和文化遗产保护等领域具有广泛应用前景。然而，面对伴随强荧光背景的样品，传统拉曼技术常常难以获取有效信号，应用受到显著限制[1]。为解决这一技术瓶颈，广东大湾区空天信息研究院自主研发了一款抗荧光干扰能力优异的国产时间门控拉曼光谱仪，集成mapping成像等关键功能，有效提升了弱拉曼信号的提取效率和系统实用性。依托该仪器平台，团队系统开展了多类强荧光背景物质的检测研究，包括中药材（如陈皮）、低成熟度干酪根、矿物岩石、血清、尿液及有机颜料等。测试结果表明，在常规拉曼无法成谱的样品中，该仪器依然能够获取清晰稳定的拉曼信号，显著扩展了拉曼技术在复杂基质样品中的适用范围。相关研究成果已在地球科学、生命科学和考古等多个领域中开展初步应用。本报告将详细介绍该时间门控拉曼系统的设计理念、抗荧光干扰核心性能、典型应用场景及未来发展方向，重点探讨其在原位检测、多模态集成与国产高端仪器替代等方面的潜力。

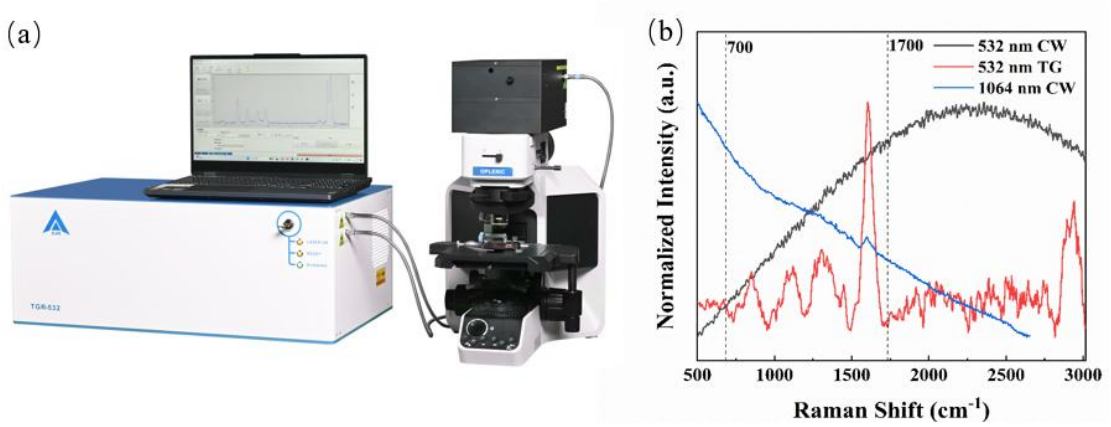


图1：（a）时间门控拉曼光谱仪样机；（b）陈皮样品在不同拉曼技术下获取的光谱对比。

关键词：时间门控拉曼光谱；荧光背景干扰；陈皮：象牙；干酪根。

参考文献：

[1] D. Wei, S. Chen, and Q. Liu, Appl. Spectrosc. Rev. 50, 387 (2015).

$CaO-Al_2O_3-SiO_2$ 三元系高温熔体结构及其物性研究

尤静林*，唐晓辉，张福，刘国鹏，夏翔，赵玉帆

省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室、上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室和上海大学材料科学与工程学院，上海 200444

*Email: jlyou@163.com

$CaO-Al_2O_3-SiO_2$ 三元系作为一个重要的基础体系，广泛应用于材料科学、冶金学及地质学中。通过高温原位拉曼光谱和^{27}Al MAS NMR测定，深入研究了不同Al_2O_3含量的CaO-SiO2基熔体的微观结构演变及其与粘度的相关性。设计了一系列用Ca^{2+}和Na^{+}阳离子改性的铝硅酸盐系列模型团簇，进行了量子化学（*QC*）从头计算以进行几何优化和拉曼光谱模拟。建立了铝硅酸盐硅氧四面体（*SIT*）的拉曼散射截面（*RSCS*）与应力指数之间的函数关系，并成功应用于实验拉曼光谱的校准。随后，通过对校准的拉曼光谱进行细致的解卷积，定量地进行了微观结构物种Q_i（i=0-4）的分布。讨论了熔体中Qi物种的微观结构特征及其随Al_2O_3含量的演变。此外，基于每个网络形成四面体非桥接氧的平均数（*NBO/T*），对粘度和结构之间的关系进行了相关性分析。

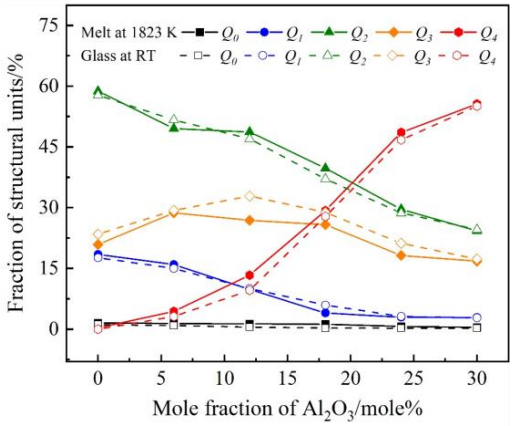


Figure 1. The quantitative distribution of primary Q_i (i = 0-4) species with the increase of Al_2O_3 content determined by Raman spectroscopy in calcium aluminosilicate melts.

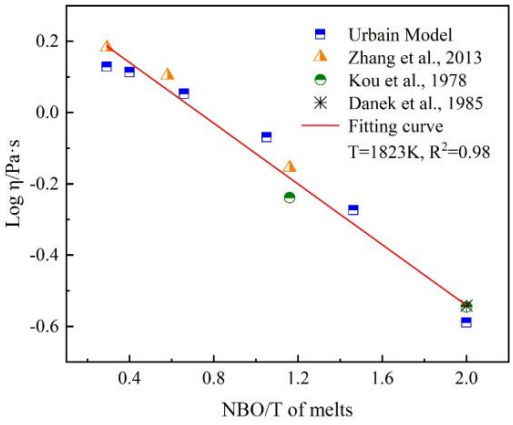


Figure 2. The quantitative linear relationship between the logarithm of viscosities and *NBO/T* of melts. The red line is the corresponding fitting curve.

关键词：铝硅酸钙，拉曼光谱，^{27}Al MAS NMR，量子化学从头计算，粘度

参考文献：

[1] Ganisetti Sudheer; Gaddam Anuraag; Kumar Rajesh; et al., *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2019**, 21: 23966.

[2] Tang Xiaohui; You Jinglin; Zhang Fu; et al., *Ceramics International*, **2024**, 50(10): 16765.

基金项目：国家自然科学基金（批准号:21773152,22003039）、中央军委科技委基础加强计划重点基础研究项目（2021-JCJQ-ZD-051-00-02）、科技部中央引导基金（批准号:YDZX20173100001316）资助。

Magnetic order induced chiral phonons in a ferromagnetic Weyl semimetal

杨鲁懿 [1]

[1] 清华大学物理系，北京市清华大学物理系，100084

*Email: luyi-yang@mail.tsinghua.edu.cn

Chiral phonons are vibrational modes in a crystal that possess a well-defined handedness or chirality, typically found in materials that lack inversion symmetry. Here we report the discovery of chiral phonon modes in the kagome ferromagnetic Weyl semimetal $Co_3Sn_2S_2$, a material that preserves inversion symmetry but breaks time-reversal symmetry. Using helicity-resolved magneto-Raman spectroscopy, we observe the spontaneous splitting of the doubly degenerate in-plane E_g modes into two distinct chiral phonon modes of opposite helicity when the sample is zero-field cooled below the Curie temperature, in the absence of an external magnetic field. As we sweep the out-of-plane magnetic field, this E_g phonon splitting exhibits a well-defined hysteresis loop directly correlated with the material's magnetization. The observed spontaneous splitting reaches up to 1.27 cm^{-1} at low temperatures, progressively diminishes with increasing temperature, and completely vanishes near the Curie temperature. Our findings highlight the role of the magnetic order in inducing chiral phonons, paving the way for novel methods to manipulate chiral phonons through magnetization and vice versa. Additionally, our work introduces new possibilities for controlling chiral Weyl fermions using chiral phonons.

关键词： 手性声子；铁磁材料；拉曼光谱

参考文献：

[1] M. Che et al., Magnetic order induced chiral phonons in a ferromagnetic Weyl semimetal, Physical Review Letters **134**, 196906 (2025).

HORIBA 拉曼光谱新技术/新应用

周琰 [1]

[1] 堀场（中国）贸易有限公司，前沿应用开发中心，中国上海市嘉定区春秀路 99 号，201800

*Email: yan.zhou@horiba.com

本次报告将分为三个部分介绍HORIBA分子光谱的新技术/新应用。第一部分会介绍HORIBA的最新仪器RPR高通量拉曼筛选系统、PAT过程监控拉曼系统应用。第二部分会介绍拉曼仪器的最新拓展功能及应用，包括SmartSampling™ 人工智能成像技术、SRS视频级拉曼成像技术（Vibronix）、拉曼-二次谐波SHG-线偏-圆偏解决方案。第三部分将介绍拉曼联用技术，包括拉曼-AFM-TERS联用技术、SEM/EDS/CL/Raman等多种显微技术共定位表征样品的NanoGPS技术等。

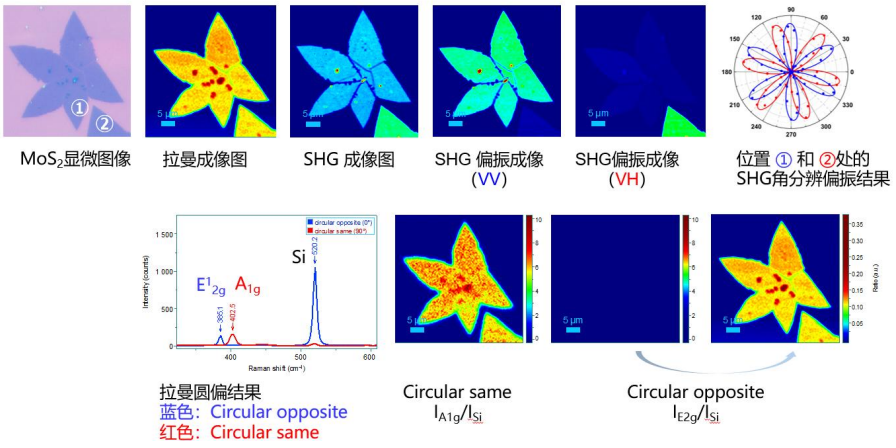


图1：拉曼-二次谐波SHG-线偏-圆偏分析结果

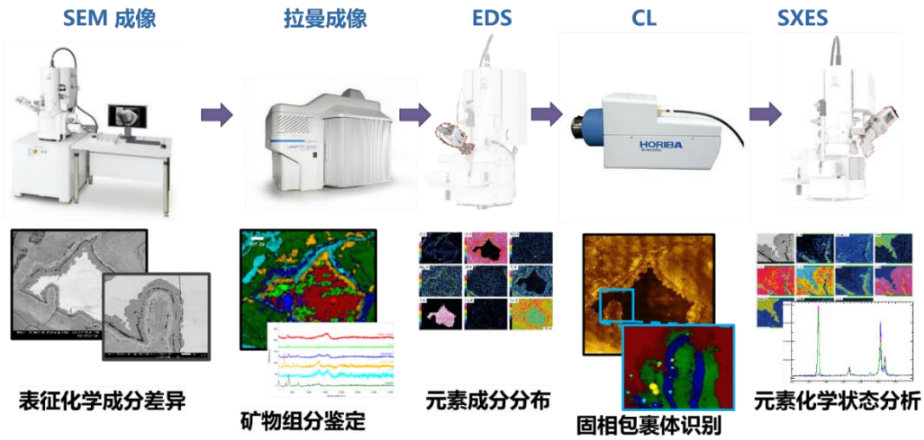


图2：NanoGPS多技术共定位表征技术

关键词：拉曼光谱；SmartSampling™ 人工智能成像技术；二次谐波；AFM-拉曼联用；NanoGPS

物理和化学协同增强的单分子拉曼检测

洪丽红，杨海遥，张简智，高子涵，李志远*

华南理工大学物理与光电学院
*邮件地址：phzyli@scut.edu.cn

单分子水平灵敏探测和传感、纳米及原子尺度显微成像、极宽带激光和光谱检测等为当前光学乃至自然科学的若干重大前沿问题。我们开发了等离激元纳腔-二维材料 SM-SERS 技术体系，通过三大核心创新突破单分子检测极限：（1）基于 WS2/金纳米颗粒复合结构的 SM-SERS 检测方案，提出库仑引力诱导分子热点自组装机制，同步调控化学增强（CME）、电磁增强（EME）与荧光抑制，实现对 RhB、R6G、CV 三种异构染料的 50 ms 快速响应、大面积均匀检测，检测灵敏度达 10^{-16} mol/L；（2）创新集成近红外泵浦匹配(785 nm)、多维增强协同、自组装调控等技术，验证了混合体系中 RhB/R6G/CV 三种分子的高可信度识别与定量分析能力。（3）设计中空金纳米颗粒等离子体纳米隙（与 785 nm 波长更匹配），成功实现 RhB、R6G、CV 三种分子通用、稳健、快速和均匀的 SM-SERS 检测，检测限度达 10^{-16}mol/L。

手性金纳米杯及其取向依赖手性光学响应

张玲玲[1,*]，吴昊[2]，陈伊琳[2,*]

[1] 西安交通大学，中国陕西省西安市咸宁西路 28 号，710049
[2] 香港中文大学，中国香港特别行政区沙田，999077

*Email: linglingzhang@xjtu.edu.cn，ylchen@phy.cuhk.edu.hk

手性等离激元纳米粒子因其强手性光学响应和广泛应用而备受关注。目前，通过系统改变螺旋形貌，对合成的手性纳米粒子进行了精密的手性光学性质研究[1]。然而，大多数手性等离激元纳米粒子仅表现出电等离激元共振模式，缺乏磁等离激元共振模式，而后者是实现强手性光学响应的关键。我们报道了一种单侧开口的新型手性纳米粒子—手性金纳米杯，该结构通过在硫化铅纳米八面体上借助手性分子诱导顶点过度生长而形成[2]。分别对金纳米杯集合体及单颗粒进行了手性消光与散射测试，发现单个手性金纳米杯的散射信号强度达到集合体消光信号的50倍。模拟结果表明：基底支撑的单个向上/向下取向手性金纳米杯的强手性光学响应源于显著增强的电磁场以及纳米杯与基底之间的耦合效应。该研究丰富了手性等离激元纳米颗粒体系，为设计具有特定手性光学特性的等离激元纳米结构提供了新思路。

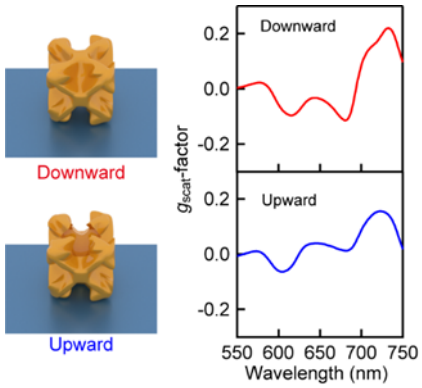


图1：手性金纳米杯的取向依赖手性响应光谱

关键词：手性金纳米杯；等离激元纳米结构；手性光学响应调控

参考文献：

[1] Zhang, L. L.; Chen Y. L.; Zheng J. P.; Lewis G. R.; Xia X. Y.; Ringe E.; Zhang W.*; Wang J. F.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202312615.

[2] Zhang, L. L.#; Wu, H.#; Huijben T. A.; Xia X. Y.; Chen Y. L.*; Wang J. F.* *Angew. Chem. Int. Ed.* (Under Review).

低温高压下固态分子氮的拉曼光谱研究

吴彬彬[1,2,*]，刘静仪[2]，陶雨[2]，雷力[2,*]

[1] 重庆理工大学机械检测技术与装备教育部工程研究中心，重庆，400054
[2] 四川大学原子与分子物理研究所，成都，610065

*Email: wubinbin@cqut.edu.cn；lei@scu.edu.cn

氮的压力-温度（*P-T*）相图丰富而复杂，但其低温和超高压相空间（*T*<300 K和60 GPa<*P*<180 GPa）在仍未被探索，导致该区域的高压相边界仍未确定，克拉珀龙斜率未知。在本工作中，我们通过使用自行设计的等温压缩拉曼光谱技术[1-2]，研究了固体氮在低温（87~300 K）和高压（0-175 GPa）下沿两种不同热力学途径（等温压缩和等压冷却）的相变。当我们在150 K以下将氮压缩到130 GPa以上时，发现了一种表现出拉曼振子涨落的扩展固态（称为μ-N_2），这可能与激子（或电子）-振子耦合有关。同时确定了固态氮三个未知的低温高压相边界（ζ-κ、κ-μ、μ-η）。我们还发现氮的离解显著改变了相图中的克拉珀龙斜率。

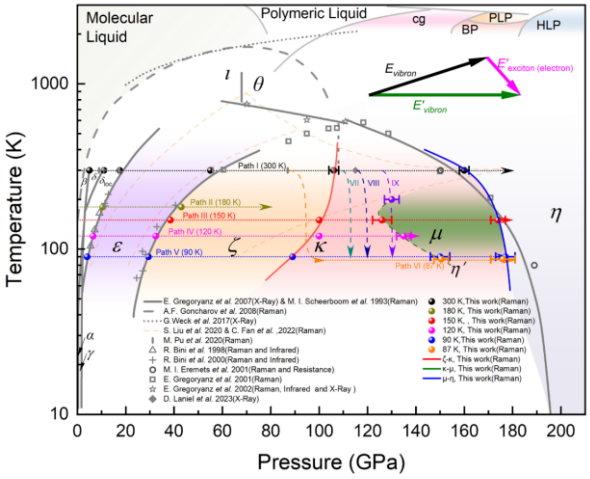


图1：固态氮的低温高压相图

关键词：低温高压；拉曼光谱；固态分子氮；相转变；解离

参考文献：

[1]. 雷力，吴彬彬.一种原位测量组装件。发明/实用新型专利(ZL202310471352.4/ZL 202320995223.0)；

[2]. Wu, B., Lei L.* et. al. *Appl. Phys. Lett.* **2025**, 126, 102103.

基金项目：

1. 国家自然科学基金(12374013; U2030107)；
2. 中央高校基本科研业务费专项资金(2020SCUNL107).

手性声子：拉曼探测与应用

张力发

南京师范大学，南京市文苑路 1 号，南京 210023

手性声子作为携带角动量的晶格激发，为声子-光子-自旋耦合开辟了新路径。本报告将系统梳理手性声子的提出与实验验证路径；聚焦拉曼探测，围绕圆偏振（RL/LR）旋光拉曼、磁场调控拉曼与偏振/角分辨拉曼，给出可操作的判据与谱线特征，并讲解拉曼张量计算与数据拟合的基本思路；同时概览若干代表性材料与结果（多来自文献与合作），并简要提及与拉曼互补的光学观测。我们还将给出实验实施要点：RL/LR 圆偏振基的校准、Stokes/anti-Stokes 与磁场奇偶性的联合判据、方位角扫描与晶向配准，以及基于有效拉曼张量的拟合流程。手性声子正成为光学表征与功能调控的国际前沿热点方向。

关键词： 手性声子， 拉曼探测

功能性半导体/贵金属界面的 SERS 研究

徐敏敏*，祁昭，张晨杰，袁亚仙，姚建林

苏州大学材料与化学化工学部，江苏省苏州市，215123

*Email: xumm@suda.edu.cn

功能性半导体/贵金属界面研究对现代电子、能源技术发展具有重要意义。通过肖特基势垒、等离激元耦合与界面缺陷工程，同步调控电荷输运、光场局域与催化活性。在能源领域，可优化该界面能提升太阳能电池光电转换效率、催化反应活性[1,2]。探索新型半导体材料与贵金属的界面特性，为开发新型界面工程技术和接触材料提供科学依据。本研究构建了金属-探针分子-钙钛矿纳米晶的“三明治”结构， 利用表面增强拉曼光谱（SERS）研究“三明治”结构的界面电荷转移现象及触发的相关界面反应。

采用高温热注入法制备了 $CsPbX_3$ 纳米材料，通过改变纳米粒子中的碘含量，调整了带隙和发射波长。利用 SERS 光谱发现，随着碘含量的增加，体系中的电荷转移程度同步增加。利用紫外光电子能谱（UPS）和紫外吸收光谱确定了材料的价带最大值（VBM）和费米能级，证实了碘掺杂后有利于电子空穴分离。使用壳层隔绝纳米粒子增强拉曼光谱（SHINERS）证实了我们提出的电荷转移途径。该研究表明了利用 SERS 和 SHINERS 研究金属-钙钛矿系统中界面电荷转移的可行性，为光电器件的设计和开发提供了新的思路。

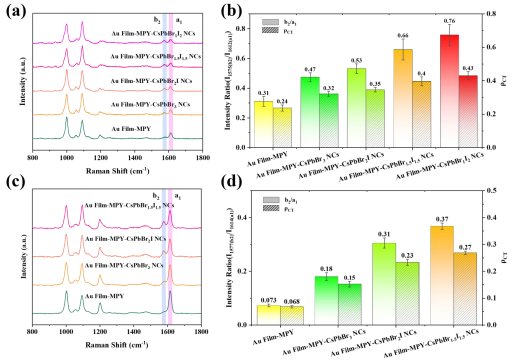


图 1. (a) 785 nm 和 (c) 638 nm 激发下获得的金膜-MPY-$CsPbBr_{3-x}I_x$ 纳米晶的 SERS 光谱；“三明治”结构中 4-MPY 在(b) 785 nm 和(d) 638 nm 激发时的强度比 ($I_{1577}(b_2)/I_{1612}(a_1)$) 及其电荷转移程度$\rho_{CT}$。

关键词： SERS；钙钛矿；界面性质；电荷转移；界面反应

参考文献：

[1] Lira-Cantú, M. *Nat. Energy* **2017**, 2 (7)..

[2] De, R.; Calvet, N. A.; Dietzek-Ivansic, B. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63 (19), e202313574.

纳米催化反应的原位增强拉曼光谱研究

张华*

厦门大学材料学院，厦门，361005

*Email: zhanghua@xmu.edu.cn

原位研究催化活性位点与表面（中间）物种的结构及其动态变化，对于深入认识催化反应机理、指导高效催化剂的设计具有重要意义。拉曼光谱是多相催化原位表征最常用的技术之一，但由于灵敏度较低，难以实现催化反应过程及痕量表面中间物种的原位监测。针对此瓶颈问题，我们发展了壳层隔绝纳米卫星结构增强拉曼光谱新方法（简称纳米卫星结构策略），通过将纳米催化剂组装于以Au为核、氧化物为壳层的纳米粒子表面，百万倍放大催化剂表面物种拉曼信号，从而实现了纳米催化剂、甚至单原子催化剂表界面催化反应过程的原位增强拉曼研究[1,2,3]。利用该纳米卫星结构策略，系统研究了FeNi氧化物表面电催化析氧反应（OER）反应过程，发现反应遵循晶格氧机制，且掺杂P能有效保持活性相β-Ni(Fe)OOH-P，加速*OH的去质子化，使其更容易通过晶格氧途径生成*OO，从而提升OER性能[4]。同时利用原位增强拉曼光谱，深入研究了水活化对CO_2电还原反应路径的调控作用，证明利用富含N-H官能团的小分子对Cu表面进行修饰，可加速水解离，生成的H物种进一步与*CO反应得到*CHO，从而促进*CHO-*CO非对称偶联为C_2产物[5]。

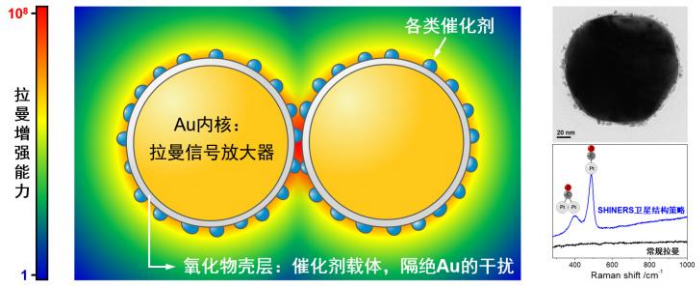


图1. 纳米卫星结构增强拉曼光谱研究表界面催化反应机理

关键词：表面增强拉曼光谱；原位表征；反应机理；构效关系；中间产物

参考文献：

[1] Zhang, H.; Wang, C.; Sun, H.-L.; Fu, G.; Chen, S.; Zhang, Y.-J.; Chen, B.-H.; Anema, J. R.; Yang, Z.-L.; Li, J.-F.; Tian, Z.-Q. *Nat. Commun.* **2017,** *8*, 15447.

[2] Wei, J.; Qin, S.-N.; Yang, J.; Ya, H.-L.; Huang, W.-H.; Zhang, H.; Hwang, B. J.; Tian, Z.-Q.; Li, J.-F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021,** *60*, 9306-9310.

[3] Wei, D.-Y.; Yue, M.-F.; Qin, S.-N.; Zhang, S.; Wu, Y.-F.; Xu, G.-Y.; Zhang, H.; Tian, Z.-Q.; Li, J.-F. *J. Am. Chem. Soc.* **2021,** *143*, 15635-15643.

[4] Qian, Z.-X.; Liang, G.-H.; Shen, L.-F.; Zhang, G.; Zheng, S.; Tian, J.-H.; Li, J.-F.; Zhang, H. *J. Am. Chem. Soc.* **2025,** *147*, 1334-1343.

[5] Du, Z.-Y.; Li, S.-B.; Liang, G.-H.; Zhang, Y.; Zhang, H.; Tian, J.-H.; Zheng, S.; Zheng, Q.-N.; Chen, Z.; Ip, W. F.; Liu, J.; Li, J.-F. *J. Am. Chem. Soc.* **2024,** *146*, 32870-32879.

光/电外场调控下表界面反应的干涉散射成像研究

黄腾翔[1,*]，张清兰[1]，吴丽雯[1]，赵芹芹[1]，陈铿[1]，张然[1]，方宁[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院，福建 厦门，361005

*Email: txhuang@xmu.edu.cn, nfang@xmu.edu.cn

干涉散射显微技术（Interferometric Scattering Microscopy, iSCAT） 是一种具备高时间与空间分辨率的无标记光学成像手段， 具有灵敏度高、 成像速度快、 实时成像等显著优势，近年来在生物物理和纳米成像领域取得了广泛应用。然而，iSCAT 技术在能源材料体系中的研究仍处于起步阶段。

在本工作中，我们通过引入部分反射片和优化图像处理方法等方法进一步iSCAT成像技术。通过iSCAT与电化学的同步表征，实现对Cu_2O催化剂在二氧化碳还原过程中表面重构行为的实时成像。不同晶面颗粒在反应过程中呈现出差异化的还原重构路径与动力学特征。此外，我们和合作者通过引入飞秒泵浦探测技术，实现飞秒干涉散射成像（Femto-iSCAT）技术[1]，可以对表界面纳米尺度载流子动力学进行成像。在此基础上，与单分子荧光成像（SMFI）[2]结合，同步表征表界面光催化过程中的纳米尺度载流子动力学和反应动力学，精准定量二者的关联，为厘清光催化表界面的构效关系提供一种有力的工具。

关键词： 表界面反应；干涉散射成像；纳米尺度；载流子动力学；反应动力学

参考文献：

[1] Lyu, P.; Li, Q.; Wu, P.; Sun, C.; Kang, B.; Chen, H.; Xu, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 13928.

[2] Huang, T.; Dong, B.; Filbrun, S.; Okmi, S.; Cheng, X.; Yang, M.; Mansour, N.; Lei, S.; Fang, N. *Sci. Adv.* **2021**, *7*, eabj4452.

The SERS Measurements on Micro-nano Interface Substrate Integrated Microfluidic Sensor

Rongke Gao

College of Control Science and Engineering, China University of Petroleum (East China), Changjiang West Road 66#, Qingdao 266580, China

*Email: rkgao@upc.edu.cn

Abstract

We present a novel integrated platform leveraging surface-enhanced Raman scattering (SERS) and micro/nano-manufacturing technologies to develop multifunctional microfluidic sensors for applications in circulating tumor cells (CTCs) detection, crude oil component separation, and environmental pollutant detection. This interdisciplinary approach combines ultra-sensitive optical detection, hierarchical nanostructure engineering, and intelligent fluidic control to address challenges in biomedical diagnostics and environmental monitoring.

1. Physical and immunoaffinity synergistic CTC isolation and single-cel phenotyping

CTCs are critical biomarkers for cancer metastasis and prognosis. To overcome the limitations of traditional microtiter plates (e.g., steric hindrance and low capture efficiency), The microfluidic sensor we developed integrated physical separation and immunoaffinity separation functional units for the rigorous inertial separations and high-throughput specificity capture of CTCs in the patient blood sample at different cancer stages, achieving in-situ heterogeneity analysis at single-cell level.

2. Crude oil component separation and on-chip SERS profiling

For petroleum industry and environmental monitoring, we designed a hydrophobic/hydrophilic hybrid microfluidic chip embedded with plasmonic nanopillar arrays. This system enables:

Phase-selective separation: Efficient partitioning of crude oil from water via capillary-driven flow and surface wettability modulation.

In-situ spectra quantification: crude oil adsorbed on Au-nanoparticle-decorated nanopillars generate fluorescence spectra, achieving a detection limit of 5 ppm.

3. Environmental pollutant detection via multifunctional SERS-microfluidics

To address emerging contaminants, we developed multiplexed SERS-microfluidic sensors with modular detection zones functionalized for heavy metals, pesticides, and microplastics:

Heavy metal ions: nano-micro hierarchical anemone-like substrates modified with ssDNA selectively capture Hg^{2+} and Pb^{2+}, with SERS signals proportional to concentration ($R^2 > 0.99$).

Pesticide residues: A rapid and highly sensitive trace analysis of paraquat (PQ) in water using a SERS-based microdroplet sensor, was estimated to be below 2×10^{-9} M.

Key Words: Microfluidics, SERS, Cancer diseases, Micro-nanofabrication, Environmental monitoring.

口头报告

SSNet: An Intelligent Spectral Unmixing Framework for Enhanced Qualitative Sensitivity of SERS to Trace Targets in Complex Mixtures

Si-heng Luo[1], Jing Xu[2], Zhong-qun Tian[3,*], Guo-kun Liu[2,*]

[1]Strait Institute of Flexible Electronics (SIFE, Future Technologies), Fujian Key Laboratory of Flexible Electronics, Fujian Normal University and Strait Laboratory of Flexible Electronics (SLoEE), Fuzhou 350117, China

[2]State Key Laboratory of Marine Environmental Science, Fujian Provincial Key Laboratory for Coastal Ecology and Environmental Studies, Center for Marine Environmental Chemistry & Toxicology, College of the Environment and Ecology, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361102, China

[3]State Key Laboratory for Physical Chemistry of Solid Surfaces, College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China

*Email: zqtian@xmu.edu.cn; guokunliu@xmu.edu.cn

Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) is a powerful tool for spectrum-structure correlation across various fields. However, the qualitative and quantitative analysis of SERS to trace targets is often compromised, due to the co-adsorption and competitive adsorption from non-targets in complex systems. To unmix and identify the SERS signal of a target within a mixture SERS spectrum, we develop SSNet, an intelligent and self-supervised algorithm. Taking the trace detection of gelsemium phytotoxin in various food samples as an example, SSNet demonstrated exceptional performance. Without any prior knowledge of the matrix, SSNet achieved SERS qualitative sensitivity comparable to that of an expert. With the knowledge of similar matrices, SSNet achieved qualitative sensitivity an order of magnitude higher than that of an expert, even when the SERS signal of the target is invisible to the naked eye. The ability of unmixing SERS signals of multiple targets is further demonstrated using the three structurally similar gelsemium phytotoxins.

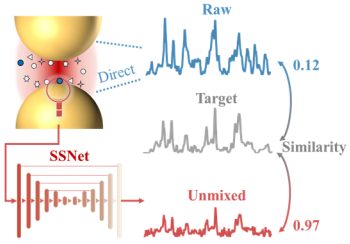


Figure 1. SSNet, a self-supervised learning algorithm designed to unmix and identify target SERS signals in complex mixtures.

Keywords: SERS, spectral unmixing, machine learning, self-supervised deep learning

SERS 基底的自下而上制备及高灵敏检测应用研究

林翔*，方国强，林爽，徐文，董斌

大连民族大学物理与材料工程学院，大连经济技术开发区辽河西路 18 号，116600

*Email: lxiang@dlnu.edu.cn

面向高灵敏定量SERS检测，基底的均一性和重现性至关重要。SERS基底可通过自上而下和自下而上两种制备策略构筑。其中自下而上技术的优点在于组装单元的尺寸和形状可以通过化学合成技术进行调控，制备不需要大型仪器设备，成本低且制备时间短。但这种SERS基底的信号均一性和批次重复性与纳米组装单元的尺寸均一性、组装致密度、排列有序性等因素密切相关。针对高灵敏度高均一性SERS基底的制备和应用，我们从（1）贵金属纳米晶的精准合成；（2）纳米颗粒单层膜的高重复性制备；（3）功能性基底的构建和实际检测应用；这三个方面着手开展了系列的工作[1-5]。我们相信这些工作能够为低成本高性能SERS基底的制备以及SERS技术的广泛推广提供技术支持和实验基础。

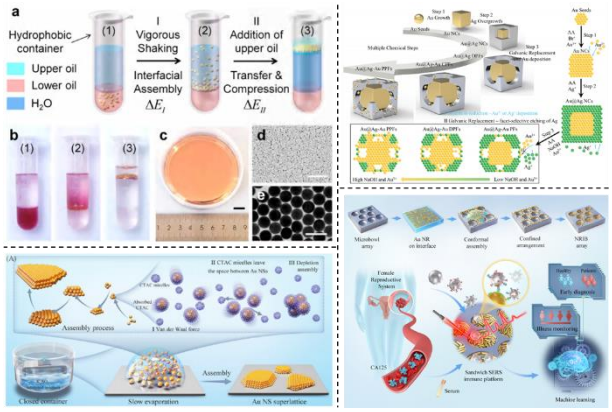


图1：自下而上SERS基底的构建策略及高灵敏检测应用

关键词：贵金属纳米晶；形貌调控；自组装；SERS基底；食品、环境及医学检测

参考文献：

[1] Lin, S.; Dong, M.; Li, C.; Lin, X.; Cong, Y.; Xu, W.; Bao, Z.; Dong, B. *Adv. Funct. Mater.* **2025**, DOI:10.1002/adfm.202509813

[2] Dong, M.; Ding, F.; Jin Y.; Li, C.; Lin, X.; Lin, S. *Anal. Chem.* **2025**, *97*, 10452.

[3] Fang, G.; Lin, X.; Wu, J.; Xu, W.; Hasi, W.; Dong, B. *Small*, **2025**, *21*, 2408670.

[4] Fang, G., Lin, X., Liang, X., Wu, J., Xu, W., Hasi, W., & Dong, B. *Small*, **2022**, *18*, 2204588.

[5]Lin, X.; Fang, G.; Liu, Y.; He, Y.; Wang, L.; Dong, B. *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11*, 3573.

高灵敏半导体气凝胶 SERS 基底材料调控及应用研究

何璇*，王子寒，马梦丹，刘伟

[1] 中国工程物理研究院化工材料研究所，四川省绵阳市游仙区绵山路 64 号，621900

*Email: xuan.hellen@caep.cn

摘要正文: 表面增强拉曼散射（SERS）技术因其高灵敏度和分子特异性检测能力，在痕量分析领域具有广阔应用前景。近年来，半导体 SERS 基底因其可调控的电子结构和优异的化学稳定性受到广泛关注。课题组通过精准调控半导体材料的缺陷态和表面化学性质，显著提升了 SERS 活性。其研究发现，氧空位缺陷的引入可有效优化 TiO_2 的能带结构，增强电荷转移（CT）效应，使 SERS 检测灵敏度提升 2-3 个数量级。进一步地，该团队发现在 TiO_2 中插入氧原子，制造负氧型 TiO_2 材料，也可获得能带结构的调控及与探针分子的电荷转移。此外，还构建了钙钛矿异质结体系，及二维材料异质结体系，利用界面耦合效应实现了电磁场增强与化学增强的协同作用，对罗丹明 B 的检测限低至 10^{-16}M. 获得了高灵敏，兼具一定稳定性及分子探测能力的半导体气凝胶 SERS 基底材料。

关键词：表面增强拉曼光谱；气凝胶；化学增强，高灵敏

参考文献：

[1] Wei Liu, Zihan Wang, Xianghu Tang, Zhongping Liu, et al, Xuan He*; Advanced Optical Materials, 2023, 5, 2300730.

[2] Zihan Wang, Ziheng Zhan, Yi Liu, et al, Xuan He*; Sensors and Actuators B: Chemical, 2025, 137846.

[3] Wei Liu, Zihan Wang, Zhongping Liu, et al, Xuan He*; ACS sensor, 2023,8,1733.

[4] Zihan Wang, Wei Liu, Jie Wamg, et al, Xuan He*;Sensors and Actuators B: Chemical, 2024, 401, 134934.

[5] Wei Liu, Zihan Wang, Wenqian Yan, et al, Xuan He*; Carbon, 2023, 202, 389.

细胞活性小分子表面增强拉曼散射分析新方法

余俊杰[1]，奚成业[1]，黄锦灏[1]，李大伟[1,*]

[1] 华东理工大学化学与分子工程学院，上海市梅陇路 130 号，200237

*Email: daweili@ecust.edu.cn

生物体内存在种类繁多的活性氧（ROS）、活性氮（RNS）、活性硫（RSS）等活性小分子物种，与细胞凋亡以及癌症、心血管疾病、神经退行性疾病等生理、病理过程有着十分密切的关系。因此，研发高精准的高精准生物活性小分子方法，对于相关疾病的早期临床诊断、病理过程揭示等具有重要的研究价值和现实意义[1-2]。表面增强拉曼散射（SERS）光谱技术具有灵敏度高、定性能力强、检测速度快、水干扰小等独特优势，基于SERS的分析检测方法是当前分析传感领域科学研究的前沿热点之一。然而，对于拉曼散射截面小、与贵金属亲和力低的生物活性小分子或无机离子，SERS往往难以实现其直接检测；同时由于贵金属基底的SERS活性在复杂体系中易受干扰，使信号的稳定性、重现性受到挑战。 基于此，本论文以ROS等生物活性小分子及其生化过程为研究对象，利用金属或共价有机框架（MOFs、COFs）孔隙率高、尺寸选择性强及表面活性位点丰富等优点，将其与响应分子修饰的贵金属纳米结构结合，构建一系列MOFs或COFs隔离的SERS纳米探针；进而结合SERS能够提供分子特征图谱，响应速度快等优势建立分析方法，实现细胞活性小分子的检测或生化过程监测，为细胞活性小分子精准分析和探索相关生理病理机制提供技术支持。

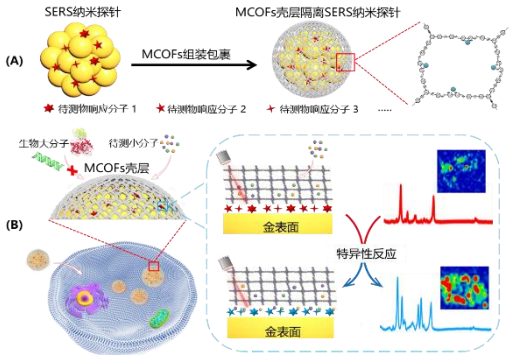


图1：有机框架壳层隔离的SERS纳米探针及其高精准原位检测细胞内活性小分子示意图

关键词：表面增强拉曼散射；纳米探针；有机框架壳层；活性小分子；高精准检测

参考文献：

[1] Finkel, T.; Holbrook, N.J. *Science*, **2015**, *347*, 125.

[2] Powers, S.K.; Jackson, M.J. *Physiol. Rev.*, **2008**, 88, 1243.

$C_5F_{10}O$ 放电分解产物光纤增强拉曼光谱动态高灵敏在线检测技术

万福，孙思蔚，武泳琪，孙宏程，张峻彬，朱磊，吴昊源，陈博文，游俊铨，孔维平，陈伟根

摘要：$C_5F_{10}O$ 作为低温室效应潜能的新型环保绝缘气体，具有优异的绝缘特性，但在局部放电条件下易分解生成副产物，影响电力设备绝缘性能。通过检测其放电分解产物的成分和含量，可有效分析设备运行状态，从而保障电网运行安全。针对传统检测方法常见的易老化，需要定期维护等问题，本文提出了一种混合噪声抑制光纤增强拉曼光谱（FERS）系统，可有效降低光纤硅噪声，实现系统信噪比提升 4.78 倍，CF_4 与 CO_2 的检测限达 1.22 和 1.26ppm 。通过密度泛函理论（DFT）计算结合实验数据分析，构建了 $C_5F_{10}O$ 及其主要分解产物的拉曼特征峰数据库。通过为期五天的动态监测实验，展示了分解气体生成趋势及浓度变化规律。该研究提升了 FERS 在痕量环保气体检测中的应用能力，也为气体绝缘设备状态评估和低碳电力系统智能运维提供了可行的技术方案，为实现电网安全供电和绿色低碳转型赋能。

关键词： $C_5F_{10}O$; 气体绝缘设备; 放电分解产物; 光纤增强拉曼光谱; 气体分析

MoS_2/WS_2 异质结局域谷极化效应的超空间分辨针尖增强圆偏振光致发光光谱研究

苏伟涛 [1*]，程彦霖 [1,]

[1] 杭州电子科技大学，杭州，浙江省，310018

*Email:suweitao@hdu.edu.cn

过渡金属二硫属化物（TMDs）的谷极化现象在下一代谷电子器件的发展中起着关键作用。在纳米尺度上研究谷极化的空间分布对于理解器件性能的局部非均匀性至关重要，但却对传统光学成像技术的空间分辨率提出挑战。在本研究中，我们对传统针尖增强光致发光光谱（TEPL）技术进行改进，成功实现了针尖增强圆偏振光致发光（TECPPL）成像，能够同时以纳米级空间分辨率对激子发光强度和谷极化进行成像。利用 TECPPL，我们研究了单层 MoS_2/WS_2 异质结，并观察到在 $\sigma^+\sigma^+$ 和 $\sigma^+\sigma^-$ 极化配置下均存在显著的近场光致发光（PL）增强，实现了 0.67 的近场圆偏振度（Pc），比远场测量值高出四倍。这种高局部信号增强使得能够直接对异质结上 PL 强度和 Pc 的空间变化进行成像，空间分辨率约为 20 纳米。我们的研究结果表明 TECPPL 作为新兴的纳米光谱工具，可用于探测二维材料中的谷选择性光学响应，并为 TMD 异质结构的空间分辨谷电子学行为提供了新的见解。

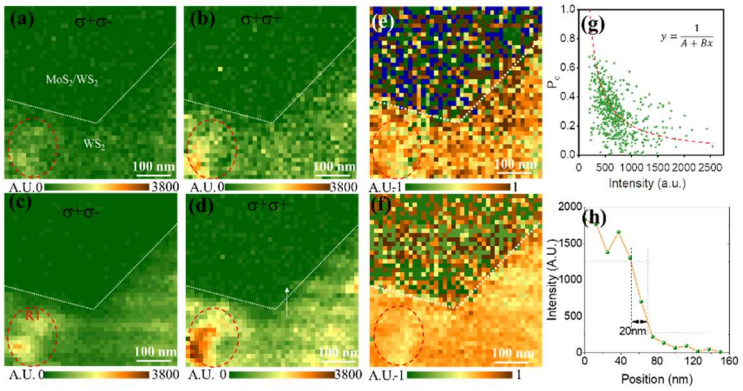


图1： MoS_2/WS_2异质结区域在 $\sigma^+\sigma^-$（a、c）和 $\sigma^+\sigma^+$（b、d）激发/检测配置下获取的 A^0（a、b）和 A^-（c、d）激子带的 TECPPL 强度图的放大图。所有图像均以 40×40 像素记录，步长为 12.5 纳米，每个像素的积分时间为 1 秒。（e、f）分别为 A^0 和 A^- 激子的圆偏度（Pc）图。（g）在 $\sigma^+\sigma^-$ 配置下测量的光致发光强度与 Pc 的相关性。（h）通过图 (d) 中箭头所示线的强度分布来确定 TECPPL 成像的空间分辨率。

关键词： 针尖增强圆偏振光致发光光谱成像；MoS_2/WS_2异质结；局域谷极化成像

参考文献：

[1] Shao, J.; Chen, F.; Su, Weitao et al.;. J. Phys. Chem. Lett.. **2022**, *13(14)*, 3304.

[2] Shao, J.; Chen, F.; Su, Weitao. ACS APPL. MATER. INTERF., **2021**, 13(17), 20361.

胶体刻蚀法制备高度均匀、灵敏的石墨烯混合型 SERS 衬底

武和平[1]，张杰[1]，赵立波[2]，赵钢[3]，任巍[1,2]，牛刚[1,2,*]

[1] 电子陶瓷与器件教育部重点实验室，西安交通大学，陕西 西安 710049
[2] 机械制造系统工程国家重点实验室，西安交通大学，陕西 西安 710049
[3] 西北大学医学院，陕西 西安 710069

*Email: gangniu@xjtu.edu.cn

得益于各种先进微纳结构衬底的快速发展，表面增强拉曼光谱（SERS）技术在各种检测领域中展现强大的应用潜力。石墨烯-金纳米金字塔（GAuNP）衬底是一种具有高灵敏度的SERS平台，能够通过胶体刻蚀技术实现低成本制备。但目前对该衬底的微纳加工工艺研究还不充分，进而限制了纳米金字塔尺寸对SERS增强特性影响的研究。本研究对制备GAuNP衬底的胶体刻蚀和微纳加工的关键工艺进行了细致的研究与优化。引入Langmuir膜法制备了多种尺寸聚苯乙烯（PS）微球二维胶体晶体，覆盖率最高达到了98.2%。相较于去胶机和反应离子刻蚀方法，电感耦合等离子体技术刻蚀后PS微球的立体性更好。蒸镀方法由于更好的方向性而适合制备图案化的金属掩膜。制备的三种尺寸GAuNP SERS衬底均具有优异的结构和光谱均匀性，纳米金字塔尺寸的相对标准偏差低至1.8%，平均信号相对标准偏差（RSD）为9.1%。纳米金子塔覆盖率较同类研究提升4.5倍。时域有限差分（FDTD）仿真和实验结果显示衬底的分析增强因子达1.6×10^{10}，其中石墨烯提供了19倍的增强因子。衬底对结晶紫（CV）、5-氟尿嘧啶（5-FU）和Aβ40的检出限分别达到10^{-13} M、10^{-10} M和10^{-14} M。无监督学习方法实现了不同物质SERS光谱的高灵敏度（100%）和特异性（98.1%）的分类。本研究提出的方法，为纳米阵列型SERS衬底的制备和应用铺平了道路，并将推动SERS在临床细胞学诊断、化学品监测以及环境监测等方面的应用。

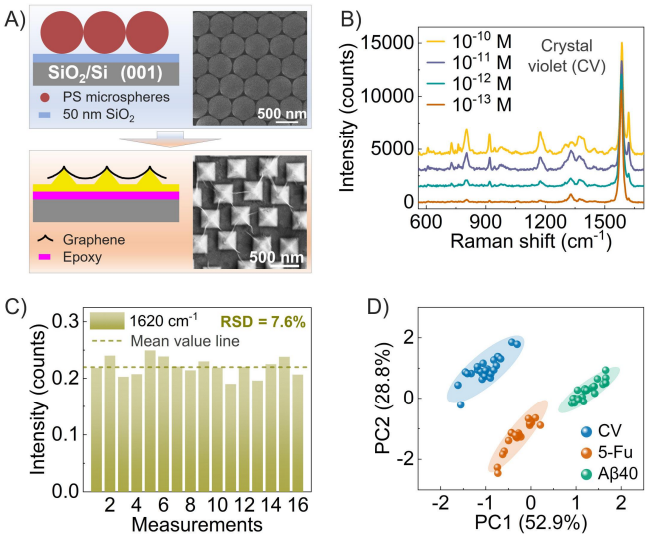


图 1：A)制备工艺示意图；B) 结晶紫检测结果；C) 光谱均匀性；D) 不同分子 SERS 光谱的无监督学习聚类结果。

关键词：胶体刻蚀；表面增强拉曼光谱；石墨烯；机器学习；生物传感

参考文献：

[1] Wu, H.; Niu, G.; Ren, W., et al. *Sens. Actuator B Chem.* **2022**, *354*, 131205.
[2] Wu, H.; Niu, G.; Ren, W., et al. *ACS Appl. Nano Mater.* **2024**, 7 (8), 9167.

结合多谱学揭示等离激元增强半导体光催化电荷转移路径

杨晶亮[1]，杜红浪[1]，杨晶亮[1,*]

[1]贵州大学物理学院，贵阳市花溪区，555000

*Email: yangjl@gzu.edu.cn

摘要正文等离激元增强半导体光催化反应因其能够显著扩宽半导体光吸收范围以及提升半导体光吸收效率而受到人们的广泛关注。然而，当等离激元产生的热载流子和半导体的光生载流子被同时激发时，电荷转移方向仍不清晰。此外，半导体自身缺陷对等离激元增强半导体光催化的作用仍不明确。为此，我们以Au@CdS作为模型催化剂，结合瞬态吸收光谱和原位拉曼光谱技术研究等离激元增强半导体光催化机理，并结合密度泛函理论计算帮助我们加深对等离激元增强机理的认识。

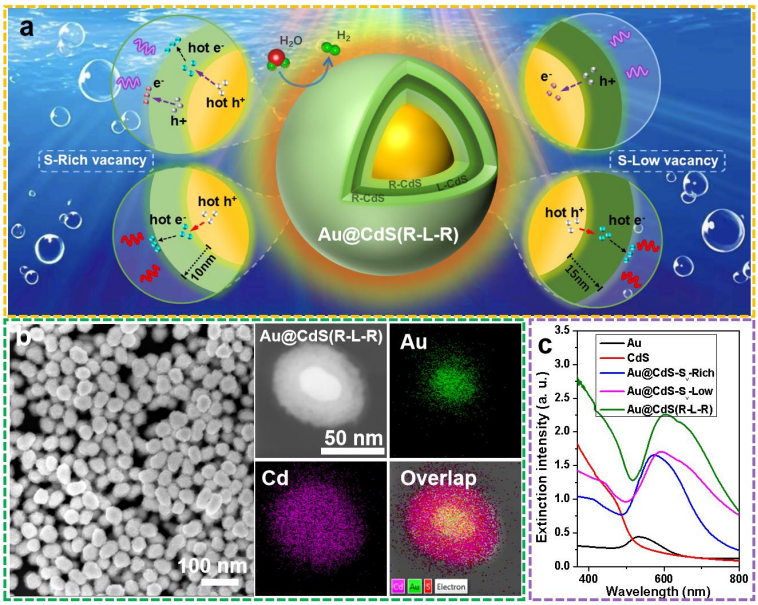


图1：Au@CdS (R-L-R)三明治纳米结构示意图其其SEM表征和紫外可见吸收光谱数据

关键词： Au@CdS；瞬态吸收光谱；原位拉曼光谱；等离激元；电荷转移

参考文献：

[1] **Yang, J. L.***; et al. *Adv. Mater.* **2025**, *37*, 2501091.

[2] **Yang, J. L.;** Hong, J. W.; Zhang, H.; Li, J. F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e2021112749.

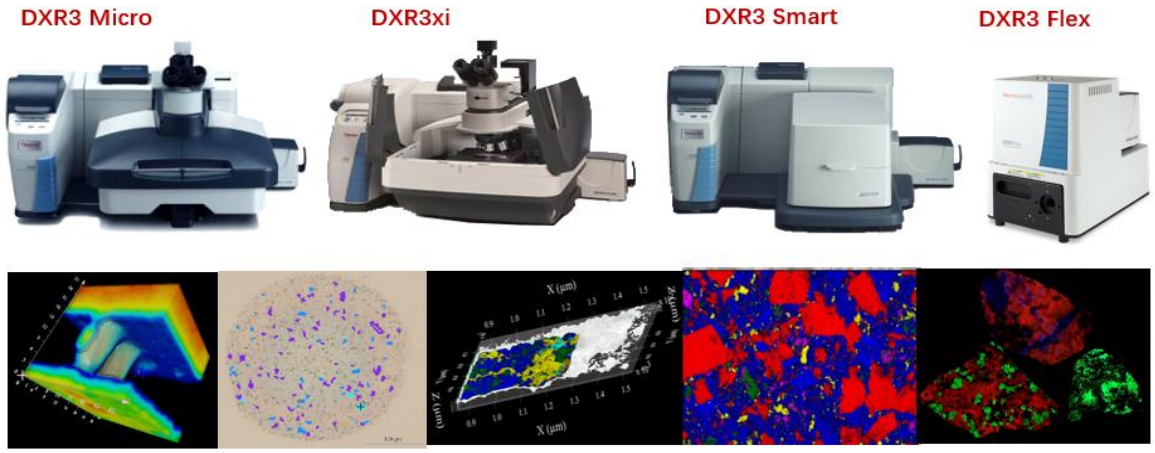
赛默飞拉曼光谱新技术及应用介绍

吕歆玥
赛默飞世尔科技
Email：ivy.lv@thermofisher.com

Thermo Scientific™ DXR 系列显微拉曼成像光谱仪引领了新一代显微拉曼化学成像分析技术。凭借可视化超快速图像采集、实时同步优化的成像数据处理系统、智能化特征识别与多组分自动分离鉴别等强大功能，为科学研究领域的拉曼光谱分析开拓了新的解决方案，适用于材料科学、化学化工、生命科学等多个领域。

仪器依托可视化驱动成像技术实现超快化学成像，结合针孔式共聚焦设计，达成微米至亚微米级分辨率的拉曼表征，精准捕捉微区化学信息，实现细节化微区鉴别。搭载实时同步优化的成像数据处理系统，集成智能化特征识别与多组分自动鉴别功能，构建从参数调节到数据分析的全流程自动化、智能化操作体系，可针对高端科学研究需求定制专属检测方案。此外，采用高度灵活的模块化设计，不仅能与光镊、积分球等配件联用开展多模态测试，有效提升微小样品与低浓度样品的检测灵敏度，还可与红外光谱仪、流变仪、XPS 及电镜等跨技术平台仪器联用，拓展多维度表征能力。

赛默飞 DXR 系列显微拉曼成像光谱仪已在高校科研、工业和政府等领域形成成熟应用，为高新材料表征、微区化学成像、复杂体系组分分析和低含量物质检测等关键科学问题提供可靠技术支撑，其跨平台联用潜力更有望推动光散射技术与多学科研究的深度融合，助力前沿科学探索突破技术瓶颈。



关键词：显微共聚焦、拉曼成像、多功能、多维度

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

基于自旋极化电荷转移调控的 SERS 对映体识别策略

王月*，张紫怡，贾璐路

东北大学，辽宁省沈阳市和平区文化路 3 号巷 11 号，110819

*Email: yuewang@mail.neu.edu.cn

手性识别对于揭示生命起源、了解蛋白质结构和功能、药物研发等都具有重要的意义。[1, 2] 目前常见的识别方法主要是通过手性选择剂与不同对映体之间立体作用的结合常数不同，从而产生可区分的识别信号，如光学信号、电学信号、光谱信号等，进而实现对对映体的选择性识别。[3] 然而，这些方法需要构建特异的手性识别选择剂，导致方法的普适性相对较差，很大程度上限制了它们在手性识别领域的应用。发展基于手性分子自身结构特性的手性识别方法，不需借助复杂且定制化的识别选择剂，可实现针对于多种不同手性分子的高普适性的手性识别。本文将电荷转移诱导的表面增强拉曼散射光谱（SERS）增强机理与手性诱导自旋选择性理论相结合，通过研究自旋选择性与体系电荷转移之间的关联关系，提出了一种基于自旋极化电荷转移调控的SERS对映体选择性识别策略。通过对手性识别体系的自旋极化电荷转移的调控，控制手性分子识别体系的自旋取向，进而实现体系对对映体选择性的精确调控。这种选择性通过差异化的SERS光谱信号的相对光谱强度表现出来，从而构建了自旋极化电荷转移调控的对映体选择性识别方法。通过比较这些手性分子的固有手性特征，总结出基于自旋极化电荷转移的对映体选择性与分子固有手性之间存在一定的正相关关系，即：相较于脂肪族手性分子，基于自旋极化电荷转移调控的SERS对映体识别方法在芳香族手性分子中表现出更显著的对映体选择性。该识别方法可应用于对多种芳香族与脂肪族手性小分子的对映体识别中，即使对分子固有手性较弱的脂肪族手性分子也具有突出的识别表现，由此证明了所提出的对映体识别方法的普适性。

关键词： 对映体识别；自旋极化；电荷转移；SERS光谱

参考文献：

[1] Brandt, J. R.; Salerno, F.; Fuchter, M. J. *Nat. Rev.Chem.* **2017**, *1*, 0045.

[2] Ma, B.; Bianco, A. Nat. Rev.Mater. **2023**, *8*, 403-413.

[3] Scriba, G. K. E. *J Chromatogr. A* **2016**, *1467*, 56-78.

SERS 探针在创伤检测与治疗评估中的应用

王锐*，邓晗彬，张点奇，张伟，于法标*

海南医科大学急救与创伤研究教育部重点实验室，海口，571199

*Email: wangrui@muhn.edu.cn, yufabiao@muhn.edu.cn

细菌性伤口感染，尤其是由大肠杆菌和铜绿假单胞菌引起的感染，由于生物膜形成、多重耐药性和慢性炎症而难以治疗。本文，我们报道了一种基于表面增强拉曼散射 (SERS) 探针的多功能纳米平台，该平台可同时进行光动力疗法、抗生素输送和实时感染监测。该探针由涂覆普鲁士蓝的金纳米粒子组成，普鲁士蓝在光谱静默区既可作为近红外光敏剂，又可作为拉曼报告子，此外还负载硫酸粘菌素，并用牛血清白蛋白进行稳定。在 650 nm 激光照射下，该探针会产生活性氧，并与抗生素释放相结合，在显著减少抗生素剂量的情况下，实现对革兰氏阴性菌的协同清除（减少 90% 以上）。静默区的 SERS 信号可在治疗过程中实现无背景、原位识别和定量细菌负荷。在正常和糖尿病小鼠伤口模型中，该探针均能加速细菌清除，促进M2巨噬细胞极化，并促进血管生成和胶原沉积，从而改善伤口愈合。对36个临床伤口样本的分析表明，该探针对革兰氏阳性菌和革兰氏阴性菌的鉴定灵敏度高且特异性强（AUC = 0.94）。该方法为精准感染管理、实时监测和增强伤口修复建立了一种可临床转化的策略。

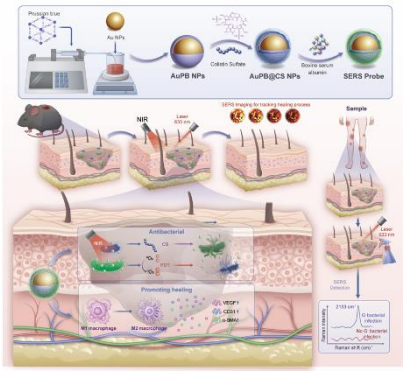


图1：静默区SERS探针的制备及其基于光动力疗法和抗生素的协同治疗示意图，静默区SERS成像的特征峰位于2133 cm^{-1}处，用于追踪愈合过程。

关键词：静默区表面增强拉曼光谱；光动力-抗生素协同作用；伤口感染；复发预防；实时监测

参考文献：

[1] Zhang, W.; Wang, S.; Xing, Y.; Luo, X.; Wang, R.; Yu, F. *Acta Biomater.* **2025**, *197*, 431.

[2] Chen, H.; Lin, S.; Zhang, D.; Xing, Y.; Yu, F.; Wang, R. *Chem. Eng. J.* **2023**, *470*, 144024.

二维 MXenes 基 SERS 材料的制备及其应用

刘鑫[1*]，党阿磊[2*]

[1] 太原理工大学人工智能学院，山西省太原市迎泽西大街 79 号，030024
[2] 西北工业大学材料学院，陕西省西安市友谊西路 127 号，710072

*Email: liuxin02@tyut.edu.cn; dangalei@nwpu.edu.cn

摘要正文：表面增强拉曼散射（Surface-enhanced Raman Scattering, SERS）作为一种快速、灵敏、无损的指纹光谱检测技术，自1974年发现以来便引起了国内外的广泛关注。二维过渡金属碳/氮化物（MXenes）因其零带隙半金属特性、高的电子态密度和出色的生物相容性等优点成为了SERS的优异候选材料之一。尽管基于MXenes基底材料的SERS技术极具应用潜力，但其仍普遍存在稳定性差、信号波动、高成本等问题，同时其胶体形态也难以满足各类复杂的实际检测需求。为此，论文从微观调控和宏观组装两方面出发，通过过渡金属（M）元素调节、缺陷控制、稀土原子掺杂和可控氧化等手段，解决了MXenes基SERS基底灵敏度低、稳定性差的问题，揭示了MXenes中的SERS增强机制及提升机理。随后，通过湿法纺丝、真空辅助抽滤等方法，将MXenes组装为宏观纤维和薄膜材料，开发出了具有良好柔韧性、高灵敏度、高稳定性、高可靠性的柔性MXenes基SERS基底。此外，还深刻理解并总结了背后的SERS机制及材料学原理，为克服传统SERS基底的固有局限性提出可行方案，以期推动MXenes材料迈向通用、灵敏、稳定和可集成的SERS平台。

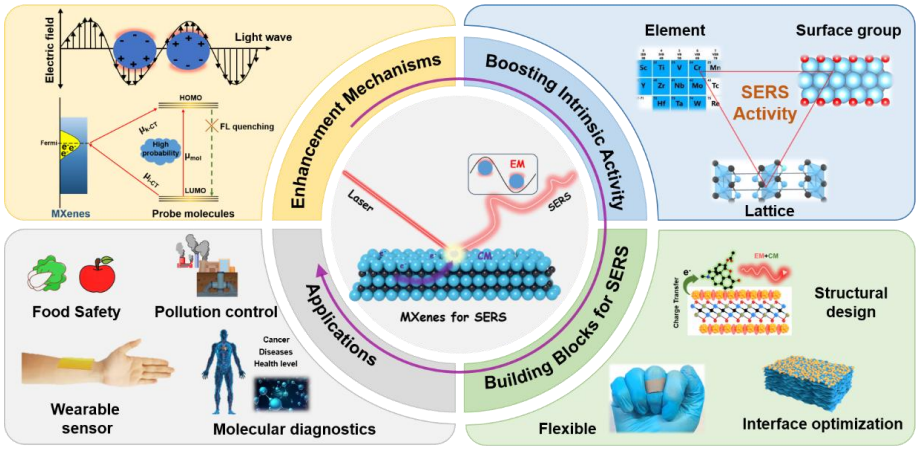


图1：作为 SERS 基底的 MXenes材料概述：增强机制、性能提升方法、基底构建策略和应用。

关键词：表面增强拉曼散射；二维材料；柔性基底；电荷转移机制

参考文献：

[1] Liu, X.; Dang, A.; Li, T., et al. *ACS Sensors*, **2023**, 8 (3), 1287-1298.
[2] Liu, X.; Dang, A.; Li, T., et al. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2023**, 390, 133888.
[3] Liu, X.; Li, T.; Han, Y., et al. *Applied Surface Science*, **2024**, 654, 159513.
[4] Liu, X.; Li, T.; Lee, T.-C., et al. *ACS Sensors,* **2024**, 9 (1), 483-493.
[5] Liu, X.; Dang, A.; Li, T., et al. *Biosensors and Bioelectronics*, **2023**, 237, 115531.

基于多任务学习与可解释堆叠模型的肿瘤标志物定量 SERS 分析

董荣录[1]，吴博宇[1,2]，陈家维[1,2]，杨良保[1,*]

[1] 中国科学院合肥物理科学研究所核能安全技术研究所，合肥 230031
[2] 中国科学技术大学，合肥 230026

*Email: lbyang@iim.ac.cn

血清肿瘤生物标志物是反映肿瘤形成与演化的关键分子指标，其定量分析对于癌症的早期筛查至关重要。无标记表面增强拉曼光谱（SERS）作为一种高灵敏度的分析技术，能够提供包括肿瘤生物标志物在内的多种分子指纹谱[1]。然而，血清的复杂基质往往会掩盖低丰度标志物的光谱特征，导致其检测及定量面临挑战。为此，我们结合人工智能技术提出了以下两种创新方法：一是注意力尺度融合网络（ASFN）[2]。如图一所示，模型采用多尺度双分支卷积架构并集成Transformer模块，实现自适应特征融合与任务先验转移，从而显著提升模型鲁棒性，在血清样品中实现了100%分类准确率和0.9713的加权R^2。二是可解释的堆叠集成模型（ISEM）。如图二所示，模型通过ElasticNet元学习器集成SVR、XGBoost和PLSR的优势，在定量分析12种临床血清肿瘤生物标志物时表现出优于单一模型的预测性能（R^2>0.9，RPD>3.2），并借助SHAP算法实现结合分子结构与光谱的可解释性分析，揭示基质干扰、糖基化修饰及光谱峰重叠对预测的影响。本工作成功解决了肿瘤标志物定量分析中光谱复杂性与血清基质干扰的问题，通过模型为定量预测结果提供了可解释性分析，为复杂体系的多任务分析和癌症早期筛查提供了新的技术路径。

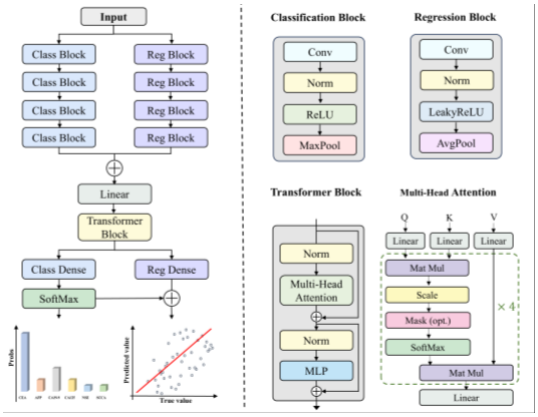


图1：ASFN的架构及分类回归分支、Transformer模块

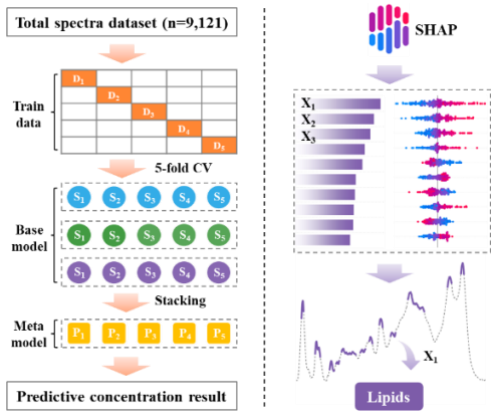


图2：ISEM的架构及模型可解释性分析模块

关键词：血清肿瘤标志物；拉曼光谱；深度学习；定性定量分析

参考文献：

[1] Bi, X.; Ai, X.; Wu, Z.; Lin, L. L.; Chen, Z.; Ye, J. *Anal. Chem.* **2025**, *97 (13)*, 6826-6846.
[2] Chen, J. W.; Wu, B. Y.; Huang, Y. H.; Wu, Y. H.; Weng, S. Z.; Hong, Y.; Deng, Q. M.; Dong, R. L.; Yang, L. B. *Anal. Chem.* **2025**, *97 (33)*, 18217-18226.

一种用于快速选择性检测饮用水中次氯酸根的磁性纳米颗粒 SERS 传感器

王 柳[1]，王明利[1,*]

[1] 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室，河北省微观结构材料物理重点实验室，燕山大学理学院，秦皇岛，066004

*Email: wml@ysu.edu.cn

本文提出了一种选择性传感策略，用于测定饮用水中的残留次氯酸根（ClO^-）。该策略采用Fe_3O_4@SiO_2@Ag 磁性纳米粒子作为基底，4-羟基苯硫酚作为信号分子，通过4-羟基苯硫酚被ClO^-氧化后在银基底表面的信号消失现象实现对ClO^-的定量检测。磁性纳米粒子可在磁场作用下携带待测物从样品中实现分离富集，随后在有银膜覆盖磁性基底表面沉积并用于SERS检测。该基底展现出高灵敏度，以罗丹明 B计算的增强因子达 1.89×10^5，对 ClO^-的检测限低至 0.0125 mg/L。该基底同时具备良好的均匀性、重现性和选择性。实际饮用水样品中良好的回收率检测结果表明，此检测策略在食品安全领域具有应用潜力。

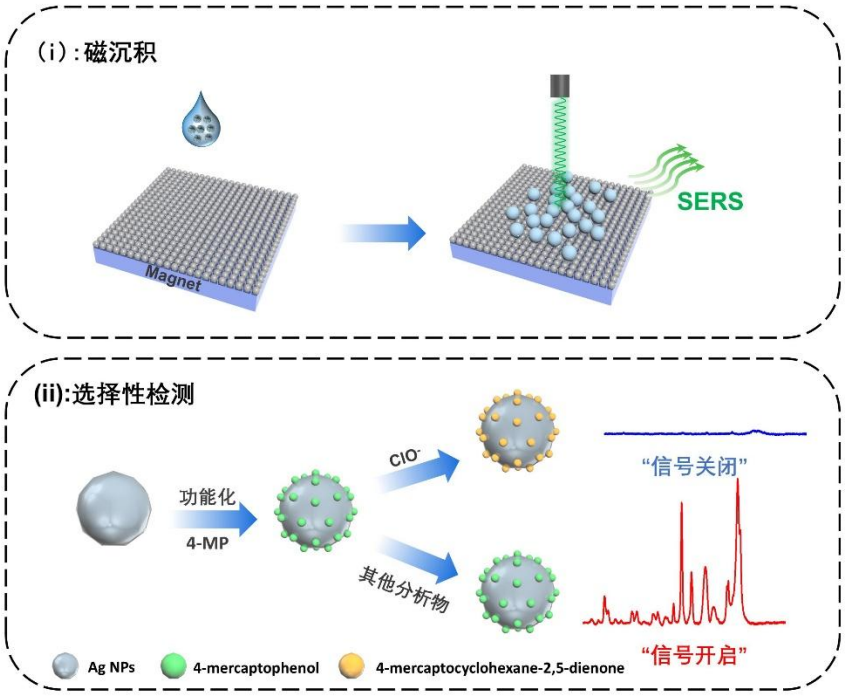


图1：磁自组装与选择性检测的示意图

关键词：表面增强拉曼散射，选择性检测，次氯酸根，4-羟基苯硫酚，磁性材料

如何为您的拉曼实验选择最佳激光器？

蒋泽群 Oliver Jiang[1]

[1] 北京鼎信优威光子科技有限公司

*Email: oliver-jiang@dyna-sense.com

做拉曼实验需要考虑哪些激光指标？哪种激光器最适合拉曼光谱的研究？北京鼎信优威光子科技有限公司独家代理的HÜBNER Photonics公司的C-WAVE超宽波段连续可调谐窄线宽激光器以及HÜBNER Photonics旗下的Cobolt窄线宽固体单波长激光器和C-FLEX多波长激光器，非常适用于拉曼光谱的研究。

Cobolt 05-01 系列激光器是连续波二极管泵浦激光器 (DPL)，固定工作波长分布在320 nm 至 1064 nm。单频工作模式可提供超窄光谱线宽、长相干长度和卓越的光谱纯度。这些激光器的设计和制造均采用其专利技术HTCure高温固化技术，确保了其高可靠性。C-WAVE是一款可调谐激光光源，用于在可见光和近红外波长范围内发射连续波 (cw)。其技术基于光学参量振荡 (OPO)，并完全由计算机控制。因此，它允许您从蓝光调谐到红光，甚至调谐到近红外，而无需更换染料或光学元件。这使得 C-WAVE 成为一款灵活且用户友好的激光器，适合您的拉曼光谱应用。

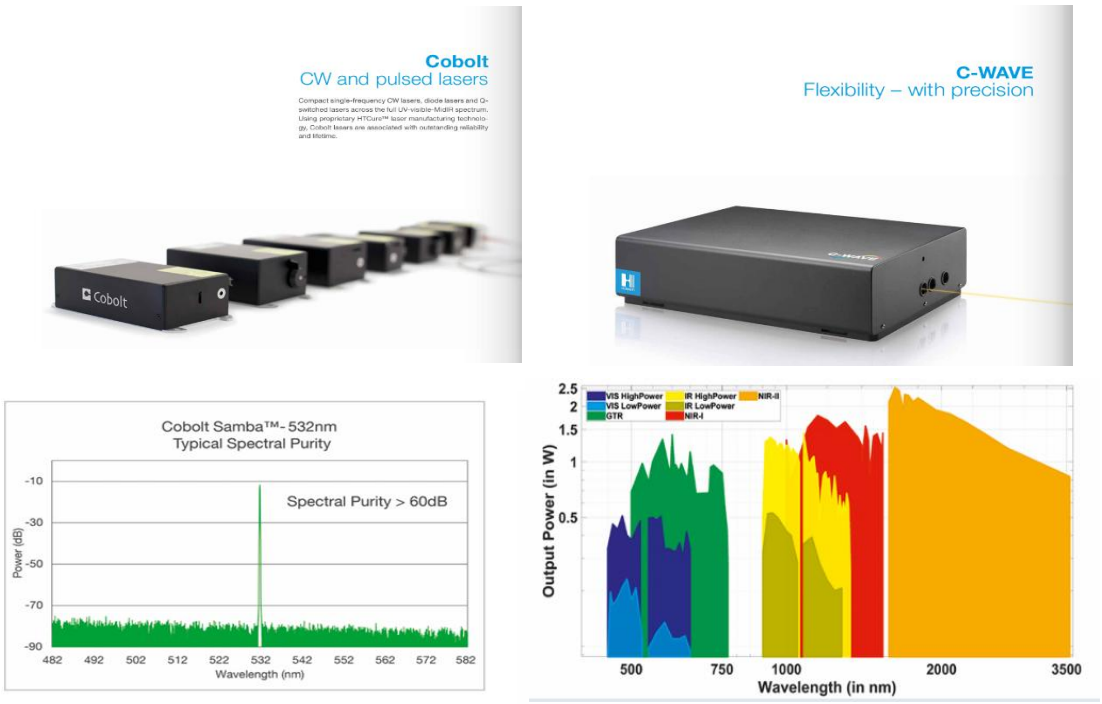


Fig.1：激光器分类

关键词：拉曼激光器；高稳定性窄线宽激光；共振拉曼；SERS ；TERS；

手性等离激元结构的精准合成及其在拉曼光谱和光学中的应用

田雨 [1,*]，牛文新 [1]

[1] 中国科学院长春应用化学研究所，长春，中国，130022

*Email: tianyu@ciac.ac.cn

手性结构的典型特征是无法通过平移和旋转与其镜像重合。大量研究表明，具有手性形貌的等离激元结构在面对不同手性的圆偏振光时，展现出明显的消光差异，这为纳米光子学研究提供了崭新的机遇。然而，手性等离激元结构的不对称因子（g-factor）远未达到理论预测的极限，其形貌也有待进一步丰富；手性光学性质的产生机理尚未明确，无法针对应用场景有效调控材料合成策略；应用性能有待提升，潜在的应用领域仍有待挖掘。我们从材料合成、手性光学性质、实际应用三个方面对手性金纳米晶进行了系统性的研究。在材料合成方面，精准合成了尺寸均匀，螺旋结构清晰的手性Au纳米晶[1]。并通过手性Au核与Cu_2O壳的介电耦合作用在近红外区实现了g-factor=0.35的强光学手性[2]。在手性光学性质方面，通过理论模拟阐明了基于表面增强拉曼散射的手性分子鉴别原理[1]，探究了手性Cu_2O壳增强手性光学响应的原因[2]和旋光性的作用原理[3]。在实际应用方面，提升了手性等离激元结构在手性鉴别中的稳定性[1]，并拓展了手性材料在信息加密中的应用[3]。这些进展将促进手性等离激元领域的快速发展，为材料合成、性质与应用提供研究新范式。

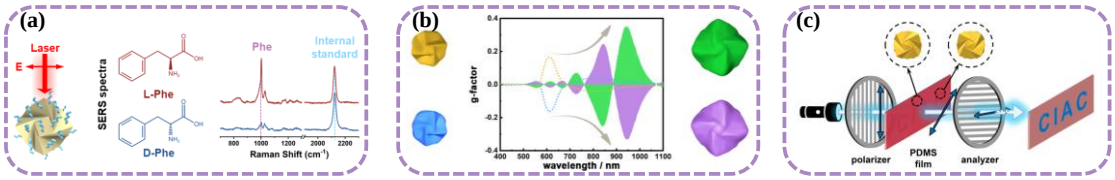


图1：(a)基于表面增强拉曼散射鉴别分子的手性。(b)介电耦合作用调控手性光学性质。(c)基于旋光性的信息加密技术。

关键词：手性等离激元；金纳米晶；精准合成；表面增强拉曼散射；信息加密

参考文献：

[1] Y. Tian, F. Wu, X. Lv, X. Luan, F. Li, G. Xu, W. Niu, *Adv. Mater.* **2024**, *36*, 2403373.

[2] X. Lv,[a] Y. Tian,[a] F. Wu, X. Luan, F. Li, Z. Shen, G. Xu, K. Liu, W. Niu, *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 9234.

[3] Y. Tian, X. Luan, X. Lv, F. Wu, G. Xu, W. Niu, *Nanoscale* **2025**, *17*, 1119.

单层二维材料厚度下热载流子传输距离及其诱导光催化反应的原位拉曼光谱研究

汪弘嘉[1]，张华[1,*]，李剑锋[1,*]

[1] 厦门大学材料学院，能源学院，厦门，361005

*Email: zhanghua@xmu.edu.cn, Li@xmu.edu.cn

摘要正文：等离激元金属纳米结构在光照下会由于表面等离激元共振效应产生高能热载流子，因其对光催化反应的活性和选择性产生显著影响而备受学者们的关注。然而由其效应导致的局域电磁场增强现象会在几个纳米的范围内显著消失，使得热载流子诱导光催化反应性能明显降低。因此亟需开发具有高空间分辨率的原位热载流子传输距离测量及反应机理表征方法，为等离激元光催化材料精准设计和光催化反应性能定向调控提供理论指导。

有鉴于此，在课题组前期“分子尺”策略启发下[1]，本研究以单层二维材料为“尺”，借助表面增强拉曼光谱，在亚纳米精度下测量等离激元热载流子传输距离并调控光催化反应性能。如下图所示，以4-硝基苯硫酚还原偶联为探针反应，探究嵌入石墨烯层数对这一热电子驱动反应效率的影响，从而在单层石墨烯（厚度~0.35 nm）精度下对热电子传输距离进行测量。实验结果表明，热电子转移反应效率随着石墨烯层数增加而逐渐减少，且五层石墨烯时反应被完全抑制，即热电子传输距离约为4×0.35=1.4 nm[2]。此外，二维材料堆叠顺序对热载流子传输距离及反应性能也有显著影响。以由两层石墨烯和一层二硫化钼（MoS_2）组成的范德华异质结为例，随着MoS_2层逐渐远离顶部Au纳米粒子，热电子还原反应的效率也发生了显著下降。理论模拟表明，这是由于单层MoS_2对间隙内电磁场分布的亚纳米级别调控所致。而当以4-巯基苯甲酸氧化脱羧为热空穴探针时，单层MoS_2位置的移动反而会导致热空穴诱导反应效率的提升，与热电子诱导反应结果完全相反。上述结果表明，基于层数可控的二维材料-等离激元金属纳米结构可显著调制热载流子诱导光催化反应活性及选择性。

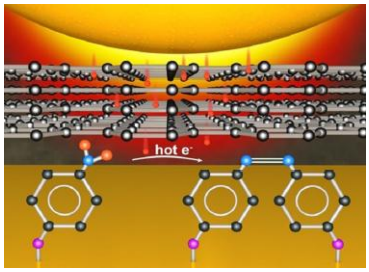


图1：利用原位拉曼光谱研究不同层数石墨烯-Au纳米粒子界面热电子转移

关键词：光催化，热载流子，二维材料，原位拉曼表征

参考文献：

[1] Li Chao-Yu, Duan Sai, et al., Nat. Nanotechnol., 2020, 15, 922−926.

[2] Yang Jing-Liang, Wang Hong-Jia, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2022, 61, e202112749.

基于受激布里渊散射的高相干低噪声激光光源产生技术

白振旭 [1,2,3]，张龙杰 [1,2,3]，范文强 [1,2,3]，王雨雷 [1,2,3]，吕志伟 [1,2,3]

[1] 河北工业大学先进激光技术研究中心，天津 300401
[2] 河北省先进激光技术与装备重点实验室，天津 300401
[3] 金刚石激光技术及应用协同创新中心，天津 300401

*Email: baizhenxu@hotmail.com

受激布里渊散射（SBS）在高功率激光中发挥着关键作用，不仅实现光声场的能量与相位耦合，还为获得窄线宽、高相干的单频激光提供了重要物理机制。近年来，自由空间布里渊激光器已成为实现高功率单频激光的有效途径，且具有波长可调范围宽、散热性能优异及腔体设计灵活等突出优势。在众多增益介质中，金刚石凭借高布里渊增益系数（79 cm/GW）、宽光学透明窗口及优异的热导率（2200 $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$），被认为是构建高功率自由空间布里渊激光器的理想晶体。尽管已有金刚石布里渊激光实现窄线宽单纵模运行的报道，但其噪声特性仍缺乏系统研究。本研究首次系统揭示了自由空间金刚石布里渊激光器的噪声特性。结果表明，SBS过程在腔内对泵浦光的相位噪声具有显著的传递与滤波作用，使输出光的积分线宽压缩至0.85 kHz、本征线宽降至9.7 Hz，分别较泵浦光减小52倍和近三个数量级。该研究不仅验证了SBS在自由空间腔中的卓越降噪与相干增强能力，也填补了高功率布里渊激光噪声行为研究的空白，为实现超稳定高相干激光源提供了新的理论依据和实验支持。

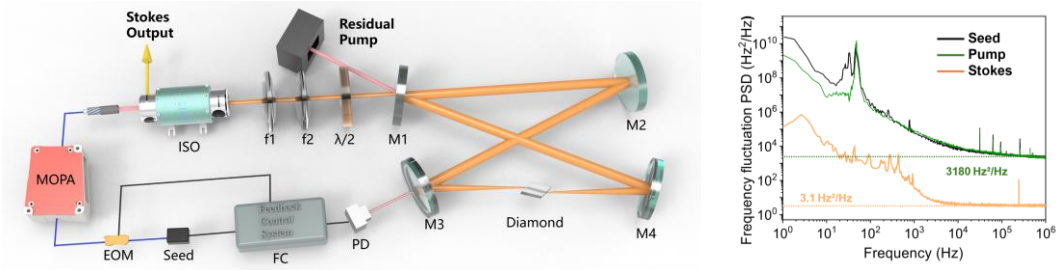


图1：实验装置图和噪声测量图

关键词：受激布里渊散射；激光技术；高相干；低噪声；高功率

参考文献：

[1] Chang, X.; Gao, W.; An, J.; et al. *Funct. Diam.* **2025**, *5*, 2476690.
[2] Chen, H.; Bai, Z.; Yang, X.; et al. *Appl. Phys. Lett.* **2022**, *120*, 181103.
[3] Bai, Z.; Williams, R. J.; Kitzler, O.; et al. *APL Photonics* **2020**, *5*, 031301.
[4] Jin, D.; Bai, Z.; Li, M.; et al. *Opt. Express* **2023**, *31*, 2942–2955.
[5] Jin, D.; Bai, Z.; Zhao, Z.; et al. *High Power Laser Sci. Eng.* **2023**, *11*, e47.

框架核酸组装 Au 纳米颗粒用于 SERS 灵敏检测 microRNA

杨霞*

西南大学，重庆市北碚区天生路 2 号，400715

*Email: xiayang2@swu.edu.cn

贵金属纳米颗粒的形貌及空间排布是显著影响SERS信号的重要因素。因此，实现拉曼基底贵金属纳米颗粒空间排布的精确可控是提高SERS信号的关键。液-液界面被广泛用于自组装有序的二维、三维纳米颗粒阵列，为调控SERS基底金属纳米颗粒的空间排布提供了良好的契机。然而，单纯依靠液-液界面表面能驱动实现纳米颗粒自组装，其颗粒间距及组装取向的精确调控仍然是高灵敏SERS定量检测面临的重大挑战之一。核酸自组装技术基于DNA出色的可编程性及刚性结构，可实现几何复杂、纳米级精度高的框架核酸结构组装。近年来，我们通过设计DNA双链结构调控液-液界面自组装Au纳米颗粒的间距及组装，实现液液界面拉曼增强热点的均匀分布。[1] 此外，我们也采取了取向不同的框架核酸结构如DNA网状结构，一维DNA梯子等[2-3]在液-液界面构筑DNA框架介导的自组装Au纳米薄膜。通过进一步结合核酸放大策略，我们实现了microRNA的SERS灵敏检测。这些多样的核酸框架结构不仅进一步丰富了可控组装的策略，也为开发针对特定生物分析物的系列SERS生物传感器奠定了基础，展示了该策略的普适性和应用潜力。

关键词：框架核酸；SERS；液-液界面，microRNA

参考文献：

[1] Liang H.; Liu Y.M.; Zhuo Y.; Yuan R.; Yang X.* *ACS Appl.Mater.Interfaces,* **2025**, 17, 41756.

[2] Liang H.; Jiang L. L.; Li H.Y.; Zhang J. L; Zhuo Y., Yuan R.; Yang X.* *ACS Sens*. **2023**, 8, 1192.

[3] Wu C. J.; Huang S.Q.; Wang Y. Y. Chai Y.Q. Yuan R.; Yang X.* *Anal. Chem.* **2021**, 93, 11019.

AI+快速样品前处理赋能 SERS：喹诺酮类抗生素的“源-流-汇”跨介质筛查方法

徐婧[1]，罗思恒[2]，熊晨汝[1]，刘国坤[1,*]

[1] 厦门大学环境与生态学院，海洋生物地球化学全国重点实验室，厦门 361102
[2] 福建师范大学海峡柔性电子（未来科技）学院（研究院），福州 350117

*Email: guokunliu@xmu.edu.cn

由于低成本、高生物利用度和快速迭代能力，喹诺酮类抗生素（Quinolones，QNs）在畜牧业、水产养殖加工和临床医学等领域得到了广泛应用[1]。然而，抗生素残留通过农业排放、医疗废物渗透和食物链传播进入生态系统，对全球健康构成威胁。因此，快速且高灵敏的抗生素检测在医疗保健、食品安全和药品质量控制等领域至关重要。表面增强拉曼光谱（surface-enhanced Raman spectroscopy，SERS）因其丰富的物质指纹信息及其近单分子的高灵敏度，已成为一种重要的表面分析工具，用于痕量目标分子的定性定量分析[2]。在实际的复杂样品SERS分析中，基质效应使得目标分子特征峰被掩盖或与干扰分子特征峰产生交叠，严重抑制了检测灵敏度。因此，样品前处理成为实现快检必不可少的步骤。然而，现有SERS检测方法多限于单一目标分子或单一样品的检测，仍缺乏对不同样本中多元混合喹诺酮类抗生素的快速高灵敏SERS分析。利用多种喹诺酮类抗生素共有的亲疏水性和酸碱两性特征，本文首次开发了包含固相萃取（SPE）、液液萃取（LLE）、盐析辅助液液萃取（SALLE）和纳米粒子纯化（NPs (p)）的快速样品前处理策略。结合基于深度学习的目标谱图提取算法（Spectral Separate Network，SSNet），这种模块化的SPE–LLE–SALLE–NPs (p)方法可实现对食品、生物和环境样品中19种喹诺酮类抗生素μg/L水平的快速（8分钟内）、高灵敏、现场化、智能化SERS分析。此外，SPE–LLE–SALLE–NPs (p)-SSNet-SERS联用方法可成功实现五元混合复杂样品中喹诺酮抗生素的快速定性分析和未知盲样的精准定量分析，这将在为抗生素快筛提供了一种从“源”、“流”至“汇”的跨介质、全流程、大数据增强的快速监测方案。

关键词：样品前处理；表面增强拉曼光谱；喹诺酮类抗生素；跨介质筛查；AI赋能识别

参考文献：

(1) Wilkinson, J. L.; Boxall, A. B. A.; Kolpin, D. W.; Leung, K. M. Y.; Lai, R. W. S.; Galban-Malagon, C.; Adell, A. D.; Mondon, J.; Metian, M.; Marchant, R. A.; et al. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2022**, *119* (8), e2113947119.

(2) Yi, J.; You, E. M.; Hu, R.; Wu, D. Y.; Liu, G. K.; Yang, Z. L.; Zhang, H.; Gu, Y.; Wang, Y. H.; Wang, X.; et al. *Chem. Soc. Rev.* **2025**, *54*, 1453-1551.

离子特异性调控的水凝胶 SERS 平台的构建及应用研究

周吉*，叶勇

湖北大学化学化工学院，武汉，430062

*zhouji@hubu.edu.cn (J. Zhou)

水凝胶是一类具有三维网络结构的交联聚合物凝胶，具有高化学稳定性、高含水量和可调节的孔径等特点，作为水基软质材料也被广泛用于 SERS 基底的开发中。水凝胶与金属纳米颗粒的结合可以解决许多 SERS 实际应用的关键问题，如再现性和可靠性差、样品预处理复杂且耗时、操作困难、成本高、长期储存稳定性低等[1]。但水凝胶 SERS 平台还存在灵敏度不够高、SERS 热点调控方式单一等不足。针对现存的这些问题，设计构建特异性动态调控的水凝胶/金银纳米复合结构，研究 SERS 增强变化规律，厘清水凝胶/金银纳米复合结构变化与 SERS 增强之间的联系，对水凝胶 SERS 平台的应用开发具有重要意义。本文利用霍夫迈斯特效应（Hofmeister effect）对水凝胶微观结构的特异性影响[2]，结合离子刻蚀效应对各向异性银纳米粒子 LSPR 的调控，以单网络和双网络 Ag NPs 水凝胶为研究对象，系统研究了离子特异性效应下水凝胶中纳米颗粒形貌、聚集状态以及传质性能的影响，探讨了 SERS 增强机制并开发了相关应用研究。

本研究设计了两个水凝胶 SERS 平台：1）刻蚀和盐析效应调控的 PVA/Ag NPrs 复合水凝胶的 SERS 增强：采用冷冻-冻融循环制备了 PVA/Ag NPrs 复合水凝胶，板状银纳米粒子被氯离子缓慢刻蚀，继续盐析皱缩后，快速可控地调节水凝胶的交联网络和 LSPR 性质，双重作用协同增强了 SERS 性能。2）霍夫迈斯特效应调控的 PVA@CNF 双网络复合 AgNPs 水凝胶的 SERS 增强：双网络水凝胶中，CNF 的“牵制”作用影响纳米粒子的空间排布和探针分子的流动性。盐析离子能够破坏 PVA 链与水分子之间的氢键，使水凝胶失水体积缩小导致其中包裹的银纳米粒子间距减小，有利于 SERS 性能增强。盐溶离子则与 PVA 链结合，切断聚合物链间的氢键作用，使水凝胶中的银纳米粒子更加分散。但同时双网络中 CNF 牵制的扩散平衡能力变弱，能快速产生 10 倍的 SERS 增强，但增强效果远低于盐析作用。该研究不仅保留了水凝胶基底的优点，还实现了 SERS 信号的高灵敏、稳定增强，并具备操作简便、成本低和普适性强等优势，为水凝胶 SERS 基底在健康监测、法庭科学等领域的实际应用提供了重要参考。

关键词：表面增强拉曼散射；水凝胶；霍夫迈斯特效应；离子刻蚀；动态调控

参考文献：

[1] Zhou P, Zhang Z, Mo F, et al. A review of functional hydrogels for flexible chemical sensors. *Advanced Sensor Research*, **2024**, *3(3)*: 2300021.

[2] Wu Y, Mu Y, Luo Y, et al. Hofmeister effect and electrostatic interaction enhanced ionic conductive organohydrogels for electronic applications. *Advanced Functional Materials*, **2022**, *32(15)*: 2110859.

特励达科学成像事业部—助力国产仪器发展

王帅 Shawn Wang[1]

[1] 特励达普林斯顿仪器

*Email: shawn.wang@teledyne.com

Teledyne集团是一家拥有兼具产能和先进制造工艺的CCD生产厂的公司，可以衔接产品开发和设备制造的工厂。这种能力在为系统集成商和原始设备制造商（OEM）服务方面提供了优势。

我们不仅可以实现科研级相机和光谱仪设计，也拥有大批量制造的能力。随着具有苛刻成像要求的新兴物理科学和生命科学市场的出现，我们将CCD、EMCCD、ICCD和CMOS传感器应用到成像系统组件中，在满足您预算的同时，达到优异的图像质量、速度和灵敏度等性能表现。结合我们光谱技术，您还可以在光谱工作方面期待卓越的分辨率、灵敏度和信噪比。无论您的公司处于初创阶段还是已经成熟，成为我们的OEM合作伙伴后，您都将受益于Teledyne Technologies下解决方案提供能力、系统集成技术支持和稳定的供应链管理。



Fig.1： From Pixel to PC

关键词： 科研级相机；光谱成像；OEM；

Teledyne Confidential; Commercially Sensitive Business Data

机器学习辅助磁纳米马达用于拉曼识别和降解有机污染物

耿志琴，渠陆陆*

江苏师范大学化学与材料科学学院，江苏徐州市铜山区上海路 101 号，221116

*E-mail: luluqu@jsnu.edu.cn

摘要：

针对污染物“先检测，后吸附去除”传统手段存在的操作繁琐、污染物未被无害化处理的瓶颈问题，构建了具有光催化活性的磁驱动纳米马达（ATAF），开发了动态富集-原位监测-催化降解协同策略，实现了污染物的实时检测并将其高效降解为对环境无害的CO_2和H_2O。该策略能够同时进行表面增强拉曼散射（SERS）检测和污染物的光催化降解。Au@TiO_2空心结构与R-Fe_3O_4负载的Au纳米颗粒相结合，增强了局部表面等离子体共振，能够对低于10^{-11} M的污染物进行超灵敏检测，同时在复杂水环境中展现出良好的稳定性。在可见光照射下，纳米马达在90分钟内实现了污染物的降解，在多个循环中表现出优异的催化效率。采用机器学习对污染物降解过程中的光谱进行了全面统计分析验证了光降解过程。电子顺磁共振和淬灭实验验证了降解机理。此外，纳米马达表现出优异的抗菌活性和可忽略的生态毒性，证实了其环境相容性，避免了二次污染风险。研究为水生环境中低浓度有机污染物的实时监测与精准修复提供了一种双重策略。

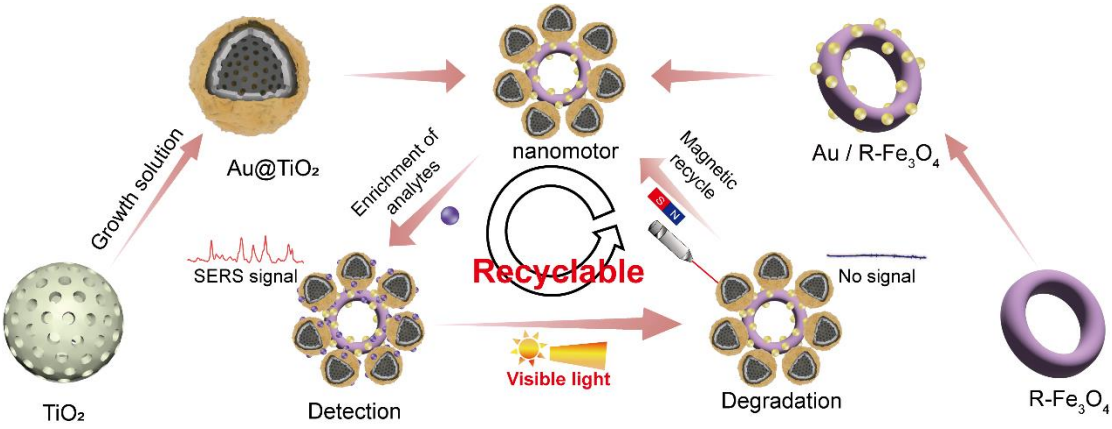


图1：可回收ATAF纳米马达的制备和检测-降解过程示意图

关键词：纳米马达；SERS；光催化；机器学习

参考文献：

[1] M. Urso, M. Ussia, M. Pumera, Smart micro-and nanorobots for water purification, *Nat. Rev. Bioeng.*, **2023**, 1, 236-251.

[2] N. Vijay, S. Jeevanandham, S. Ramasundaram, T. H. Oh, S. T. Selvan, Recent Advancements in Multimodal Chemically Powered Micro/Nanorobots for Environmental Sensing and Remediation, *Chemosensors*, **2025**, 13, 69.

Specific Molecular Capture and Rapid SERS Diagnosis in Liquid human Serum Through DNA Aptamer Origami-Collapsed Nanofingers

刘凡新 [1]

[1] 浙江工业大学物理学院，杭州市西湖区留和路 288 号，310023

*Email: liufanxin@zjut.edu.cn

Abstract: SERS shows the important potentials in early medical diagnosis due to its capability of fingerprint identification for disease markers and high sensitivity at single-molecule level. However, in complicated human serum, how to capture specific marker into hotspots and realize the quantification becomes extremely challenging. Herein, we illustrate an effective strategy through DNA aptamer origami-collapsed nanofingers to realize the highly selective capture and SERS detection for disease markers in real human serum solution. Specific DNA aptamer for alpha-fetoprotein (AFP) are firstly anchored on the surface of Au nanofingers via thiol binding, and subsequent collapsible process driven by capillary force during aptamer solution evaporation induces gap plasmons between pairs of nanofingers with well-defined aptamer gap down to sub-nanometer scale, which produces strongly and nanoscale coupled near-field. Human serum solution is directly filled into aptamer origami-collapsed nanofingers which are pre-located to the bottom of biocarrier glass slide so that AFP is uniquely captured into hotspot region. Dynamic Raman monitoring shows that AFP can be captured within 2 min and ultra-low concentration down to 0.001 ng/ml can be detected. More important, only AFP in serum solution is detected which successfully avoid the disturbance of other proteins . In addition, the characteristic Raman peak ratio of AFP to aptamer for quantification can provide relative accuracy. This strategy opens the road of SERS applications in the field of early medical diagnosis.

Keywords: AFP; human serum; collapsed nanofingers; SERS, nanoimprint lithography.

参考文献：

[1] Ji, B. J.; Wu, J. B.;* Tan, P. H.; **Liu, F. X.*** et al. Targeted Molecular Rapid SERS Diagnosis in Clinical Human Serum Through Aptamer Origami-Collapsed Nanofingers Chips. *Biosensors and Bioelectronics* **2025**, *285*, 117583.

[2] Liu, Z. R.; **Liu, F. X.;*** Wu, W.* et al. Ultrafast Early Warning of Heart Attack through Plasmon-Enhanced Raman using Collapsible Nanofingers and Machine Learning. *Small* **2023**, *19*, 2204719.

面向临床生物标志物检测的 SERS 传感器研究

许珊珊

山东船舶技术研究院，威海市文化西路 2 号，264200

*Email: xushsh1204@163.com

体外诊断（IVD）技术发展迅速，新兴技术不断推动行业革新。近年来表面增强拉曼光谱（SERS）技术凭借超高灵敏度、快速和多指标分析等优势，在IVD领域展现出巨大的应用潜力，有望为精准医疗和个性化治疗提供有力支持。但是在复杂体系条件下仍然面临多种挑战。其一，复杂基质成分可能导致的假阴性和假阳性问题；其二，在复杂体系中，目标标志物可能浓度极低，对检测技术的灵敏度要求极高。其三，对于多种标志物同时检测的需求日益加剧，同检困难。所以本研究基于以上问题利用磁珠三明治体系分别做了以下研究内容：

（1）针对临床血清样本中成分复杂，影响检测准确度问题，设计并构建了基于SERS的生物传感平台。在研发过程中，系统优化反应体系参数，并通过引入阻断剂有效抑制了血清中内源性干扰物的干扰，解决临床样本中假阳性问题。利用该体系实现对乙型肝炎表面抗原的快速灵敏检测，经90例临床样本验证显示灵敏度与特异性均可达100%，保证结果的准确可靠。

（2）针对高灵敏度检测及多标志物联检需求，本研究开发了一种基于协同增强机制的超灵敏SERRS传感器。通过制备金银纳米立方体，结合两种共振信号分子策略实现高灵敏检测。将此传感器应用于细胞因子的同检检测工作中。并在此工作中解决了粒子间交叉反应以及双重检测灵敏度低的问题。同时通过实验验证AuAg NCs与IR1061的搭配体系在1064 nm激发光下依然可以实现优异的检测性能，可填补该波段IVD应用空白。

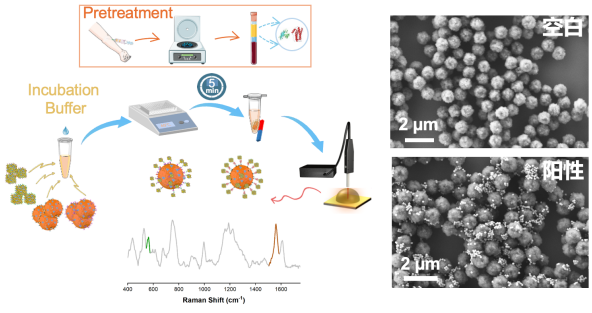


图1：磁珠法示意图及阴性阳性样本扫描电镜图片

关键词： 表面增强拉曼光谱；体外诊断；双重检测；磁珠三明治体系

参考文献：

[1] Xu, S.; Wu, X.H.; Zhang, Y.J.; Li, J.F. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 6784.

LED 光镊测量悬浮微液滴界面理化过程的粒径依赖关系

黄启燊 [1*]，刘湃 [1]，张韫宏 [1]

[1] 北京理工大学，北京市海淀区中关村南大街 5 号，100081

*Email: qihsenh@bit.edu.cn

近期国内外“微液滴化学”的研究指出，微液滴由于气液界面较大的比表面积，分子的部分溶剂化效应、分子有序性、界面电场等因素综合作用，能显著改变表面化学反应活性，使微米液滴中的化学反应速率，比体相溶液中快若干个数量级。气液界面甚至可以促使体相条件下难以发生的反应自发进行。这种微液滴表面加速反应的现象为生命起源、大气污染、“双碳”战略及新污染物降解等重要科学问题提供了全新化学机制。然而，当前对微液滴界面反应的动力学过程尤其是粒径依赖关系的精确分析仍面临挑战，因此，亟需在单颗液滴尺度上原位测量微液滴理化过程，揭示其界面与粒径依赖机制。

本研究开发了一种基于受激弹性散射的气溶胶光镊（esAOT），采用非相干蓝光LED照明激发回音壁模式（WGM）信号。此系统可实现液滴的长时间稳定悬浮（可达一周以上），并实现高精度粒径测量。esAOT的测量结果与传统受激拉曼光镊（isAOT）具有较高一致性（相对偏差小于2.0%）。此外，esAOT显著提升了信号强度和信噪比。因此，esAOT将液滴半径的检测下限由isAOT的2523 nm降低至1442 nm，大幅扩大了粒径的测量范围。基于此优势，esAOT可通过原位追踪液滴半径演变，区分体相反应、界面反应及蒸发等关键物理化学过程。以大气SO_2被O_2氧化为例，实验揭示了反应由体相主导（pH = 5.0）向界面主导（pH = 3.8）的转变过程，其中体相反应速率常数为$3.96 \pm 0.00 \times 10^{-4}$ s^{-1}，界面反应速率常数为$5.37 \pm 0.01 \times 10^{-10}$ s^{-1}。NH_4Cl液滴的蒸发实验亦展现出特有的粒径依赖特性。并且依据实验结果可以得到在60%相对湿度、298 K条件下，NH_4Cl的饱和蒸汽压（$5.43 \pm 0.01 \times 10^{-4}$ Pa）。

本研究证明了esAOT是一种能够精确解析单颗液滴动态物理化学及其粒径依赖关系的通用的高灵敏度平台。该研究装置的建立为深入认识环境微液滴特性、界面加速机制、以及大气气溶胶过程的参数化提供了重要的分析手段与数据支持。

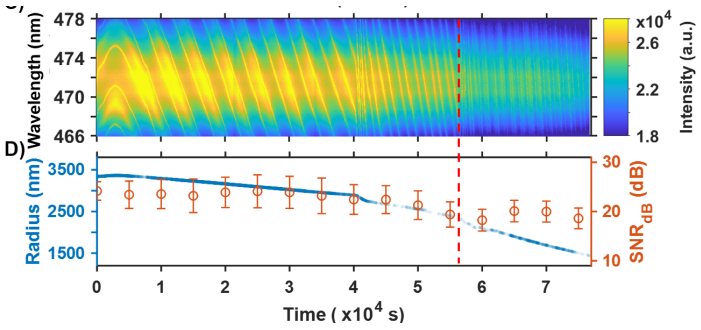


图1：受激弹性散射气溶胶光镊测量氯化铵液滴从3500 nm 变化至1500 nm过程中回音壁模式（WGM）信号与仪器信噪比随时间的变化。

关键词： 光镊；显微拉曼；微液滴；表面加速反应

CRISPR/dCas9 系统集成 BeadPlex 体系用于转基因作物的多重检测

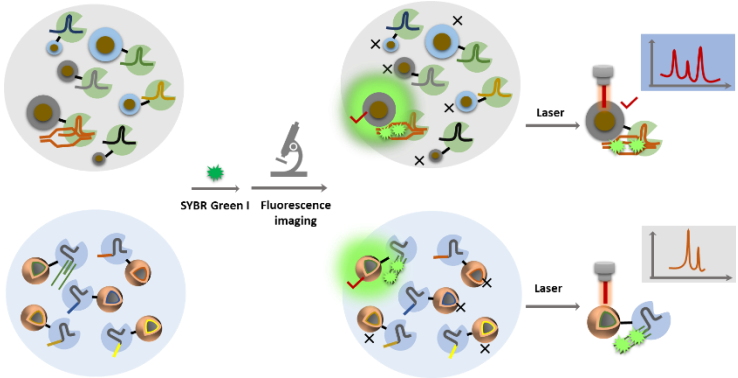
王慧敏[1]，尹悦佳[2*]，徐抒平[1,3*]

[1] 吉林大学化学学院，超分子结构与材料全国重点实验室，长春，130012
[2] 吉林省农业科学院农业质量标准与检测技术研究所，长春，130033
[3] 吉林大学化学学院，超分子化学生物学研究中心，长春，130012

*Email: xusp@jlu.edu.cn (S. X.), yyjqishi@163.com (Y. Y.)

基于CRISPR/Cas体系与编码技术，本研究构建了一种高效灵敏的核酸检测平台，旨在实现转基因作物的多重检测。该平台开发了两种创新的编码方式：聚合物微球尺寸/拉曼编码和SERS Tag编码，这两种编码技术共同构成了BeadPlex体系，为多目标检测提供了可靠的技术基础。CRISPR/Cas系统中的dCas9/sgRNA复合体被用于精准识别和锚定目标核酸序列，从而实现对特定转基因作物的高效检测。通过BeadPlex体系的多重编码功能，该平台能够同时检测多种目标核酸，显著提升了检测的通用性与灵敏度。本研究将CRISPR/Cas系统的高特异性识别能力与多元化编码技术相结合，为转基因作物的监测提供了一种可靠且高效的解决方案。实验结果表明，该检测平台在准确度和特异性方面均表现优异，具有广阔的应用前景，可为农业安全、生物安全以及转基因作物监管提供重要支持。此外，本研究还为基于CRISPR技术的多重核酸检测开辟了新的技术路径，为未来更复杂的分子诊断场景奠定了基础。

本研究受国家自然科学基金项目（22373041，22173035）、国家重点研发计划（2023YFC3706002）、吉林省科技发展计划项目（20220101046JC）、超分子结构与材料国家重点实验室创新研究课题（2024、2025）资助。



关键词： CRISPR/Cas；尺寸编码；拉曼编码；核酸检测；多重检测

基于三键拉曼探针的生物医学成像

朱伟[1,*]，徐文静[1]，王婷婷[1]，何梦雪[1]，沈爱国[1,*]

[1] 武汉纺织大学，生物工程与健康学院，武汉市江夏区阳光大道 1 号，430200

*Email: weiz@wtu.edu.cn; agshen@wtu.edu.cn

面对生物样本中的复杂性，生物标记检测与成像技术已经成为生物医学研究领域的重要工具，尤其是在疾病诊断和精准医疗的应用中发挥着越来越关键的作用[1]。随着对生物标记的需求不断增加，基于炔基、氰基等一系列三键基团的研究获得了广泛关注。这些三键基团在拉曼散射光谱的生物静默区（1800-2800 cm^{-1}）内，呈现出独特的谱带，能够有效避免与生物样本中常见的分子相互干扰，进而提供高信噪比的信号输出，从而为精确的标记与成像研究提供了理想的方案[2]。基于此，研究团队通过从分子设计的角度出发，创新性地开发了信号输出强且丰富的三键探针[3, 4]。这些新型探针不仅具备高灵敏度和高选择性，而且能够在多个亚细胞器和组织中的多蛋白因子成像中提供精确、清晰的图像。这些技术的突破使得细胞内部以及组织结构的多维度成像成为可能，为研究细胞功能、蛋白相互作用以及细胞代谢等生物学过程提供了更为精细的观察手段。此外，这些探针在生物医学领域的应用前景广阔，尤其是在临床病理研究中，可以为疾病早期诊断、病理机制探究以及个体化治疗提供新的研究思路。通过进一步优化和推广这些探针的应用，预计能够为医学影像、药物筛选以及生物标志物的识别提供新的技术平台，推动生物医学领域向更高精度和更个性化的方向发展。

关键词： 三键；拉曼成像；生物医学

参考文献：

[1] Wei, L.; Chen, Z.; Shi, L.; Long, R.; Anzalone, V. A.; Zhang, L.; Hu, F.; Yuste, R.; Cornish W. V.; Min, W. *Nature* 2017, **544**, 465-470.

[2] Zhu, W.; Wang, C.; Hu, J.; Shen, A. *Anal. Chem.* 2021, 11, 4876-4883.

[3] Zhu, W.; Cai, E.; Li, H.; Wang, P.; Shen, A.; Popp, J.; Hu, J. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 21846-21852.

[4] Zhu, W.; Tang, Y.; Hu, S.; Xu, W.; Yu, D.; Cao, J.; Gao, T.; Shen, A. *ACS Materials Lett.* 2025, 7, 2343-2351.

大光斑拉曼光谱及其预临床深部病灶检测应用

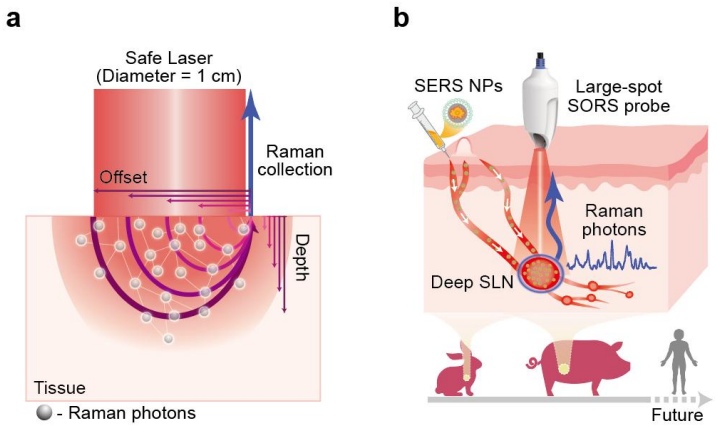
林俐[1*]，叶坚[2]

[1] 上海交通大学，生物医学工程学院

*linli92@sjtu.edu.cn

无创检测深部病灶（如肿瘤及前哨淋巴结）并实现术周导航仍是目前临床实践中的未解难题。近年来，空间偏移拉曼光谱及透射拉曼光谱等深层检测技术取得了显著进展，已将光学检测深度从亚毫米级拓展至厘米尺度[1-2]，为人类无创光学检测奠定了理论基础，但其临床转化始终受三大因素制约：激光安全性、有效探测深度及操作便捷性。

在本研究中，我们设计了面向临床应用的手持式大光斑空间偏移拉曼（Large-Spot Spatially Offset Raman Spectroscopy, LS-SORS）探头。该探头通过集成直径1厘米的宽场激发光束与光纤拉曼束并在空间上分离，可确保临床激光安全（符合ANSI Z.136.3标准），同时有效提升深部组织光信号的占比。探头采用人体工学设计，易于持握。我们在活体动物体内注射生物相容性表面增强拉曼散射纳米颗粒，采用LS-SORS探头实现了超过5厘米深度的稳定、可重复的信号检测。我们采用预临床动物白猪模型，在真实的手术室环境中，遵循外科医生标准手术流程与剂量规范，成功完成了猪的实时前哨淋巴结定位与切除，充分验证了该系统的即时临床适用性。本项研究为术中无创深部组织检测提供了经实践验证的实用技术方案，给基于拉曼光谱的临床应用转化奠定重要基础。



关键词： 拉曼光谱；前哨淋巴结；预临床动物；激光安全；大光斑

参考文献：

[1] Zhang Y, Lin L, Ye J. Small Methods. 7:2201334.

[2] Zhou Y, Lin L, Ye J. ACS Nano, 2024, 18, 52, 35393–35404..

电化学环境中表面等离激元的直接电子转移及其应用研究

朱舒翼[1]，薛峰[1]，白清晨[1]，何彦丽[1]，王丽君[1]，王琳琳[1]，刘伟杰[1]，张霞光[2,*]，战超[1,*]，田中群[1]

[1] 厦门大学化学化工学院，厦门，361005
[2] 河南师范大学化学化工学院，新乡，453007

*Email: zc@xmu.edu.cn, zhangxiaguang@htu.edu.cn

直接电子转移是指在表面等离激元效应的介导下电子直接由金属向分子转移的表界面过程，因其具有提高催化反应活性的潜力而备受关注。电化学环境是等离激元极其重要的应用场景。如电化学-表面增强拉曼光谱/红外光谱，光电催化反应等，皆涉及复杂的表界面电子交换过程，因此与直接电子转移密切相关。在电化学环境中研究直接电子转移效应，是深入理解等离激元作用机制，优化电化学应用性能的必由之路。然而由于电化学环境高度复杂，且各种表界面效应的作用难以区分（尤其是直接与间接电子转移），目前对直接电子转移的认识仍不足。本工作结合光电化学与暗场散射光谱法实现了反应过程中对等离激元直接电子转移效应的原位监控，获得了氧还原反应过程中金属与分子界面处发生直接电子转移的重要证据。结果表明，直接电子转移的发生与反应类型密切相关。此外还区分了直接电子转移和间接电子转移对氧化原反应光电流的贡献。结果表明，直接电子转移是等离激元促进氧还原反应过程中电子转移的主导机制。该工作为优化等离激元电化学应用提供了可能性，并推动了对电化学环境中等离激元界面电荷转移的深入理解。

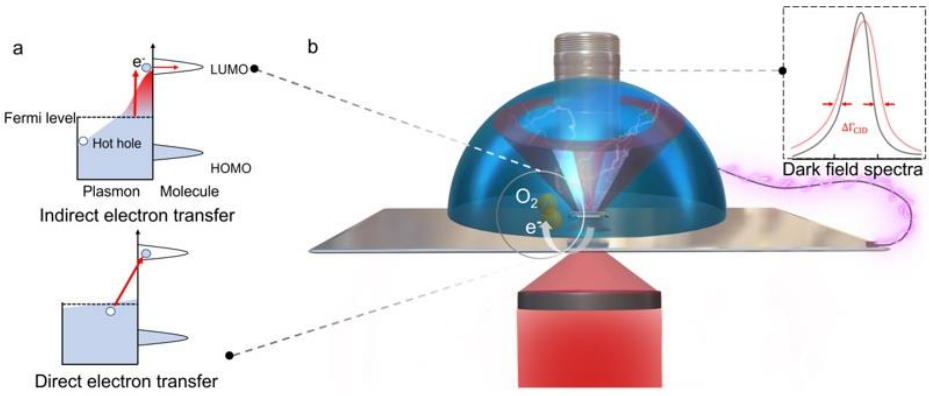


图1： 等离激元诱导的电子转移机制 (a) 电化学-暗场光谱实验示意图 (b)。

关键词： 表面等离激元；谱学电化学；界面电子转移；光电化学；氧还原反应

参考文献：

[1] S. Y. Zhu, F Xue, Q. C. Bai, Y. L. He, L. J. Wang, L. L. Wang, W. J. Liu, X. G. Zhang*, C Zhan*, Z. Q. Tian, J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 10.

原位拉曼揭示镍铜催化剂在氨氧化过程中的表面重构现象

毛越，谢微*

南开大学化学学院，天津，300071

*Email: wei.xie@mail.nankai.edu.cn

氨（NH_3）作为氢能载体，具有合成工艺成熟、成本低、无碳储能等优点[1]。其中，耦合氨氧化反应（AOR）和析氢反应的电化学方法可以在室温下高效可控地释放氢气。但AOR过程中涉及多步电子-质子转移导致动力学缓慢，存在较大过电位[2]。因此，设计高效稳定的电催化剂至关重要。目前，研究人员制备了一系列具有高催化活性和稳定性的Ni-Cu双金属电催化剂，并提出了Ni-Cu两种金属在表面重构过程中会进一步形成$Ni_{1-x}Cu_xOOH$作为活性物种以增强催化性能[3]。然而，双金属催化剂的动态重构过程尚不明确，并且没有形成$Ni_{1-x}Cu_xOOH$物种的关键实验证据。基于此，本研究采用原位拉曼光谱对Ni-Cu合金纳米颗粒的动态表面重构行为进行分析，确定了在较低电位下形成了γ-$Ni_{1-x}Cu_xOOH$并作为AOR的最终催化中心。作为对照实验，当电解液中没有NH_3存在时，催化剂会在较高电位下重构形成β-$Ni_{1-x}Cu_xOOH$。这表明NH_3不仅作为反应物，还促进了γ-$Ni_{1-x}Cu_xOOH$的生成，从而在较低电位下加速NH_3的去质子化过程，并抑制竞争性的析氧反应。密度泛函理论计算证实γ-$Ni_{1-x}Cu_xOOH$作为催化活性物质不仅优化了*NH_3的吸附和*N_2的脱附能力，还降低了决速步骤（*NH_3→*NH_2）的能垒。电化学测试结果表明，$Ni_{0.8}Cu_{0.2}$ NPs在1.69 V vs. RHE下电流密度为229.63 mA cm^{-2}，并在10 mA cm^{-2}下可持续稳定100 h。本研究确定了AOR中Ni-Cu合金催化剂重构后的真实活性物质，为设计更高效的催化剂提供了见解。

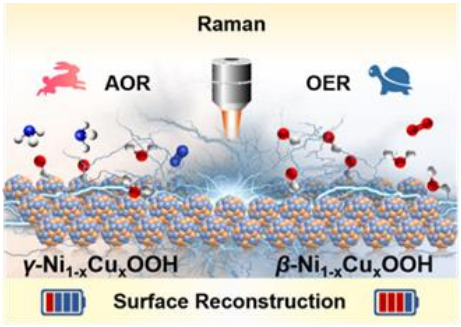


图1：原位拉曼检测Ni-Cu合金纳米颗粒在电催化过程中的表面重构现象。

关键词：原位拉曼光谱；表面重构；$Ni_{1-x}Cu_xOOH$；氨氧化反应

参考文献：

[1] X. Du; A. Du, D. Wang, Y. Mao, Z. Zhang, W. Xie, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 8083-8087.

[2] M. Zhang, T. Wang, X. Du, Y. Mao, A. Zhu, A. Du, L. Tong, W. Xie, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 28331-28339.

[3] W. Xu, R. Lan, D. Du, J. Humphreys, M. Walker, Z. Wu, H. Wang, S. Tao, *Appl. Catal. B Environ.* **2017**, *218*, 470-479.

中国书画印记的激光拉曼光谱与 X 射线荧光光谱鉴定方法研究

赵美红 [1,2*]

（1 首都师范大学历史学院，北京 100048　2 中国艺术科技研究所，北京 100007）[1]

(z_mei@163.com)

摘要

将科技鉴定方法引入到中国书画鉴定中并与传统鉴定方法结合是鉴定工作的迫切需要。印章印记在古书画鉴定中的作用极为重要，印记的真伪审定是传统鉴定中必不可少的环节。本文采用激光共聚焦拉曼光谱技术，同时配合 X 射线荧光光谱技术，研究了具有代表性的四种印泥和清代八大山人的《荷花》作品印记和一份明代的地契上的印记的物质结构及其元素成分。通过对光谱峰的归属认证分析，可以有效甄别出不同印泥包含的色料及填料的差异性。比较研究表明，现代印泥一般由多种色料混合组成并增加了填料，而明清时期的印泥则色料单一且纯度高，不含填料。本文的方法能快速有效地呈现不同印记的差异性，表明激光拉曼散射光谱与 X 射线荧光光谱结合具有中国书画印记鉴定方法的准确性、有效性和可应用性。本文还提出了以激光拉曼光谱数据为基础的印泥及印记数据库建设的思路并完成了数据库的基本建设。同时为建立书画家个性和专有的印泥和印记材料数据库打下基础。

关键词：激光拉曼光谱；X 射线荧光光谱；印泥；印记

中图分类号：N34

作者简介：赵美红（1975-），女，博士研究生，主要从事艺术品鉴证方面的研究。E-mail:z_mei@163.com

单细胞拉曼光谱+AI：病原菌气溶胶快速识别

朱龙吉[1]，崔丽[1,*]

[1] 中国科学院城市环境研究所，厦门市集美区集美大道 1799 号，361000

*Email: ljzhu@iue.ac.cn

病原菌气溶胶对空气传播疾病乃至疫情的暴发至关重要，建立病原菌气溶胶传播监测体系，是全面筑牢疫情防线的重要需求。目前基于基因、免疫或培养的传统方法无法同时满足实际环境中病原菌快速、灵敏检测的需求。单细胞拉曼光谱具有免培养、特征多、速度快的优势，是环境微生物研究的前沿技术，有望实现环境病原菌及其耐药性的快速现场监测和传播追踪。然而，由于实际环境中充满了各种土著菌、杂质的干扰，直接从复杂的空气环境中快速准确地识别病原菌仍然极具挑战性。

为此，我们提出了一种先进的方法（Raman-OSDL），将单细胞拉曼光谱与开集深度学习（OSDL）相结合，以识别实际空气气溶胶中的病原菌。为了提升识别效果，我们首先构建了气溶胶状态下细菌的拉曼谱库。通过训练阴性样本、添加阈值、替换softmax函数等方式逐步优化OSDL算法，最终实现对5种（金黄色葡萄球菌、铜绿假单胞菌、贝氏不动杆菌、大肠杆菌、肠炎沙门氏菌）典型空气病原菌的识别准确率达到93%，同时，对未知菌的识别准确率达84%，与传统的闭集算法相比，假阳性率降低了36%。进一步，我们选取含有超过4600种细菌的真实受病原菌污染的空气样品对方法进行验证，结果表明该方法可以在一小时内同时、准确地识别出气溶胶中单一或多种病原菌。该方法的建立为未来应对复杂环境中病原菌监测及传播提供新的技术手段。

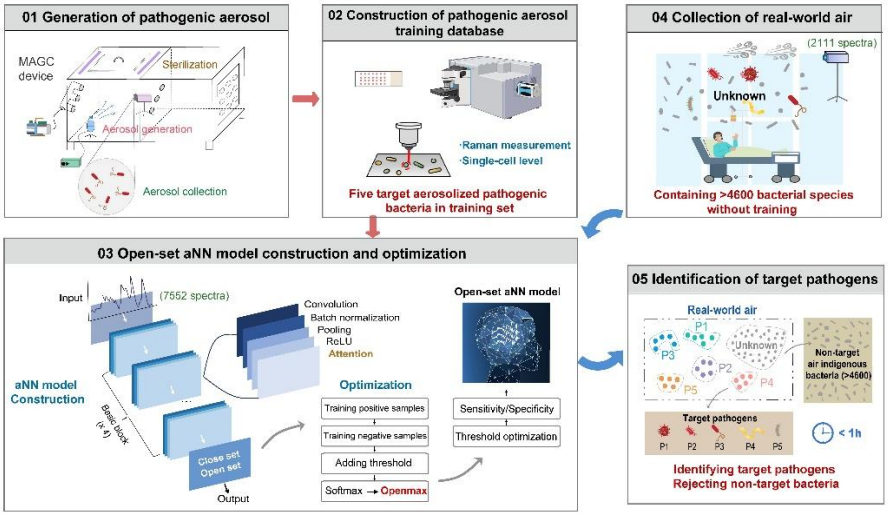


图1：基于单细胞拉曼光谱结合开集深度学习识别空气病原菌流程图

关键词：病原菌；气溶胶；单细胞拉曼光谱；开集深度学习

基于等离激元纳米材料的气体分子富集及检测的应用研究

寇艺川[1]，张霞光[2]，许清池[3,*]，张月皎[3,*]，李剑锋[3,*]

[1] 中国计量大学光学与电子科技学院，浙江省杭州市钱塘区学源街 258 号，310018
[2] 河南师范大学化学化工学院，河南省新乡市建设东路 46 号，453007
[3] 厦门大学能源学院，福建省厦门市思明南路 422 号，361005

*Email: xuqingchi@xmu.edu.cn, zhangyuejiao@xmu.edu.cn, Li@xmu.edu.cn

气体分子的高效富集与灵敏检测在非侵入式生命健康及安全监测中至关重要，但由于其浓度极低、组分复杂且易受环境干扰，传统方法难以实现痕量气体的精准、快速分析。表面增强拉曼散射（SERS）技术虽具备单分子检测潜力，但其在气体分析中的应用仍受限于分子吸附效率、低丰度分子信号获取及气固界面扩散限制等关键问题。

针对上述挑战，本研究基于等离激元纳米材料提出了三种创新策略：其一，通过分子间弱相互作用设计，利用4-巯基苯甲酸功能化基底捕获气态乙酸分子，并借助密度泛函理论验证氢键作用机制，实现对60 ppb乙酸的高灵敏度检测，同时表现出优异的抗干扰能力与稳定性；[1] 其二，开发光致电荷转移共振增强策略，通过调控激发波长实现能量匹配，显著增强气态醛类分子的SERS信号，灵敏度提升达100倍，检测限降至60 ppt，并成功应用于呼气分析，可区分氧化应激状态与健康人群；其三，构建多级孔阵列结构以调控气体扩散路径，延长气体驻留时间并增加碰撞概率，结合三维热点结构的设计，实现了对细菌代谢产物二甲基二硫醚的低至1 ppt的检测，并可在30分钟内实时监测活菌存在。

本研究从分子相互作用、电子态匹配与传质调控三个维度深化了对SERS气体分析机制的理解，所提出策略为生命健康与安全监测领域提供了高灵敏、抗干扰且普适性的气体传感解决方案，推动了SERS技术在痕量气体分析领域的实际应用。

关键词： 表面增强拉曼光谱；气体分子；弱相互作用；光致电荷转移共振；气体扩散

参考文献：

[1] Kou, Y.; Zhang, X.-G.; Li, H.; Zhang, K.-L.; Xu, Q.-C.; Zheng, Q.-N.; Tian, J.-H.; Zhang, Y.-J.; Li, J.-F. *Anal. Chem.* **2024**, *96*, 4275–4281.

半金属二维硒化物的高效制备和 SERS 特性研究

葛源才[1]，王海洋[1]，王毅[1*]

[1] 温州医科大学眼视光学院(生物医学工程学院)，浙江省温州茶山高教园区温州医科大学，325000

*Email: yiwang@wmu.edu.cn

在费米能级处有较高态密度的半金属二维材料，基于电荷转移增强、分子基态共振增强等机制，为表面增强拉曼信号散射(SERS)提供了一种新途径[1]。本工作以化学气相传输法合成的二维硒化物单晶作为电化学阴极，并以四己基溴化铵作为插层剂，成功在两小时内制备出单层产率超过 95%的多种 MSe_2 材料[2]。解决了液相剥离和化学气相沉积等方法制备二维 SERS 基底中效率低、制备材料厚度分布不均、缺陷密度不一等问题，为不同二维材料 SERS 性能的比较提供了坚实的实验基础。报告人对比了吸附在 $TiSe_2$、$NbSe_2$、$TaSe_2$ 单层上的罗丹明 6G 和亚甲基蓝的 SERS 信号强度差异。通过荧光淬灭效率和密度泛函理论计算电荷转移效率，实验观测结果与理论分析均表明，在费米能级具有较高态密度的 $NbSe_2$ 和 $TaSe_2$ 能够更有效地促进分子的基态跃迁，提供更多的激发态非辐射耗散路径，从而通过化学增强效应提升小分子的 SERS 强度。基于这一发现，报告人进一步将 $NbSe_2$ 与侧向流免疫技术相结合，应用于泪液中干眼炎症标记物 MMP-9 的快速、精准定量检测。

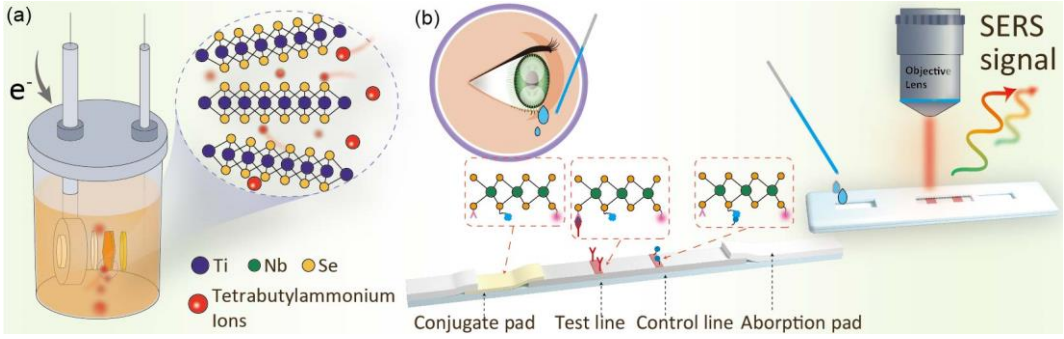


图1：(a) 电化学插层剥离制备二维$TiSe_2$，(b) 基于二维$NbSe_2$的侧向流免疫试纸用于泪液中MMP-9检测。

关键词：表面增强拉曼散射；二维材料；干眼炎症标记物

参考文献：

[1]. Lv, Q.; Tan, J.; Wang, Z.; Yu, L.; Liu, B.; Lin, J.; Li, J.; Huang, Z.-H.; Kang, F.; Lv, R., *Adv. Funct. Mater.* **2022**, *32* (34), 2200273.

[2]. Ge, Y.; Wang, H.; Li, Q.; Li, Q.; Yang, Y.; Zhu, R.; Yang, J.; Liu, X.; Zhang, Q.; Wang, Y., *Adv. Funct. Mater.* **2025**, *35*(20), 2420786.

基于动态表面增强拉曼光谱法的代谢轮廓描述：用于克服白念珠菌耐药性的新视角

李皓[1]，陆峰[2,*]

[1] 东南大学附属中大医院，南京市鼓楼区丁家桥 87 号，210009
[2] 海军军医大学，上海市国和路 325 号，200433

*Email: fenglu@smmu.edu.cn

抗真菌药物耐药性（Antifungal resistance, AFR）是导致侵袭性念珠菌病治疗失败的关键原因，而菌株的代谢重编程模式为理解这一现象提供了新视角。

鉴于传统研究手段在无损动态监测方面的局限性，本研究融合动态表面增强拉曼光谱（Dynamic surface-enhanced Raman spectroscopy, D-SERS）、机器学习（Machine learning, ML）算法及二维相关光谱（Two-dimensional correlation spectroscopy, 2DCOS），以描绘白念珠菌的代谢轮廓，深入解析其耐药演化过程，从而为开发新型抗真菌策略提供科学依据。

研究结果表明氟康唑敏感与不同耐药水平的白念珠菌得以成功区分，机器学习模型实现了95%的高分类准确率。同时，变量重要性投影分析筛选出次黄嘌呤HAT、腺嘌呤A和麦角固醇ERG作为2种表型的关键差异代谢物。进一步的2DCOS分析揭示了白念珠菌在抗真菌药物胁迫下的代谢重编程模式：优先调整HAT的表达，进而通过信号传导途径引发ERG的过表达，最终形成耐药表型。

本研究提出的方法融合分析逐步揭示白念珠菌耐药演化过程中的代谢模式变化，为真菌耐药机制研究提供了新的范式。同时也深化了我们对真菌代谢行为动态调整的理解。这些发现将有助于筛选靶向这些代谢途径的小分子药物，恢复真菌对抗真菌药物的敏感性，有望满足当前紧迫的临床需求。

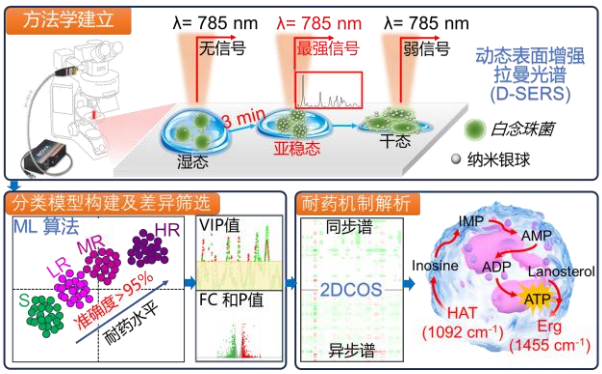


图1：D-SERS、ML与2DCOS的方法融合用于揭示白念珠菌耐药演化过程中的代谢重编程模式变化

关键词：抗真菌耐药；代谢重编程；动态表面增强拉曼光谱法；机器学习；二维相关光谱

基于无监督聚类的多部位临床结石拉曼光谱特征分析

朱婷婷[1]，易自力[1]，陈艾佳[1,2]，吴昌强[1,2]，李文雪[1,2]

（[1]川北医学院医学影像学院，四川省南充市高坪区东顺路55号，637100
[2]医学影像四川省重点实验室，四川省南充市高坪区东顺路55号，637100）

liwenxue@nsmc.edu.cn

摘要 为克服临床在利用红外光谱分析尿路结石时出现的重叠峰解析难、耗时长、且易受水干扰的难点。本研究首次提出多部位尿路结石拉曼光谱无监督聚类的新策略，采集肾、输尿管、前列腺、膀胱4个解剖部位共149条临床结石的拉曼光谱(200-2000 cm-1)，结合非线性降维(UMAP)与聚类算法，实现成分特征挖掘与分类模式解析。实验结果证实，UMAP-KMeans实现了最佳聚类效果(轮廓系数0.65，CH指数498.5)且聚类结果与结石成分呈现相关性。成分分析显示，草酸钙（COM/COD）、尿酸（UA）、羟基磷灰石（HAP）、鸟粪石（MAPH）的特征峰在各簇共存，但簇间强度差异是聚类分离的关键。在部位分布及光谱特征，下尿路结石富集于簇0，上尿路结石主导簇1，簇0峰强度高于簇1，反映了结石成分及比例与形成微环境的内在联系。本技术突破标注依赖瓶颈，为结石分型及病因分析提供高灵敏、低成本、非侵入性的技术路径。

关键词：拉曼光谱；无监督聚类；尿路结石；非线性降维；部位特异性

参考文献：

[1] 刘淑香.中西医结合治疗尿路结石的临床研究进展[J]. 天津药学, 2023, 35(05): 64-69.(Liu S X. Research Progress on the Clinical Treatment of Urinary Calculi by Integrated Traditional Chinese and Western Medicine [J]. Tianjin Pharmacy, 2023, 35 (5): 64-69. (in Chinese))

[2] Wesson, J. A., Worcester, E. M., Wiessner, J. H., Mandel, N. S., & Kleinman, J. G. (1998). Control of calcium oxalate crystal structure and cell adherence by urinary macromolecules. Kidney international, 53(4), 952–957.

[3] 贾志. 泌尿系结石研究现况与展望[J]. 饮食保健, 2019, 6(51): 299.(Jia Z. Current Situation and Prospect of Urologic Calculi Research [J]. Diet Health, 2019, 6 (51): 299. (in Chinese))

[4] 张锐,于书画. 红外光谱法定性分析尿路结石成分326例[J].中国校医,2012,26(05):380-381.(Zhang R, Yu S H. Qualitative Analysis of 326 Urinary Calculi Components by Infrared Spectroscopy [J]. Chinese Journal of School Doctor, 2012, 26 (5): 380-381. (in Chinese))

[5] 邹文博,尹利辉,胡昌勤. 拉曼光谱与近红外光谱技术在药品快速分析中的应用[J].中国药房,2018,29(03):416-420.(Zou W B, Yin L H, Hu C Q. Application of Raman Spectroscopy and Near-Infrared Spectroscopy Technologies in Rapid Drug Analysis [J]. China Pharmacy, 2018, 29 (3): 416-420. (in Chinese))

光镊悬浮气溶胶微液滴的自发-受激拉曼信号空间分辨成像研究

刘雨昕，黄保坤，黄启燊，刘湃，张韫宏*

摘要：针对经典的气溶胶光镊无法观测悬浮液滴空间分辨，导致对液滴空间结构、物料分布等难以预测的问题，本文通过对光镊信号采集模块的改进，建立了光镊悬浮单液滴空间分辨共焦拉曼测量方法，能获得悬浮单液滴中心截面（即物镜的焦平面）上的自发拉曼和受激拉曼的高空间分辨图像。当液滴中心截面的拉曼信号经过光谱仪狭缝时，与狭缝方向对应的液滴焦平面的径向空间分辨拉曼信号就会投射到光谱仪的 CCD 上，由此获得液滴径向空间分辨的拉曼信号。进一步通过旋转控制台控制狭缝上的中间像向左（右）精准移动固定步长的距离，即得到该焦平面偏离球心一个空间步长的弦的空间分辨拉曼信号。操作旋转控制台连续步进扫描整个液滴的焦平面，对所得空间分辨数据进行重构，即可得到液滴中心截面的空间分辨拉曼信号。本文报道液滴受激拉曼和自发拉曼的空间分辨图像，分析液滴内不同回音壁模式受激拉曼信号的空间分辨特征。

关键词：光镊；气溶胶；空间分辨；受激拉曼成像

基金项目：国家自然科学基金仪器项目（42127806）
作者简介：刘雨昕（1996 年生），博士研究生，主要从事气溶胶光镊仪器开发和气溶胶反应动力学测量方面的研究。
通讯作者：张韫宏（1964 年生），教授、博士生导师，主要从事光谱分析和气溶胶光镊技术方面的研究。
E-mail：yhz@bit.edu.cn

光镊-共聚焦显微技术对微液滴空间分辨拉曼成像

尹佳艺[1]，张晓武[1]，黄保坤[2]，黄启燊[1]，刘湃[1]，张韫宏[1,*]

[1]北京理工大学，北京市海淀区中关村南大街五号，100081
[2]江苏海洋大学，江苏省连云港市海州区苍梧路 59 号，222005

*Email:yhz@bit.edu.cn

光镊-共聚焦显微技术，是观测悬浮单液滴空间分辨拉曼光谱的有效手段。本文通过自主设计搭建的小型集成化光镊-共聚焦显微拉曼系统（Optwee 100），来研究液滴内部的自发拉曼和受激拉曼信号的强度分布。微液滴的受激拉曼信号，是特定波长的拉曼信号在液滴内腔共振形成的回音壁模式，具有很强的空间分辨特性和很窄的峰宽，是测量单液滴空间分辨的高效的观测对象。本文中对恒湿条件下的硫酸铵微液滴的空间分辨拉曼信号进行了空间分辨观测和回音壁模式计算指认，得到了液滴的精确半径和折射率，分析了系列回音壁模式（P_l^n）不同模态（P=TE和P=TM）、模数（n）和模阶（l）的分布、峰宽和强度分布特征。讨论了激光功率对悬浮液滴空间分辨观测的影响，通过对受激拉曼信号的拟合，实验中得到的空间分辨率最高可以达到约802 nm，光谱分辨率最高达到1.40 cm^{-1}。这种高品质的悬浮单液滴光谱测量仪的搭建，开辟了一个崭新的单液滴测量学新领地。

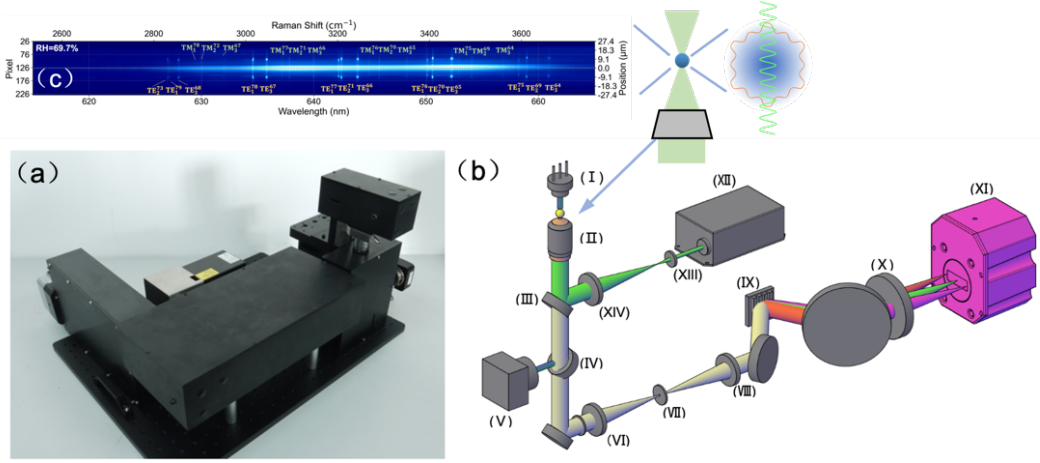


图1：（a）集成化光镊系统实物图（b）集成化光镊系统原理图（c）硫酸铵液滴的自发和受激拉曼信号图像

关键词：空间分辨成像，集成化光镊，受激拉曼，拉曼光谱

纳米酶基光学传感器在食品安全检测中的应用

王利华[1,*]，高梦月[1]，胡继明[2,*]

[1] 武汉市农业科学院，湖北武汉，430072
[2] 武汉大学，湖北武汉，430072

*Email: wanglihua19850116@126.com

重金属、食源性致病菌作为食品、农产品中常见的风险因子，具有感染剂量低、危害大等特点，对消费者生命健康具有重大威胁，实现其快速、高灵敏检测对于保障食品安全具有重要意义。纳米酶，具有类似天然酶的活性。其与天然酶相比，具有更高的稳定性、更灵活的结构与组成设计以及可调的催化活性等，在食品安全快速检测中具有很好的应用前景。无标记SERS稳定性高、重现性好，非常适合致病菌的快速检测。然而，其灵敏度比较低，在实际样检测中应用受限。鉴于此，我们首先设计合成了具有催化信号放大和SERS双重功能的纳米酶——Au@超薄Pt。其中，超薄的铂壳层（约1 nm）能够将无拉曼活性的底物TMB催化为具有拉曼活性的TMB氧化物（oxTMB），显著提高检测体系中拉曼信号分子的数量；同时，核结构的纳米金（约40 nm）作为SERS基底，能够进一步原位增强oxTMB的信号，进而显著提高检测灵敏度。我们将这一双功能纳米酶与磁分离技术结合构建了夹心法免疫传感器，借助便携式拉曼光谱仪实现了沙门氏菌的高灵敏快速检测[1]。该传感器具有很好的选择性，可检测低至10 CFU/mL的沙门氏菌标准溶液，在牛奶等实际样检测中也表现出了很好的应用效果。

此外，基于重金属离子对纳米酶活性的调控作用（增强或抑制）以及比色法在快速检测中的优势，我们进一步开展了纳米酶基重金属Cr^{6+}比色法研究。通过缩小上述材料中的纳米金尺寸，我们进一步合成了具有优良类过氧化物酶活性的纳米酶（其中纳米金粒径约15 nm，铂层约1 nm）。使用重金属Cr^{6+}对该材料类过氧化物酶活性的选择性抑制作用[2]，构建了一种快速、高灵敏的Cr^{6+}比色检测方案。另外，通过Cl^-介导的界面工程策略，有效提高了二维Cu-MOFs纳米片对底物TMB和Cr^{6+}的亲和力，进而显著增强了二维Cu-MOFs纳米片的类氧化还原酶活性[3]，由此构建了一种可用于自来水、东湖水、牛奶、大米、糙米等样本中Cr^{6+}快速、简便、准确、高灵敏检测的新方案。

关键词： 纳米酶；SERS；比色；食源性致病菌；重金属

参考文献：

[1] Li, Z.; Li, X.; Lin, Q.; Wang, L. *et al. Sens. Actuators B Chem.* **2024**, *418*, 136341.
[2] Zhou, T.; Lin, J.; Jin, F.; Wang, L. *et al. Anal. Methods* **2024**, *16*, 7502.
[3] Li, Z.; Hu, J.; Zhan, Y.; Wang, L. *et al. Anal. Chem.* **2023**, *95*, 6417.

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

原位拉曼光谱技术在电催化二氧化碳还原界面研究中的应用

谢泽中[1,*]，杨荣戈[1]，张静楠[1]，李明阳[1,*]，陈建[1,*]，童叶翔[1]

[1] 中山大学分析测试中心，中山大学化学学院，中山大学化学工程与技术学院，广东省广州市新港西路 135 号，510275

*Email: xiezzh6@mail.sysu.edu.cn

电催化二氧化碳还原反应（CO_2RR）作为实现“碳中和”目标和可持续能源转化的关键技术，在常温转化二氧化碳（CO_2）为高附加值化学品领域展现出巨大潜力。CO_2RR过程复杂，其反应速率和选择性受到催化反应界面处的催化剂、反应物、电解液等多种因素的影响。深入研究CO_2RR过程的催化反应界面，揭示界面特性与CO_2RR性能之间的构效关系，对CO_2RR反应机理的理解以及新型高效CO_2RR催化剂的设计具有重要意义。

本研究基于原位拉曼光谱技术，聚焦反应界面处的局部pH以及CO_2传质，系统研究了局部pH原位检测、气体扩散电极（GDE）三相界面原位分析等关键科学问题。首先，创新性地开发具备宽pH检测范围的侧向型表面增强拉曼光谱（L-SERS）系统，实现对CO_2RR过程的原位局部pH成像和时间分辨研究，直观地证明在酸性K_2SO_4电解液中可实现较高的局部pH，并通过CO_2RR性能测试和$CuO_x/(OH)_y$物种的原位拉曼光谱分析进一步得到验证。其次，制备有别于传统易碎碳纸基GDE的新型柔性GDE，该GDE具备由绒毛状氧化物衍生铜纳米线构成的仿生疏水表面，可构建直观且便于原位研究的三相界面。借助原位3D拉曼成像技术，实现CO_2RR过程中界面空间分布的原位可视化，并通过分析微环境物种的演变过程，揭示了该三相界面区域能够同时实现较高的局部pH值和高效的CO_2传质。该研究为催化界面微环境的演变提供重要理论依据，也为新型催化剂和催化反应器的设计提供指导方向。

关键词： 原位拉曼光谱；电催化；二氧化碳还原；界面研究

反应型 SERS 传感策略构建及在快速检测中的应用

许光达*

[1]沈阳药科大学，沈阳市文化路 103 号，110016

*Email:xuguangda@syphu.edu.cn

表面增强拉曼散射（SERS）光谱凭借其极高的检测灵敏度、独特的光谱指纹识别能力和抗光漂白性，已成为痕量物质分析的有力工具。传统的SERS传感主要依赖目标物在纳米基底上的物理和化学吸附，其灵敏度和特异性常受限于吸附效率及复杂基质干扰。反应型SERS传感策略通过巧妙设计目标物触发的特异性化学反应，原位生成或转化出具有强SERS信号的报告分子，实现了检测性能的提升，在快速检测领域展现出巨大潜力。本报告基于化学反应中常见的配位反应、氧化还原反应、席夫碱反应和点击反应等，实现了Fe^{2+}、Hg^{2+}、Cr^{6+}、N_2H_4、半胱氨酸和总抗氧化能力的快速检测。

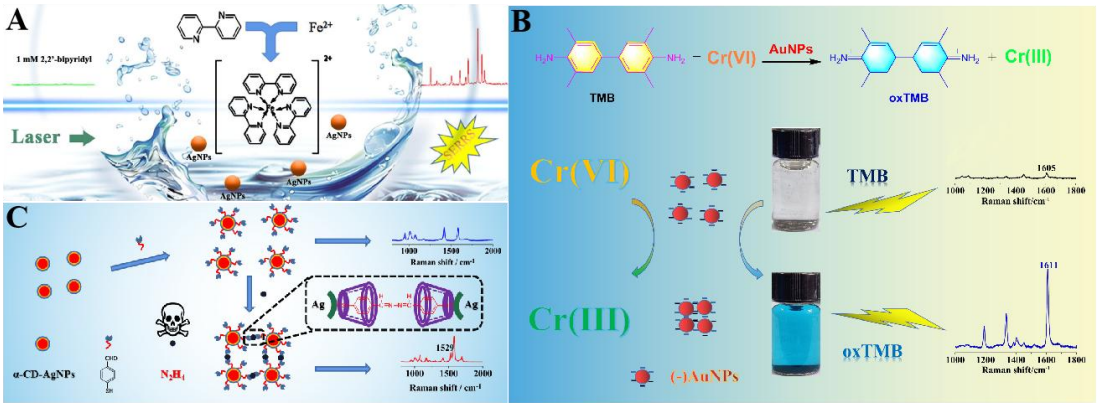


图 1：SERS 传感器检测 Fe^{2+}（A）、Cr^{6+}（B）和 N_2H_4（C）原理示意图

关键词：SERS；反应型策略；快速检测

参考文献：

[1] **Xu, G. D.;** Yang, G. Q.; Wang, Y. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 14082–14088.
[2] **Xu, G. D.;** Li, N.; Sun, Y. et al. *Chem. Eng. J.* **2021**, *414*, 128741.
[3] **Xu, G. D.;** Guo, N.; Zhang, Q. J. et al. *J. Hazard. Mater.* **2022**, *424*, 127303.
[4] **Xu, G. D.;** Guo, N.; Zhang, Q. J.; et al. *Sci. Total. Environ.* **2022**, *830*, 154598.
[5] **Xu, G. D.;** Song, P.; Xia, L. *Talanta* **2024**, *270*, 125554.

从 alpha 300R 到 witec360：传承与突破

钱诚 牛津仪器应用科学家

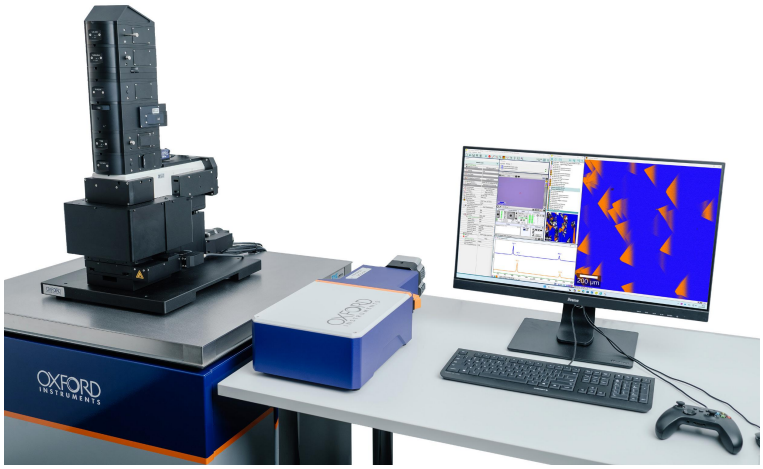
[1] 牛津仪器科技（上海）有限公司，中国上海市虹漕路 461 号 60 幢 1 楼，200233

*Email: cheng.qian@oxinst.com

拉曼光谱作为一种研究分子振动的重要光谱方法在物理、化学、材料、生物等众多领域发挥着重要的作用。随着科研发展和拉曼技术应用场景的不断变化，使用者对于拉曼设备的适用性、扩展性、灵敏度、易用性等方面有着越来越高的需求。今年9月，牛津仪器正式发布了全新的witec360共聚焦拉曼显微镜，将为各学科科研人员带来全新的使用体验。

作为牛津仪器在共聚焦拉曼显微领域的集大成之作，witec360 并非凭空而来，而是根植于其经典机型 alpha 300R 的深厚技术积淀。它继承了 alpha 300R 在高分辨率、高灵敏度、高共聚焦性能和扩展性上的卓越基因，延续了其在材料科学、生命科学和工业研发等领域提供无损、无标记、多功能共聚焦光谱成像的核心优势。然而，witec360 更是一次全面的革新与飞跃。其核心搭载了革命性的 Hexalight 光谱仪，实现350-1100nm范围全谱段高灵敏度、高光谱分辨率的光谱测试，配合进一步优化的共聚焦拉曼光路组件，实现了全谱段速度、灵敏度和光谱分辨率的同步提升。更重要的是，它将“关联成像”理念推向新高度，可集成AFM、PL、SHG、SNOM 乃至SEM-Raman联用技术，在同一平台、同一位置实现多维度数据的关联分析，为复杂样品研究提供了前所未有的综合洞察力。

witec360共聚焦拉曼显微镜，继承了alpha 300R的卓越基因，依靠技术突破带来性能的全面提升，更好得支持用户的多样化需求。



图：witec360 共聚焦拉曼显微镜

关键词： witec360；宽谱段高通量光谱仪；共聚焦拉曼显微镜；多模态；

基于光电色谱法与计算机色彩管理的文物保护修复测配色方法研究

刘晓清[1]，王阳[2]，甘欣欣[3]，张欢[1,*]

广东省博物馆（广州鲁迅纪念馆），广州市天河区珠江东路 2 号，510623

*Email: 19673713@qq.com

文物保护修复工作中，色彩精准测配至关重要。传统人工测配色方法在处理大体量不可移动文物时，效率低且误差较大。光电色谱法因其可精确测量物体表面光谱反射率而具有独特优势。计算机色彩管理通过构建色彩数据库和模型，能实现色彩信息的数字化存储、模拟计算与再现，确保色彩数据的一致性、稳定性和可追溯性。将二者结合，用于文物测配色，可显著提高准确性和效率，为文物保护修复工作提供有力支持。

关键词：光电色谱法；计算机色彩管理；文物保护修复；测配色

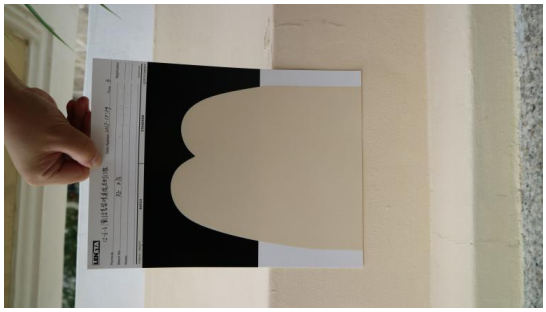


图 1 圣若瑟修院圣堂测配色比对图

Fig.1 Color-matching comparison diagram of St. Joseph's convent and the church

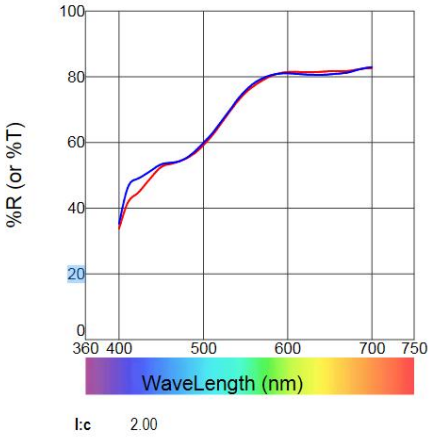


图 2 澳门圣若瑟修院圣堂门柱的目标色（红色曲线）和配色（蓝色曲线）光谱反射率曲线

Fig.2 Spectral reflectance curves of the target color (red curve) and matched color (blue curve) for St. Joseph's convent and the church, Macau

烷烃功能化的 SERS 基底用于合成大麻素整类管控

周静雯[1]，张月皎[2,*]，李剑锋[1,2,*]

[1] 厦门大学生命科学学院，福建省厦门市思明南路 422 号，361005
2 厦门大学能源学院，福建省厦门市思明南路 422 号，361005

*Email: zhangyuejiao@xmu.edu.cn, Li@xmu.edu.cn

合成大麻素作为一类新精神活性物质，其化学结构常被人为修饰以规避法律监管。然而，由于对其药理作用缺乏了解，合成大麻素的滥用会带来严重的健康风险。此外，新型精神活性物质的快速涌现，已远超有效监管工具的研发速度。为应对这些挑战，本研究基于合成大麻素共有的分子骨架，开发了一种用于其整类管控的表面增强拉曼散射（SERS）检测方法。研究设计了一种疏水功能化 SERS 基底，通过整合表面状态调控策略与溶剂蒸发效应，实现了对目标分子的高效捕获与富集，检测限可达 0.1 μg/mL。针对电子烟液复杂基质，根据目标分子的理化性质优化了液-液微萃取方法。经优化后，电子烟液中合成大麻素的检测限达到 5 μg/mL，且整个检测过程可在 2 分钟内完成。该方法为合成大麻素的整类管控提供了一种新颖且有效的解决方案，在药物滥用预防、公共安全监测及监管执法等领域具有重要的应用潜力。

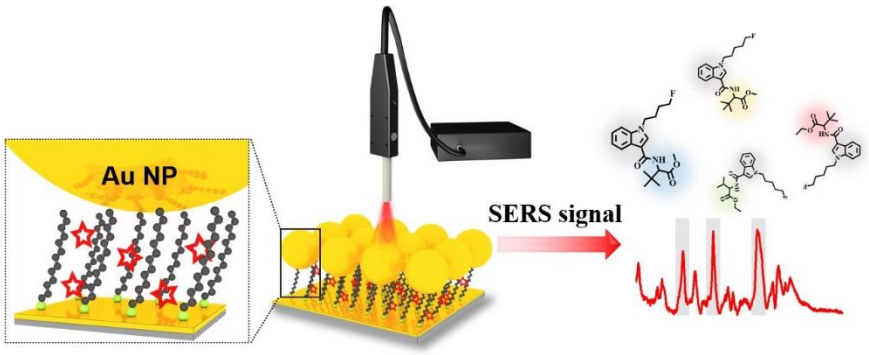


图1：功能化SERS基底检测目标分子的示意图

关键词：SERS；整类管控；合成大麻素；电子烟液

参考文献：

[1] Cannaert, A.; Franz, F.; Auwärter, V.; et al. Anal. Chem. 2017, 89, 9527−9536.
[2] Yen, Y. T.; Chang, Y. J.; Tseng, Y. T.; et al. Sens. Actuators, B 2022, 353, 131151.

机器学习辅助下的拉曼光谱：蛋白质分析新工具

郭景星 [1,*]，谢浩 [1]，鞠熀先 [2]，周清清 [3]，卢光明 [3]

[1] 武汉理工大学，化学化工与生命科学学院，珞狮路 122 号，武汉，430070

[2] 南京大学，化学化工学院，仙林大道 163 号，南京，210023

[3] 东部战区总医院，放射诊断科，中山东路 305 号，南京，210000

*Email: jxguo@whut.edu.cn

蛋白质作为生物体内重要的生物大分子，其组成、含量、结构和生物活性与诸多生理活动密切相关。目前，诸如荧光标记、质谱、核磁共振等技术已被用于蛋白质分析，但是仍存在需外源性标记、对样品有破坏性以及受限于蛋白质分子量等缺点。拉曼光谱是一种极具代表性的分子结构表征技术，而且在分析蛋白质时具有无需标记、非破坏性、不受分子量和样品状态限制等优势。但是，该技术的主要应用对象仍是小分子，主要原因是蛋白质复杂的组成和结构，导致其拉曼光谱信号难以解析。为了解决上述问题，本工作开发了可解析蛋白质信号的机器学习算法，实现了多种蛋白质分子的原位、实时分析，其中包括：（1）脑胶质瘤组织中PD-L1蛋白的免标记成像，进而实现了胶质瘤的快速分子分型诊断；（2）实际样本中多种目标物的浓度预测，有望实现体液样本中多种蛋白组分的同时定量；（3）抗菌肽与磷脂膜之间的相互作用分析，进而揭露了此类多肽的杀菌机制。总之，本工作证明了在人工智能技术的辅助下，拉曼光谱可以高效实现蛋白质的含量检测和结构分析，有潜力成为研究蛋白质的强大工具。

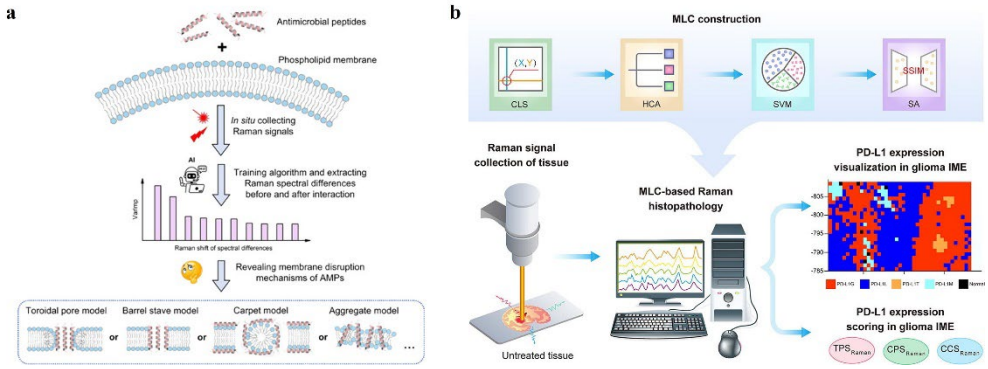


图1：“拉曼光谱 + 机器学习”用于（a）抗菌肽的膜扰动机制分析以及（b）胶质瘤分子分型诊断。

关键词：拉曼光谱；机器学习；蛋白质；含量检测；结构分析

参考文献：

[1] Zhou, Q. Q.; Guo, J. X.; Wang, Z. Y. et al. *J. Adv. Res.* **2024**, *65*, 257-271.

[2] Zhu L. J.; Li, J. R.; Pan, J. et al. *Adv. Sci.* **2024**, *11*, 2401014.

[3] Chao, L; Zhou, Q. Q.; Yu, T. et al. *J. Chem. Inf. Model.* **2025**, *65*, 8603-8613

超薄金属有机骨架包覆金纳米结构用于食品中抗生素的快速检测

高梦月[1,*]，王利华[1]，何婷[1]，胡继明[2,*]

[1]武汉市农业科学院，湖北武汉，436072
[2]武汉大学，湖北武汉，436072

*Email: mengyuegao@163.com, Jiminghu@163.com

食品中抗生素残留问题日益严峻，建立快速、可靠的检测方法已成为保障食品安全的当务之急。表面增强拉曼光谱（SERS）以其独特的指纹图谱特性和尖锐的峰形在抗生素检测中展现出高特异性、高灵敏度和高通量的优势。然而，SERS技术的实际应用仍面临挑战：一是食品基质复杂，会产生强烈的基质效应（ME），干扰检测准确性的同时，也会降低SERS基底的稳定性；二是SERS增强效应仅发生在靠近SERS基底表面5 nm以内区域，这也限制了对那些与基底作用力弱或无作用力的抗生素的检测。针对上述挑战，本项目开发了两种基于固相萃取-表面增强拉曼散射（SPE-SERS）的抗生素残留快速检测方法。首先，本项目开发了一种层层自组装方法，分别在金纳米颗粒（Au NPs）表面成功包覆厚度为3 nm的超薄Cr-MIL-101和Cr-MIL-101-NH2壳层，制备了粒径均一、壳层厚度可控的Au@Cr-MIL-101 NPs和Au@Cr-MIL-101-NH2 NPs。Cr-MIL-101和Cr-MIL-101-NH_2壳层均为优异的SPE吸附剂，可将目标抗生素富集到Au NPs的LSPR场内，从而增强目标抗生素的SERS信号。此外，壳层还可以作为保护层，确保Au NPs在恶劣环境中依然保持高效的SERS性能。最后，对上述两种方法进行了基质效应、重现性、回收率等指标的评估验证。结果表明，两种方法均具有良好的检测性能，操作简便，集前处理与检测为一体，非常适用于食品中抗生素残留的现场、快速、高通量检测。

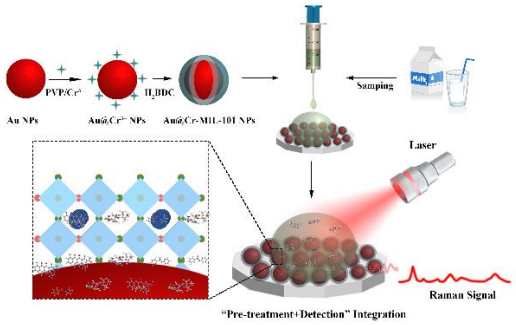


图1： Illustration for SPE-SERS detection of antibiotics in milk

关键词： SPE-SERS；抗生素；乳制品；Au@MOFs NPs

参考文献：

[1] Gao, M. Y.; Chen, Q; Li Z. H.; et. al. *Food. Chemical.* **2025**, *465*, 141949.

用于汗液分析的可穿戴有机半导体纤维 SERS 基底

吴帆[1,*]，史浩雨[1]，高玉龙[1]，樊威[1,*]

[1] 西安工程大学纺织科学与工程学院功能性纺织材料及制品教育部重点实验室，陕西西安，710048

*Email: fan.wu@xpu.edu.cn, fanwei@xpu.edu.cn

针对人体汗液的长期性、稳定性、便携式和舒适性监测需求，设计开发了基于有机半导体纤维的可穿戴柔性表面增强拉曼散射（SERS）织物。首先，利用湿法纺丝技术制备了聚(3,4-亚乙二氧基噻吩)-聚(苯乙烯磺酸)/聚乙烯醇（PEDOT:PSS/PVA）纤维，然后结合银纳米线（Ag NWs）后整理纤维技术和织物结构设计，构建有机半导体SERS织物实现对汗液成分的高性能检测。结果表明：当PEDOT:PSS与PVA的重量比为4:1时，纤维兼具优异的力学性能和SERS性能。其中，应力为32.1 MPa，应变为54.3 %，对罗丹明6G分子的检测限为10^{-11} M，拉曼增强因子达到2.16 × 10^6，同时具备良好的信号稳定性（RSD=9.7%）、良好的时间稳定性（> 1年）以及分子选择性识别能力。通过银纳米线后整理纤维技术制备得到Ag NWs@PEDOT:PSS/PVA复合纤维，能够实现对10-160 μM的尿酸分子的检测。此外，对复合纤维进行4-巯基苯硼酸官能化处理后，能够检测10 μM-10 mM的葡萄糖分子。以上对葡萄糖和尿酸的检测限均达到目前报道中的最低水平，而且复合纤维的抗干扰汗液检测能力强。最后，以Ag NWs@PEDOT:PSS/PVA复合纤维作为纬长丝，与商用棉纱织成的织物具有良好的服用性能。其中，透气性（216.5 mm/s）和透湿性（1705 g/m²·24h）均与商用棉织物相当，同时织物具有良好的悬垂性。将织物应用于真实人体的汗液分析，显示其与商用设备测量结果具有良好的相关性，扩展了柔性纤维SERS技术在真实人体健康监测领域的实际应用。

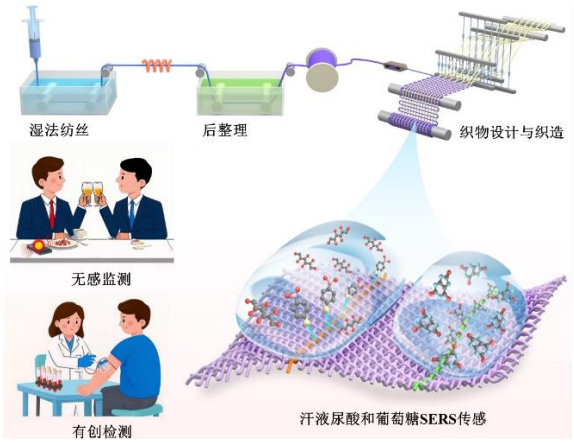


图 1：可穿戴有机半导体纤维 SERS 基底的制备与应用示意图

关键词： PEDOT:PSS纤维；表面增强拉曼散射；汗液分析；可穿戴传感

参考文献：

[1] Mallika, B.; Nyein, H. Y. Y.; Javey, A. *Nat. Electron.* **2018**, *1*, 160-171.
[2] Hu, M.; Zhu, K.; Wei, J. et al. *Biosens. Bioelectron.* **2024**, *265*, 116662.

基于自适应高通量变焦拉曼光谱的无创血糖检测方法研究

管志强[1,*]，李景涛[1]，徐红星[2]

[1]河南省科学院半导体研究所，河南省郑州市郑东新区汉月街26号中原量子谷，450007
[2]河南省科学院，河南省郑州市郑东新区明理路，450046

*Email: gzq@hnas.ac.cn

随着我国人口老龄化进程的加速，糖尿病防治形势日趋严峻。血糖监测作为糖尿病管理的关键环节，现有主流检测手段仍存在诸多局限：有创检测方法（如全自动生化分析仪与指尖采血血糖仪）不仅带来疼痛与潜在感染风险，其数据离散性也导致日间血糖波动常被低估；连续动态血糖仪虽属微创，但仍存在传感器易污染、长期准确性下降、需反复植入与校准以及使用成本高等问题。拉曼光谱无创血糖检测技术因其非侵入、无痛、无耗材及可多人共用等优势，展现出良好的应用前景。本研究提出一种自适应高通量变焦拉曼光谱无创血糖检测方法，通过自动识别并聚焦至血管区域血糖信号最强且最均匀处，实现了较高的葡萄糖检测灵敏度与个体适应能力。在0~10 mmol/L浓度范围内连续变化的葡萄糖水溶液实验中，拉曼特征峰强度随浓度呈现规律性变化；在牛血清溶液的葡萄糖浓度检测中，该方法显示出极低的平均相对误差。进一步的人体血糖监测试验表明，基于拉曼光谱的葡萄糖浓度动态监测结果及其误差网络分析，与国内外指血仪检测效果相当。

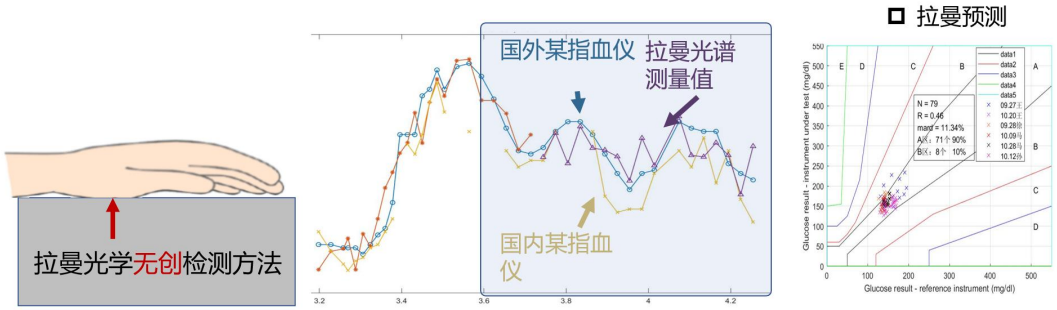


图1：人体环境拉曼光学无创检测方法得到的葡萄糖浓度随时间变化和浓度误差网络分析。

关键词：拉曼光谱；无创血糖检测；自适应变焦

准二维卤化物钙钛矿在高压下的结构和光电性能研究

张华芳[1]，崔红[1]，程玲莹[1]，毛艳丽[1,*]

[1]河南大学物理与电子学院，河南省开封市河南大学金明校区，475004

*Email: ylmao@henu.edu.cn

近年来，准二维钙钛矿因具有稳定性高、光吸收能力强等优异的光电特性，在光电子领域具有广阔的应用前景。然而，由于有机大分子层的插入使其带隙增大，影响了钙钛矿器件的性能。我们采用高压技术对准二维钙钛矿材料的结构与光电性能进行了研究。研究发现，$BA_2FASn_2I_7$的带隙在加压后显著减小，在4.0 GPa时减小到1.34 eV，达到肖克利-奎伊瑟极限（Shockley-Queisser limit）。随着压力进一步增加到4.0 GPa以上，带隙开始增大。卸压后，由于结构重结晶，减小的带隙仍然部分保留，且样品的荧光强度和常压相比有大概1.57倍的提升。进一步分析表明，在0.0 - 4.0 GPa范围内带隙的持续变窄主要是由于样品先后发生了层间压缩和层内压缩，有效提高了$[SnI_6]^{4-}$八面体的变形压力。此外，通过在高压下的原位电学测试中，我们发现钙钛矿$BA_2FASn_2I_7$在405 nm、450 nm、980 nm和1532 nm激光下有明显响应，光响应范围扩展到近红外区域。通过施加压力，我们有效调控了准二维钙钛矿的带隙、增强了光电性能、拓展了响应范围，并为设计性能更优的材料开辟了一条可选路径。

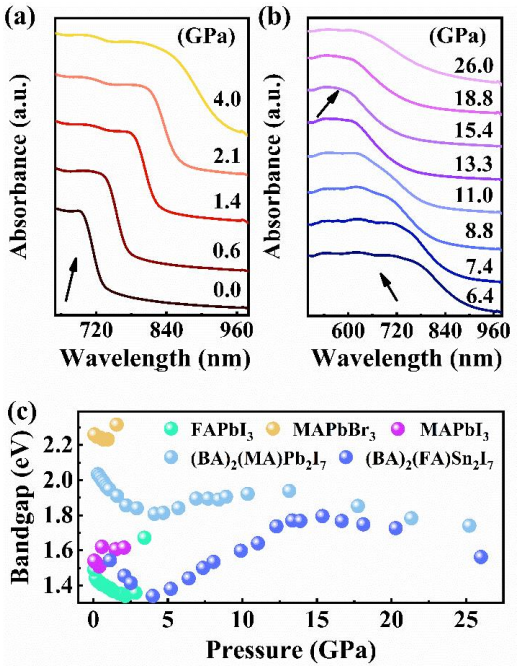


图 1：（a）0 ~ 4.0 GPa 和(b) 6.4 ~ 26.0 GPa 范围内的吸收光谱，(c)不同类型钙钛矿的带隙与压力的关系

关键词：准二维钙钛矿；高压；光电；带隙

LSPR热电子注入与异质结电荷分离协同效应增强Au@CdS/CdSe的光催化活性

李佳

贵州大学

本研究成功设计并合成了具有等离激元增强效应的 Au@CdS/CdSe 核壳纳米结构。该结构以金纳米颗粒（Au NP）为核，外覆 CdS/CdSe 半导体异质结壳层，旨在协同利用 Au 核的局域表面等离子体共振（LSPR）效应与半导体壳层的光催化活性。实验结果表明：Au 核在可见光区（约 520–600 nm）的强 LSPR 效应显著增强了壳层半导体的光吸收能力，并拓宽了光谱响应范围； LSPR 诱导产生的热电子可高效注入 CdS 导带，并通过 CdS/CdSe 异质结界面实现光生载流子的空间分离，有效抑制电子-空穴复合； 在光解水产氢中，Au@CdS/CdSe 相较于单一或双组分半导体（CdS, CdSe, CdS/CdSe）表现出显著增强的催化活性与

稳定性，归因于等离激元能量转移与异质结协同优化。

本工作证实了贵金属/半导体核壳结构在光捕获和载流子动力学调控中的重要作用，为设计高效等离激元增强型光催化剂提供了新思路。

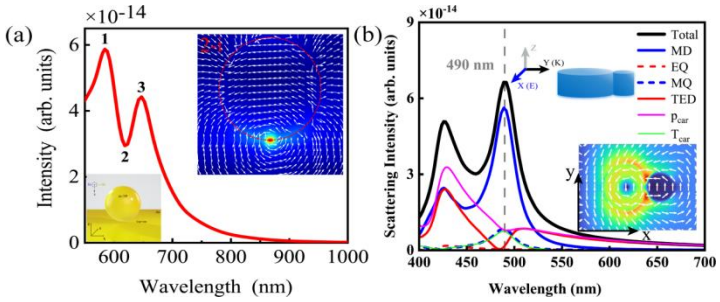
磁共振模式光学腔的应用

李泽[1]

内蒙古大学物理科学与技术学院，内蒙古自治区呼和浩特市赛罕区大学西街 235 号，010021

*Email: li@imu.edu.cn

构筑高效磁共振散射及增强体系是纳米光子学领域精准调控物质-光磁场相互作用的核心。本研究通过两种纳米结构实现理想磁共振散射与增强：在纳米粒子-镜面构型中（图 a 插图），1 nm 间隙的等离激元纳米腔激发多共振模式，环形电力线在间隙中心引入磁偶极子（图 a 插图），磁增强因子最高可达 100。进一步通过引入对称性破缺，促使优势电四极（Qe）模式与磁偶极（m）模式间产生显著磁基法诺共振，有效抑制电偶极模式的辐射过程（图 a）。当在间隙区域主动放置磁偶极子时，辐射磁 Purcell 因子可提升至 200 。在低损耗的非磁性硅纳米粒子二聚体体系中（图 b 插图），在平面波照射下，笛卡尔电偶极和电环形偶极的破坏性干涉抑制球极电偶极响应，生成非辐射(Anapole)模式，实现磁偶极与磁四级重叠的理想磁共振散射（图 b），其磁模式纯度因子（δMag）可达 0.99 以上。上述多元纳米结构体系（镜上纳米结构、硅纳米颗粒二聚体）的磁共振响应，在可见光波段具备可调控特性，且与现代纳米加工技术兼容适配，为单光子发射源构建、高效光捕获器件研发等量子纳米光子学应用全新研究思路。



(a) 镜面纳米颗粒（NPOM）系统的模拟远场散射光谱。插图显示了镜面纳米颗粒（NPOM）的示意图。以及对应于 618nm 处 XZ 平面中的磁场 H 分布。(b) 不对称硅纳米盘二聚体的散射截面和球多极展开模拟。垂直虚线标示了磁偶极（MD）和磁四极（MQ）模式的共振波长。插图显示了在 490 纳米时 XY 平面上的电场分布，叠加了电位移矢量以突出模式特征。

关键词：磁共振散射；法诺共振；Anapole 模式；纳米光子学；光-物质相互作用

参考文献：

[1] Z. Li, Y. Li, Q. You, M. Wang, C. Zhu, Y. Yang, H. Luan, and P. Wang, Magnetic Purcell enhancement by plasmon-induced magnetic resonance of the nanoparticle-on-mirror configuration, Phys Rev A 2024,110, 013516.

[2]S. Chen, Y. Zhang, T. M. Shih, W. Yang, S. Hu, X. Hu, J. Li, B.Ren, B. Mao, Z. Yang, and Z.Tian, Plasmon-induced magnetic resonance enhanced Raman spectroscopy, Nano Lett. 2018,18, 2209.

金属平膜等离激元表面增强热点的定量按需设计与绝对近场直接测量

薛啸天[1*]，赵鉴侨[1]，王炜鹏[1]，张政军[1]

[1]清华大学材料学院，北京市海淀区双清路30号，100084

*Email: xxt@tsinghua.edu.cn

表面等离极化激元（SPPs）可在亚波长尺度高效约束并增强电磁能量，是表面增强拉曼散射等应用的重要基础。然而，灵活且精确调控近场能量分布的策略仍然稀缺。本文结合等离激元波函数的定量按需设计与绝对近场直接测量，构建系统化框架，实现零维、一维和二维等离激元热点的可控构建。通过在金薄膜上精确排布亚波长纳米空腔，调控SPP波干涉以获得高度局域化的近场模式。该方法为芯片级等离激元场塑形提供有效途径，并在能量采集、催化、光学捕获及纳米光热调控等领域具备应用潜力。

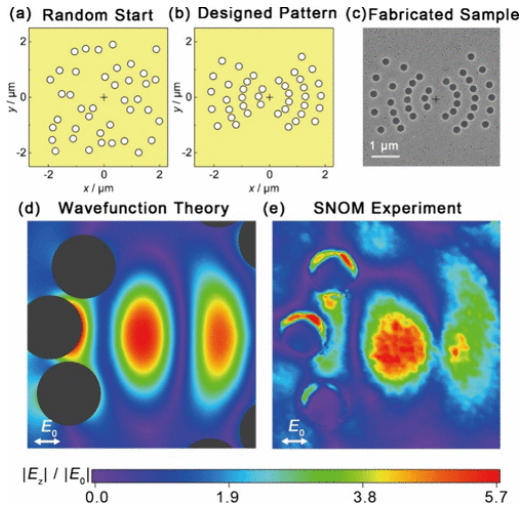


图1：设计所得的等离激元热点及其近场光学显微镜定量测量实验结果[1]

关键词：表面等离极化激元；金属薄膜孔阵列；多体耦合；波函数干涉；电磁热点

参考文献：

[1] Xue, X.; Fan, Y.; Zhao, J.; et al. *Nano Letters.* **2024**, 24, 11859.

高压下低维有机无机杂化金属卤化物的光学性质研究

付瑞净[1]，曾庆光[1*]，肖冠军[2*]

1.五邑大学应用物理与材料学院，广东江门，529020.
2 吉林大学高压与超硬材料国家重点实验室，吉林长春，130012.
*Email: zengqg1979@126.com ;xguanjun@jlu.edu.cn

摘要：近年来，低维铅基有机无机金属卤化物晶体在结构上具有较强的量子限域特性、较高的稳定性和较大的可调控性，使其受到了科研人员的广泛关注。深入研究晶体结构与发光行为之间的内在联系并有效调控其发光性能已经成为低维金属卤化物材料研究领域亟待解决的关键科学问题高压作为调控晶体结构和电子结构的有效手段，已经被证实可以用于诱导材料产生优异的光学性质。基于此，我们通过引入具有空间位阻和弹簧效应的复杂构型的有机阳离子，成功地实现了对二维钙钛矿$(PEA)_2PbCl_4$纳米晶在高压下的发射增强和暖白光（4403 K）到冷白光（14295 K）色温的非掺杂调控，并且卸压后光学性质和结构不可逆。[1] 此外，我们利用压强处理工程调控了具有独特的八面体边共享的一维后钙钛矿(TDMP) $PbBr_4$荧光，实现了从冷白光到黄橙色的颜色可调发射。[2]进一步又通过利用高压和Mn^{2+}掺杂协同效应，在Mn^{2+}掺杂(TDMP)$PbBr_4$中实现了红色到黄色的发射可调。[3]在此基础上，通过压力工程实现了零维有机-无机杂化锰基卤化物$(C_{24}H_{20}P)_2MnBr_4$从绿色（521 nm）到红色（574 nm）的荧光发射颜色调节，同时实现了1.09 eV的不可逆带隙变窄现象，是迄今为止报道的Mn基卤化物中最大的带隙变化值[4]。这些结果不仅加深了对低维有机-无机杂化物材料发光机制的理解，也为设计新型光电材料提供了新视角。

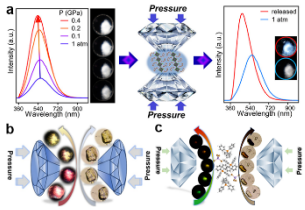


图 1 $(PEA)_2PbCl_4$ 纳米晶, Mn^{2+}掺杂(TDMP)$PbBr_4$ 和$(C_{24}H_{20}P)_2MnBr_4$ 在高压处理后的发光性能

关键词：低维钙钛矿；压力；压致变色；发射可调谐

Reference:

1. Fu R, Zhao W, L. Wang L, Pressure-Induced Emission toward Harvesting Cold White Light from Warm White Light. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 10082.
2. Fu R, Gao J, Wang L, et al. Structure Evolution and Optical Tuning of One-Dimensional Post-perovskite (TDMP) $PbBr_4$ under High Pressure. Inorg. Chem. 2024, 63, 18276-18284.
3. Fu R, Gao J, Zhang P, et al. Pressure-Induced Tunable Emission Colors and Irreversible Bandgap Narrowing in Organic–Inorganic Manganese Bromide Hybrids. J. Mater. Chem. C, 2025, 13.: 609-616.
4. Fu R, Gao J, Wang L, et al. Pressure-Induced Tunable Photoluminescence of Mn-Doped Post-Perovskites (TDMP)$PbBr_4$, Chinese Chem. Lett. 2025, Doi: https://doi.org/10.1016/j.cclet.2025.111507

质子性溶剂对界面电化学反应影响的 SERS 研究

余溪，张晨杰，徐敏敏，袁亚仙，姚建林*

苏州大学材料与化学化工学部，江苏省苏州市，215123

*Email: jlyao@suda.edu.cn

电化学界面反应是能源转换与存储、催化科学以及电化学合成等领域的核心过程，其反应动力学与机理研究对开发高效能源材料和优化反应体系具有重要意义。在众多界面反应中，质子转移过程作为基本步骤，直接影响析氢反应(HER)、氧还原反应(ORR)以及有机电合成等重要反应的效率与选择性[1, 2]。质子性溶剂的解离常数(pK_a)质子活性与转移倾向的热力学参数，对界面反应的影响机制的理解尤为重要。本研究以 4,4'-二巯基偶氮苯(DMAB)电化学还原为对氨基苯硫酚(PATP)的界面反应为探针，通过表面增强拉曼光谱(SERS)研究了界面反应的电位依赖性的溶剂效应。

以 H_2O、D_2O、CH_3OH、CH_3OD、EtOH 和 EtOD 为溶剂，通过表面等离激元反应催化 PATP 转化为 DMAB，控制起始为-0.20 V(vs. Pt，下同)，随后以 5 mV 为电位间距负移，并记录相应的 SERS 光谱，以 1142 cm^{-1}(DMAB)和 1073 cm^{-1} (DMAB+PATP)谱峰的强度衡量界面反应的程度，拐点时的电位定义为突变电位。图 2 为 1142 cm^{-1} 和 1073 cm^{-1} 谱峰相对强度比值随电位负移而变化曲线及突变电位前和突变电位的 SERS 光谱。在以上六种质子性溶剂中，DMAB/PATP 的突变电位分别为-0.225 V、-0.235 V、-0.260 V、-0.270 V、-0.275 V 和-0.285 V，与溶剂对应解离常数有关，解离常数越大，越有利于负电位下 DMAB 借助质子还原成 PATP，其突变电位也越正。该研究可为与氢相关的界面反应调控提供理论指导。

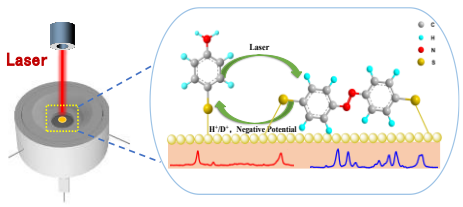


图 1. 修饰金纳米粒子单层膜的玻碳电极表面 PATP 与 DMAB 的相互转换示意图

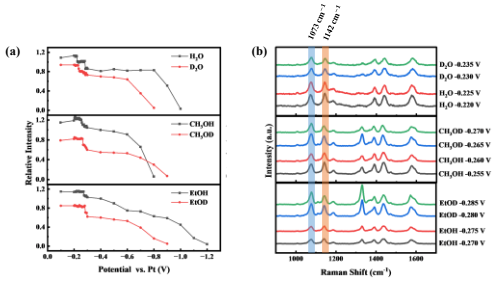


图 2. (a)不同溶剂中$I_{1142\ cm^{-1}}$ /$I_{1073\ cm^{-1}}$ 随电位变化曲线。(b)$I_{1142\ cm^{-1}}$ /$I_{1073\ cm^{-1}}$发生突变前后的 SERS 谱图

关键词： SERS；解离常数；电化学；溶剂效应；界面反应

参考文献：

[1] Ran, P.; Sun, M.; Qiu, A.; Han, X. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**. DOI: 10.1021/jacs.5c04028.

[2] Fan, Y.; Chen, Y.; Ge, W.; Dong, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146* (11), 7575.

原子层厚 MoS_2 中共振拉曼散射强度的异常淬灭（Anomalous Intensity Quenching of Resonant Raman Scattering in Atomically Thin MoS_2）

梅瑞[1]，钟阳光[2]，谢佳良[1]，吴江滨[1]，杜文娜[2]，
张新惠[1]，刘新风[2]，林妙玲[1,*]，谭平恒[1,*]

[1] 半导体芯片物理与技术全国重点实验室，中国科学院半导体研究所，北京，100083
[2] 中国科学院纳米技术标准化与测量重点实验室，国家纳米科学中心，北京，100190

*Email: linmiaoling@semi.ac.cn; phtan@semi.ac.cn

通过精确控制激发能量的大小使之与半导体中的电子跃迁能量共振，拉曼散射信号的强度会得到显著的增强。然而，本研究工作报道了原子层厚MoS_2中反常的共振行为。当激发能量与原子层厚MoS_2的A激子能量共振时，其拉曼信号表现出反常的强度淬灭。相应的拉曼信号强度只与非共振激发条件下的强度相当。这种不寻常的共振拉曼强度淬灭起源于光激发载流子在能带边缘发生的能带填充效应，它直接阻碍了带边电子态相关的共振拉曼散射路径。值得注意的是，通过向光激发载流子提供非辐射弛豫通道以移除能带填充效应，如范德华异质结中的界面电荷转移、多层MoS_2中的谷间散射，淬灭的共振拉曼散射强度能够得到恢复。由于光激发载流子的能带填充效应在半导体中普遍存在，本研究工作为控制低维半导体及其异质结中的共振拉曼散射过程提供了潜在的途径。

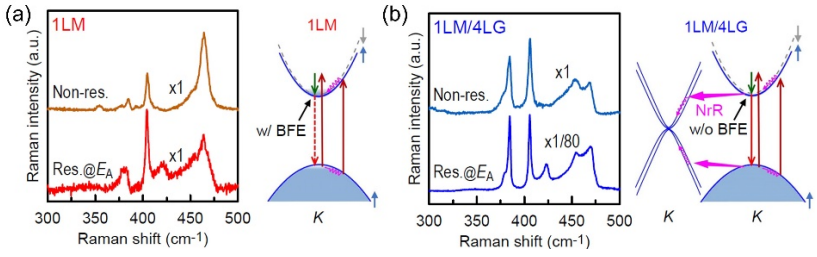


图1：（a）单层MoS_2中共振拉曼强度的异常淬灭；（b）单层MoS_2/石墨烯异质结中共振拉曼强度的恢复

关键词：共振拉曼散射；能带填充效应；拉曼散射路径；非辐射弛豫方式

参考文献：

[1] R. Mei, Y.-G. Zhong, J.-L. Xie, J.-B. Wu, W.-N. Du, X.-H. Zhang, X.-F. Liu, M.-L. Lin, P.-H. Tan, *Laser & Photonics Reviews*, https://doi.org/10.1002/lpor.202500821.

准二维锡基钙钛矿在高压下光电性能的研究

程龄莹[1]，张华芳[1]，毛艳丽[1*]

[1]河南大学物理与电子学院，开封，475004

*Email: ylmao@henu. edu.cn

金属卤化物钙钛矿作为一类新型的半导体材料，由于其独特的晶体结构和高光电转换效率，在太阳能电池、光电探测器等领域受到广泛关注。传统卤化铅钙钛矿具有高生物毒性，严重阻碍其发展，采用二价锡离子 Sn^{2+}取代铅离子 Pb^{2+}既可避免铅毒性，也可以获得更低的激子结合能和更高的载流子迁移率，因此锡基钙钛矿被视为无铅钙钛矿光电器件极具潜力的候选材料。然而，二价锡基钙钛矿中 Sn^{2+}的 $5s^2$ 电子具有独特的化学性质，易在与金属卤化物框架中的卤素配位时诱导结构畸变，从而产生自陷激子(Self-Trapped Exciton, STE)发射，间接阻碍了载流子输运。本研究利用金刚石对顶砧装置和高压原位探测技术，系统探究了准二维 Dion-Jacobson 型钙钛矿材料(BDA)(MA)Sn_2I_7 在高压下的结构相变和光电性能演化。原位高压荧光实验发现，不同压力处理后会有不同的发光现象：5 GPa 的压力作用后自由激子(Free Exciton, FE)发射显著增强，而 STE 态发射减弱；20 GPa 的压力处理后 STE 发射完全消失，仅存在 FE 发射。通过对紫外-可见吸收光谱的分析发现，随着压力增加，材料的光学带隙呈现“减小-增大-再减小”的演化规律，当样品从 20 GPa 完全卸压至环境条件时，其带隙值降至 1.71 eV，较初始值减小 0.07 eV，这可能是导致 STE 发射完全消失的关键因素。此外，高压原位电学测试表明，(BDA)(MA)Sn_2I_7 在压力作用下对 450 nm 和 808 nm 激光的光响应显著提升。本研究表明，通过高压诱导的本征结构调制，准二维锡基钙钛矿在高性能光电器件中展现出广阔的应用前景。

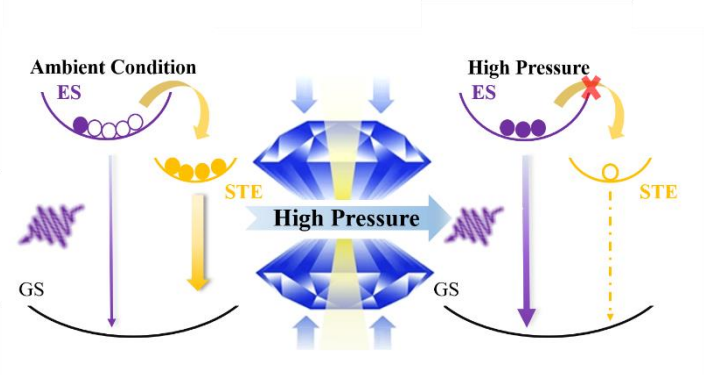


图 1：(BDA)(MA)Sn_2I_7在高压下的发光演化机理图。GS：基态；ES：激发态。

关键词：准二维锡基钙钛矿；高压；光电性能

雷尼绍拉曼光谱技术及其在电化学领域的应用

刘丽银[1]

[1]雷尼绍（上海）贸易有限公司，中国上海市静安区江场三路288号18幢楼1楼，200436

*Email: liyin.liu@renishaw.com

拉曼光谱是研究物质分子振动与转动的光谱技术，能够提供物质的分子结构、化学键及其变化等信息。凭借无损、原位、高化学特异性等优势，拉曼光谱在电化学研究中发挥着重要作用。雷尼绍（Renishaw）公司作为全球领先的精密测量与光谱分析设备制造商，长期专注于高性能拉曼光谱系统的研发，产品以高灵敏度、高稳定性和灵活拓展性著称，广泛应用于材料科学、化学与能源等领域。

在电化学研究中，拉曼光谱为监测电极结构演化、识别反应中间体及解析反应机理提供了关键手段。针对这些需求，雷尼绍拉曼系统在硬件设计与功能集成上进行了优化，形成多项技术优势：快速拉曼成像技术可高效呈现电极组分的空间分布及动态变化；LiveTrack™激光实时追焦技术可在电极表面不平整或反应过程中保持精准聚焦，确保信号稳定；系统兼容多类型原位电化学池，可灵活适配不同电极结构与测试环境；Flexible Arm灵活扫描臂可轻松应对不同角度或空间受限的原位测试；同时，系统可与AFM、SEM、手套箱等仪器联用，实现原位、多维的电化学表征。综上，雷尼绍拉曼光谱技术体系为应对复杂电化学研究提供了全面、高效的解决方案。



图1：雷尼绍拉曼光谱产品

关键词：拉曼光谱；电化学；原位与实时监测；快速成像；LiveTrack™实时追焦

高压下层状三卤化物的合成与表征

周密*

吉林大学，吉林省长春市前进大街 2699 号，130012

*Email: mzhou@jlu.edu.cn

石墨烯的发现引燃了物理、化学和材料科学等领域对二维材料的跨学科研究。二维材料家族不断的成长壮大，包括石墨烯、黑磷、过渡金属二硫化物、金属有机配合物等。在 2017 年，科学家成功制备了具有本征铁磁性的二维材料 CrI_3[1]，这是二维铁磁材料取得的标志性进展之一，同时也开启了学界对二维卤化物的研究热潮。V 族三卤化物具有与金属三卤化物相同的化学计量比，却存在不同的结构（分子晶体），其电子被限制在分子内，严重制约了它们在器件材料方面的应用。如果通过改变温压环境将 V 族三卤化物转化为二维层状材料，那么将拓展二维层状卤化物材料的研究空间。为此，我们对 PBr_3 和 $SbBr_3$ 行了系统的高压研究，通过分析 PBr_3 的原位高压拉曼和 X 射线衍射实验，发现 PBr_3 在 0.7 GPa 条件下结晶为正交结构的分子相（空间群 *Pnma*），并且在 44GPa 内没有相变发生。然而当在 27.0 GPa 条件下激光加热至～1800K，发现 PBr_3 转变为具有准六配位结构的二维层状材料（空间群 $P2_1/c$），同时卸压实验发现该二维材料可以稳定至 1.5 GPa[2]。采用相同的实验方法，我们发现 $SbBr_3$ 在 7.6 GPa 条件下由常压相（空间群 *Pbnm*）转变为具有八配位结构的二维层状材料（空间群 $P2_1/a$）[3]。本研究不仅加深了对 PBr_3 和 $SbBr_3$ 相图的认识，而且拓展了在分子相三卤化物中寻找二维层状功能材料的研究空间。

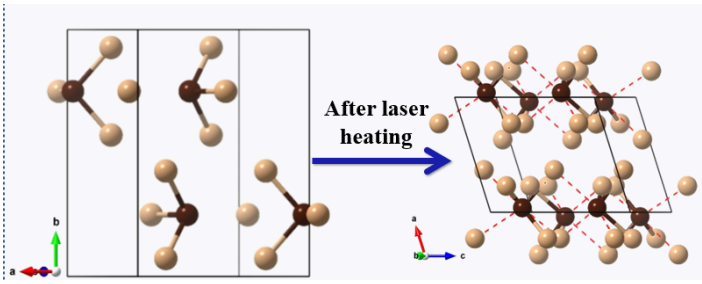


图 1：通过激光加热金刚石对顶砧技术，PBr_3 由分子相（*Pnma*）转变为二维层状材料（$P2_1/c$）

关键词：高压；激光加热；相变；拉曼

参考文献：

[1]. B. Huang, G. Clark, E. Navarro-Moratalla, D. Klein, R. Cheng, K. Seyler, D. Zhong, E. Schmidgall, M. McGuire, D. Cobden, W. Yao, D. Xiao, P. Jarillo-Herrero, X. Xu. *Nature*,**2017**, 546, 270–273

[2]. J. Cai, S. Liu, W. Lu, Y. Ji, K. Hao, X. Zhao, P. Ning, G. Liu, H. Wang, and M. Zhou, *Phys. Rev. Research* ,**2023**,5, 033164

[3]. J. Cai, X. Zhao, Y. Hao, W. Lu, G. Liu, H. Wang, and M. Zhou, *Appl. Phys. Lett*,**2024**, 124, 112101

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

Plasmon-Enhanced Stimulated Raman Scattering of Ethanol Mediated by Localized Surface Plasmon Resonance from Graphene Quantum Dots

Danyang Cui[1], Zhiwei Men[1,*],

[1] Key Laboratory of Physics and Technology for Advanced Batteries, College of Physics, Jilin University, Changchun, 130012.

Email: zwmen@jlu.edu.cn

Abstract: Lowering the threshold and enhancing the intensity of stimulated Raman scattering (SRS) has been a major topic in nonlinear optics field. In this work, we investigated the SRS characteristic of ethanol with graphene quantum dots (GQDs) through a Nd: YAG laser with wavelengths of 532 and 355 nm, respectively. Pure ethanol solution exhibits SRS characteristic peaks at 2943 cm^{-1}, attributed to the symmetric stretching vibration of -CH_3, the maximum energy conversion efficiency was 9.51% with 532 nm laser excitation. GQDs interact with laser in nanostructure environment, the edge effects of GQDs enhances light–matter interaction, contributing to localized surface plasmon resonance (LSPR) under resonant excitation, resulting in an electric field enhancement on SRS, decreasing the SRS threshold. The laser wavelength of 355 nm, which falls within the absorption band of GQDs, triggers the quantum confinement effects of GQDs, leading to the emission of fluorescence and the generation of intense LSPR. The synergistic interaction between LSPR and fluorescence enhancement effect to further amplify SRS signal and activate the strong third-order SRS, yielding a remarkable energy conversion efficiency of 29.67% with the GQDs concentration of 0.2 mg/mL. These findings demonstrate that GQDs serve as highly efficient nonlinear optical mediators, representing excellent candidate for advancing SRS-based photonic devices.

Keywords: stimulated Raman scattering; graphene quantum dots; localized surface plasmon resonance

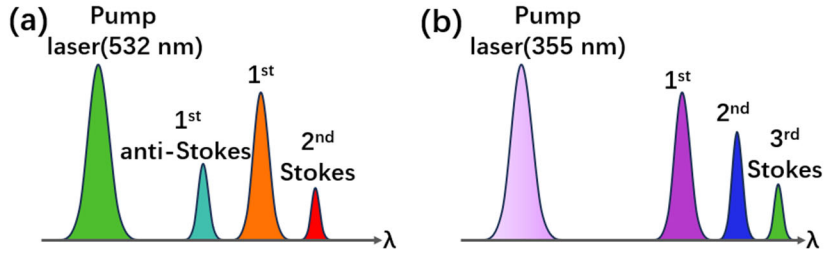


FIG. 1: Schematic Diagram of Principles of the cascaded SRS process in the ethanol molecule.

References:

[1] R. C. Prince, R. R. Frontiera, and E. O. Potma. Chemical Reviews. **2017**, 117, 5070−5094.
[2] Z. Dou, C. Li, C. Sun, et al., Phys. Lett. **2024**, 124, 101105.
[3] P. n, Z. Li, C. Sun, et al., J. Phys. Chem. Lett. **2021**, 12, 6119-6125.

基于表面增强拉曼光谱的重金属-矿物界面作用研究

欧阳磊*

[1] 中国地质大学（武汉）材料与化学学院，武汉，430074

*Email: ouyanglei@cug.edu.cn

环境介质中的矿物与重金属的界面行为显著影响其在环境中的迁移转化及归趋，但传统表征手段难以实现固-液微界面反应的原位动态监测及分子机制解析。本研究采用原位表面增强拉曼光谱技术，针对典型铁基矿物（如水铁矿、赤铁矿）与重金属（如As、Sb）的界面作用过程，实时追踪矿物表面晶相结构演变及重金属形态转化的协同机制。结果表明，基于核壳隔绝的表面增强拉曼光谱可同步获取矿物羟基化表面重构、重金属吸附/氧化还原产物特征峰变化等关键信息，揭示Fe-O键重组与重金属配位模式的动态耦合规律。相较于传统离线表征，该方法突破了非原位分析的时空分辨率局限，可实现界面反应动力学与分子机制的关联解析。研究证实，铁基矿物表面活性位点对重金属的络合能力及氧化还原效率受矿物晶面取向与局部微环境的调控，为精准预测重金属环境行为及开发基于矿物界面调控的污染修复技术提供了理论依据[1-3]。本研究凸显了原位表面增强拉曼光谱在砷、锑等重金属界面相互作用研究及机制解析中的独特优势，为复杂环境界面过程的原位解析与精准调控奠定了方法学基础。

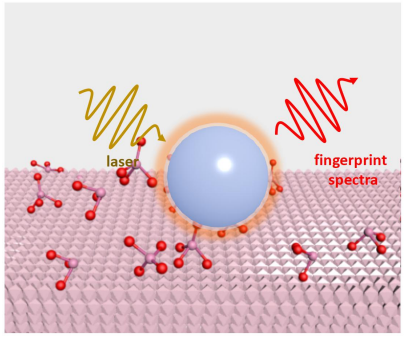


图1：采用表面增强拉曼光谱实现矿物界面重金属吸附行为及机制研究的示意图

关键词：表面增强拉曼光谱；砷；矿物；界面相互作用

参考文献：

[1] W. Chen, G. Guo, L. Huang, L. Ouyang, Q. Shuai, Facet-dependent adsorption of aromatic organoarsenicals on hematite: The mechanism and environmental impact, *J. Hazard. Mater.*, **2024**, 464, 132976.

[2] L. Ouyang, F. Song, C. Yu, L. Huang, Q. Shuai, Efficient arsenic coagulation by serpentine mediated iron hydroxides. *Chem. Commun.*, **2023**, 59, 6410-6413.

[3] L. Ouyang, Mingtao Wang, Lihua Zhu,* Heqing Tang, Qin Shuai, *In situ* speciation analysis and kinetic study of arsenic adsorption on ferrihydrite with surface-enhanced Raman spectroscopy, *Nano Res.*, **2023**, 16(2), 3046-3054.

First-Principles Simulation of the Melt-phase Vibrational Spectra of $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG)

Bilal Ghafoor, Jinglin You*, Guopeng Liu, Xiang Xia, Yufan Zhao, Longxing Zhang, Jiansheng Geng

State Key Laboratory of Advanced Special Steel, School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200444, China

*Email: jlyou@163.com

Investigating the liquid structure of YAG ($Y_3Al_5O_{12}$) at high temperatures is significant for various applications, including crystal nucleation, glass fabrication, and single-crystal growth. Experimentally, it is still challenging to obtain the high temperature Raman spectra of YAG melt to characterize the melt structure. In this study, *ab initio* molecular dynamics (AIMD) is employed to investigate the melt structure and simulate the vibrational density of states (VDOS), predicting Raman-active modes. The simulation analysis reveals the transformation of well-defined polyhedral units observed in crystalline YAG, YO_8, AlO_4, AlO_6 to polyhedral of lower coordination YO_5, YO_6, YO_7, YO_8 and AlO_3, AlO_4, AlO_5, AlO_6 losing its long-term arrangement showing a broader distribution of coordination environments in melt state and yet retaining vibrational identities.

Figure 1 presents the vibrational density of states (VDOS) of YAG melt structure, showing the distribution of vibrational modes at different wavenumbers (cm^{-1}). Low frequency modes (< 300 cm^{-1}) are dominated by Y-O vibrations, attributed to the heavy mass of yttrium. Mid to high frequency modes (300-850 cm^{-1}) arise from bending and stretching vibrations within Al-O polyhedral. Notably, the asymmetric stretching of lower coordination Al-O species becomes prominent above 600 cm^{-1}. The predicted vibrational spectra provide insights complementary to Raman Scattering experiments and a benchmark to understand nucleation pathways and phase evolution in YAG system.

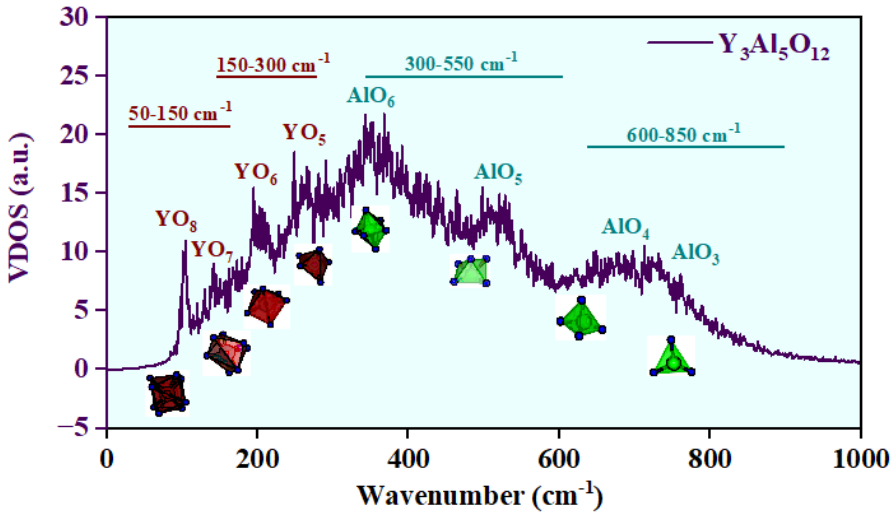


Figure 1: Vibrational density of states (VDOS) as a function of wavenumber of $Y_3Al_5O_{12}$ at 2500K.

Keywords: Vibrational density of states; density functional theory; melt structure

References:

[1] Weber, J. R.; Krishnan, S.; Ansell, S.; Hixson, A. D.; Nordine, P. C. *Phys. Rev. Lett.* **2000**. 84. 3622.

[2] Cristiglio, V.; Hennet, L.; Cuello, G. J.; Johnson, M. R.; Fernandez-Martinez, A.; Fischer, H. E.; Pozdnyakova, I.; Zanghi, D.; Brassamin, S.; Brun, J. F., Price, D. L. *J. Non-Cryst. Solids*. **2007**. 353. 1789-1792.

Multimodal Confocal Microspectroscopy: Raman and Beyond…

Stuart Thomson*, Angela Flack
Edinburgh Instruments Ltd
Livingston, United Kingdom
Corresponding author: stuart.thomson@edinst.com

Multimodal microscopy has emerged as a powerful technique for the comprehensive analysis of diverse materials, ranging from advanced functional materials to complex biological systems. We present a highly adaptable, all-in-one multimodal microscopy platform that integrates multiple advanced spectroscopic and imaging techniques to deliver a powerful, label-free characterisation solution.

This unified platform ensures all data is perfectly correlated and collected from the same location, eliminating the need to move samples between different instruments. It seamlessly combines a range of conventional and advanced techniques, including widefield imaging, Raman and photoluminescence (PL) spectroscopy, second harmonic generation (SHG), two-photon excited fluorescence (2PEF), and fluorescence and phosphorescence lifetime imaging (FLIM/PLIM).

By integrating these diverse capabilities under a single software control, the platform significantly simplifies and accelerates complex analysis. This allows researchers to acquire a comprehensive, multi-faceted view of a sample in a fraction of the time. The platform is an indispensable tool for a wide range of applications, from understanding the optoelectronic properties of advanced materials such as transition-metal dichalcogenides (TMDs) and perovskite solar cells to probing cellular microenvironments and metabolic states for biological and clinical analysis.

共聚焦拉曼光谱仪设计及性能测试

黄保坤[1]，黄启燊[2]，刘湃[2]，张晓武[2]，张韫宏[2,*]

[1]江苏海洋大学，江苏省连云港市海州区苍梧路 59 号，222005
[2]北京理工大学，北京海淀区中关村南大街 5 号，100081

*Email: huang_baokun@163.com

共聚焦拉曼光谱仪因其能充分利用激发光的能量和高效率的传输拉曼光谱信号，因而具有高空间分辨率，高灵敏度的优点。对共聚焦拉曼光谱仪进行整体设计，通过光学聚焦公式计算激光光斑大小，根据瑞利判据计算共聚焦显微镜的空间分辨率，根据光学成像公式计算光斑的放大倍率，并通过观察拉曼光谱信号在光电耦合器件（CCD）上的成像对设计和计算结果进行验证。采用氖灯作为标准光源测试共聚焦拉曼光谱仪的光谱分辨率，单晶硅作为样品测试共聚焦拉曼光谱仪的灵敏度。结果表明，单晶硅三阶峰的信噪比大于20:1，在20微米狭缝时，焦长200 mm的共聚焦拉曼光谱仪光谱分辨率优于2cm^{-1}，符合拉曼光谱仪通用规范（GB_T 40219-2021）中的“信噪比”的Ⅰ级指标和“光谱分辨率”的Ⅱ级指标。

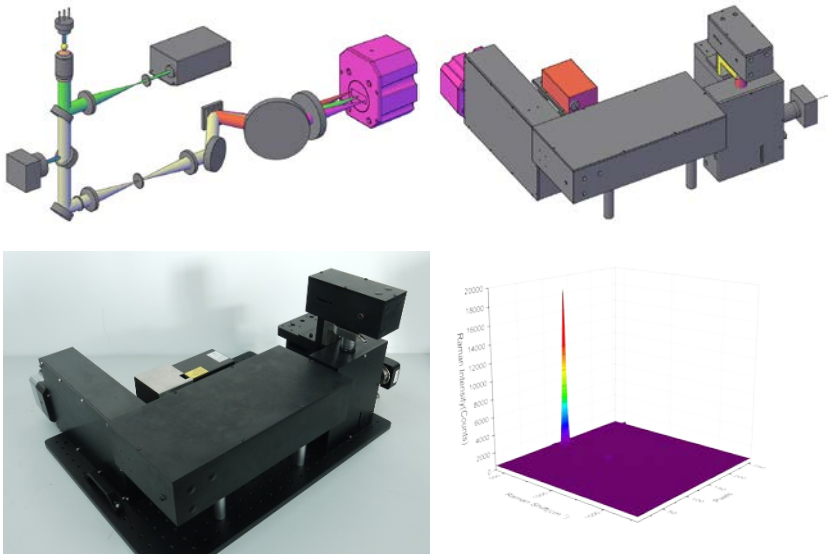


图1：共聚焦拉曼光谱仪的光学设计、机械设计、实物图及共焦成像效果图

关键词：拉曼光谱仪；显微共焦；灵敏度；光谱分辨率；光学放大倍率

参考文献：

[1] Huang,B.; Zhao, Q.; Sun, c.; Zhu, L.; Xu, H; Zhang, Y; Li, F. *Food Chemistry*, **2023**, *429*, 136851.

[2] Huang,B.; Zhao, Q.; Sun, c.; Zhu, L.; Zhang, H.; Zhang, Y; Liu, C.; Li, F., *Analytical Chemistry*. **2022**, *94*, 13311–13314.

智能化共聚焦显微光谱技术助力材料深入研究

马庆[1]

[1]常州谱光慧联科技有限公司，中国江苏省常州市武进区科教城创研港 5 号楼 106、107，213100

*Email: maq@excipolar.com

共聚焦显微光谱技术作为解析材料微观结构与光学特性的核心手段，在材料科学、凝聚态物理等领域的深入研究中发挥着关键作用。随着材料研究向低维化、多功能化、复杂化方向推进，科研人员对检测设备的多维分析能力、智能适配性、数据解析效率提出了更高要求。谱光慧联推出的 Excipolar Trion 共聚焦显微多维光谱仪，以智能化技术深度结合传统光谱检测，为揭示材料背后隐藏的机理研究提供全新解决方案。

Excipolar Trion 根植于共聚焦显微光谱技术的深厚积淀，继承了传统设备在高空间分辨率、高光谱灵敏度、无损检测方面的核心优势，整合能量、动量、空间、时间等多维度光谱分析能力，从而可以精准捕捉材料的微观结构与光学响应特征。更重要的是，其以智能化技术实现突破性升级：通过深度融合自研AI光谱分析模型，构建了从智能自我校准、样品特性识别、测试参数自适应优化到数据自动化解析的全流程智能检测体系。AI深度学习能力驱动的软硬件持续自我迭代，使精密光谱检测设备从“专用”迈向了“通用”，让多学科、跨领域研究人员的关注力从设备使用掣肘回归到自身的课题研究。

Excipolar Trion 共聚焦显微多维光谱仪以智能化革新重塑共聚焦显微光谱技术，实现了检测效率与分析深度的双重提升，为低维材料、功能复合材料等复杂体系的深入研究提供了高效、精准的多维检测手段，推动材料研究向更微观、更系统的方向迈进。



图1：Excipolar Trion 共聚焦显微多维光谱仪

关键词：多维关联表征；AI 智能化光谱仪；原位扩展

可与拉曼、红外、THz 光谱技术联用的国产 AFM 研发进展

庞 亮 周 军

苏州铭显精密仪器有限公司

江苏省昆山市巴城镇迎宾西路 2001 号 003 幢，215311

网址：www.mxafm.com Email: pang@mxafm.com zhou@mxafm.com

传统拉曼光谱、红外光谱等受光学衍射极限限制，空间分辨率通常在微米级。通过将AFM的探针与各类光源结合，可实现纳米级化学成像（如100 nm尺度下的化学分布分析），突破了传统红外、拉曼技术的局限。

报道了我公司最新研发、设计的两款光路友好型原子力显微镜，可与市面上几乎所有商用的拉曼光谱、红外光谱、THz光谱等实现联用。

接受客户定制。

共同助力国产科研仪器腾飞！

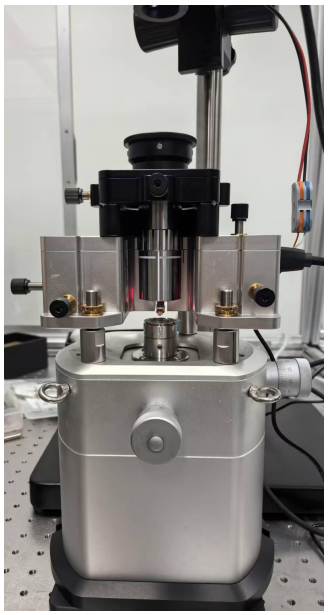


图1：可与拉曼光谱联用的AFM

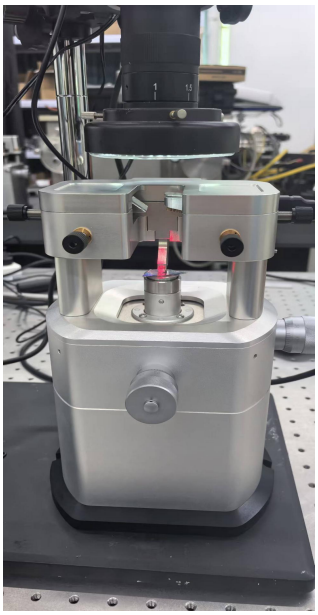


图2：可与红外、THz光谱联用的AFM

关键词： 原子力显微镜；散射式近场光学显微镜；纳米红外；太赫兹近场；TERS；国产

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

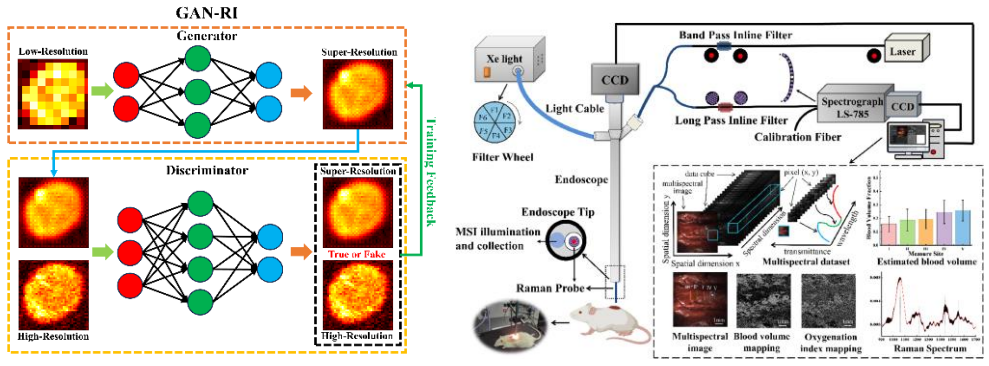
超分辨拉曼光谱图像重构算法与多模融合光谱成像技术研究

王爽[1,*]，徐杰[1]，李青竹[1]

[1]西北大学，陕西省长安区郭杜教育科技产业区学府大道1号，710127

*Email: swang@nwu.edu.cn

摘要正文：拉曼成像技术利用分子指纹信息可视化扫描区域内物质的空间分布。受限于其扫描机制，获取高分辨率拉曼图像通常需要较长的数据采集时间。我们提出一种基于生成对抗网络（Generative Adversarial Networt, GAN）的算法，可同时显著提升拉曼光谱成像速度与空间分辨率。该方法可有效提升2-4倍空间分辨率，同时加速成像速度4-16倍。进一步通过迁移学习使预训练模型适配不同样本，验证了算法泛化能力并拓展了普适性。此外，为了真实解析活体生物组织病理演进机制问题，我们提出了一种融合多光谱成像与拉曼光谱分析的多模态光谱分析方法与系统。以活体动物脊髓损伤模型为研究对象，本方法能够无标记、非侵入、可视化呈现损伤演进过程中，组织病理形态及其血氧等关键指标含量差异；能够以指纹光谱的形式揭示病理演进过程所蕴含的生化组成演变信息。以此为代表的研究工作，为我们进一步开展基于光谱分析技术的多层次生物分析构建了研究基础与技术支撑。



（a） （b）

图1：（a）基于生成对抗网络的超分辨拉曼图像重构算法示意图；（b）多模态融合活体生物组织光谱分析技术研究示意图

关键词：拉曼图像；算法；光谱成像技术

参考文献：

[1] Lu, Y.; Liang, Z.; Wu, Z.; Liu, J; Ren, D.; Chu, J.; Xu, J.; Zeng, H.; Wang, Z.; Wang, S. *Talanta.* **2024**, *279*, 126672.

瑞士万通 i-Raman NxG 工业分析案例分享

王睿

瑞士万通中国有限公司 北京市海淀区上地东路 1 号院 1 号楼 7 层 702

*Email: rui.wang@metrohm.com.cn

拉曼光谱分析具有快速、无需复杂样品制备、不产生废料的特点，能显著提升工厂实验室的样品处理效率。将其与传统的标准分析方法相结合，可以优化质量控制（QC）实验室的工作流程。具体而言，可以标准方法作为参考和验证工具，同时利用拉曼分析快速获取结果。这种集成化的方法能够简化质量控制流程，在确保结果准确性的同时，大幅提升检测速度。

瑞士万通是专业设计与制造小型实验室拉曼光谱仪的厂商。我们新推出的i-Raman NxG系列光谱仪，旨在满足更广泛的样品测试需求。本报告将通过拉曼光谱在索尔维制碱法中的应用、在青霉素发酵过程监控中的应用，以及透射拉曼在制药工业生产中的应用等案例，向听众展示小型拉曼光谱仪如何精准满足工业客户的需求。



图1：瑞士万通拉曼光谱产品

关键词： 拉曼光谱；原位检测；无损定量分析

晶圆级与超宽禁带半导体光电测试与解决方案

刘争晖

苏州惟光探真科技有限公司，苏州工业园区星湖街 218 号生物医药产业园一期 A4 楼 108，215123

摘要：

针对 SiC、GaN 等第三代半导体材料和 MicroLED 新型器件先进制程中面临的发光性质、应力和载流子浓度不均匀的新问题，我们依托自主知识产权的激光辅助离焦量传感器，小型化科勒照明系统，高稳定性的系统集成设计、数据处理和软件算法等核心技术，提供荧光和拉曼显微成像的核心光学模组和测试系统。

针对 8 英寸晶圆的残余应力表征，我们可以获取<20MPa 的应力变化，对应拉曼峰偏移仅为 0.02 波数的变化。针对 GaN 和 SiC 晶圆片，我们可以通过拉曼这种非接触手段获得定量的载流子浓度分布的信息，并将其与缺陷分布的信息相互对应。

针对超宽禁带宽度的 AlN 等晶体，采用 193nm 的 ArF 激光器激发的深紫外荧光的测试设备可以获取其光致发光谱等关键的材料信息。

针对 MicroLED 相关的晶圆质量控制，我们的微米级光斑和自动聚焦控制，可以有效抑制法珀罗干涉对荧光信号的干扰，获得更加可靠和准确的光致发光谱的空间分布。基于等离子体发光光谱的 Mapping 测试设备，可对材料表面的微量元素进行分析。进一步的，我们将这些光谱学手段有机地集成在真空互联系统中，为前沿性的科学研究提供了更加有力的手段。

针对于 Ga_2O_3 等深紫外器件，采用 ArF 激光器进行瞬态光电流测试，取得了不错的进展。

关键词：晶圆；拉曼；荧光；光电；第三代半导体；

晶格应变存储－释放催化策略的原位拉曼机理研究

杨皓[1]，刘建[1]，汤地生[1]，伍柳琪[1]，陈建[2,*]

[1]广西大学化学化工学院，南宁市西乡塘区大学东路100号广西大学化学化工学院，530004
[2]中山大学分析测试中心，广州市海珠区新港西路135号中山大学测试大楼，510275

*Email: yanghao@gxu.edu.cn

发展高效稳定的析氢催化剂依然面临性能与结构稳定性的矛盾。本研究提出了基于CoNiP@Cu$_3$P核壳纳米结构的晶格应变存储–释放策略。通过利用CoNiP壳层与Cu$_3$P核之间的晶格失配，催化剂能够在反应前储存应变能，并在反应过程中逐步释放，从而实现电子结构和表面化学的动态调控。原位拉曼与原位XRD表征清晰揭示了操作电位下晶格应变的可逆演变过程：应变释放促进了表面活性位点的暴露和中间体的稳定吸附，显著降低了反应活化能。密度泛函理论（DFT）计算进一步表明，Co/Ni协同掺杂诱导的应变效应导致d轨道能级分裂和d–p耦合增强，从而优化了反应路径。本研究展示了应变存储–释放机制在电催化反应调控中的独特作用，为过渡金属磷化物催化剂的理性设计提供了新思路。

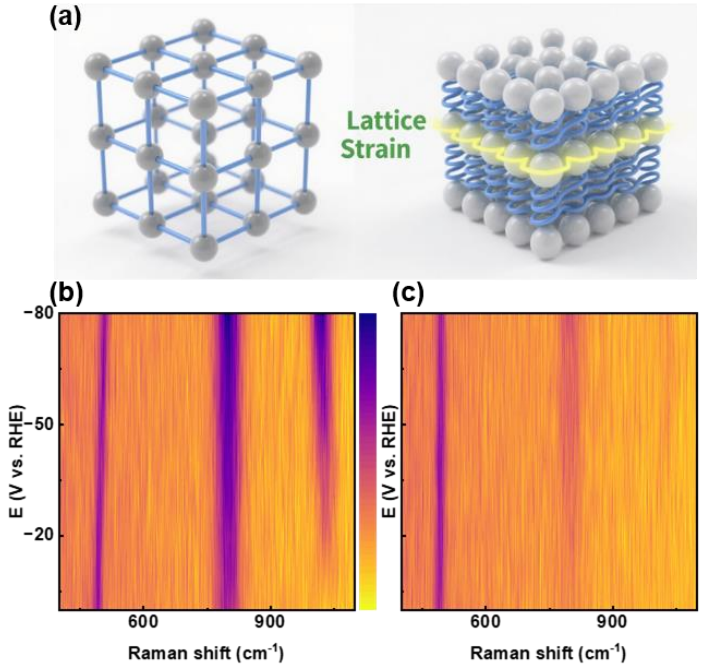


图1：晶格应变存储－释放催化策略的原位拉曼机理研究

关键词：晶格应变调控；原位电化学拉曼；电子态调控

参考文献：

[1] Hu, Y. ; Tu, M. ; Xiong, T. ; He, Y.; Mushtaq, M.; Yang, H.; Khanam, Z.; Huang, Y.; Deng, J.; Balogun, M. **J. Energy. Chem. 2024**, *103*, 282.

基于 VIPA 的布里渊光谱系统及其应用

胡增权 余德洋 任丽虹 黄莎莎 Troy Allen
光谱时代（北京）科技有限公司
LightMachinery Inc.

摘要:
近十几年以来，基于新型色散光学元件（VIPA）的自发布里渊光谱仪的研制和应用，引起了广大国内外研究者的极大兴趣。由于 VIPA 具有大色散和高通光量的优势，使其在快速自发布里渊测试，尤其在生物医学和动力学应用中被广泛采用。很多研究者利用 LightMachinery inc.的 VIPA 构建了单级或者多级布里渊光谱仪，再结合级联方式或者陷光滤光元件，以及显微系统，成功地对生物材料、病变组织等进行了研究，甚至可以进行活体检测。除此之外，此类光谱仪还可以进行高压物理、磁性薄膜材料等方面也有研究结果发表。本文对 VIPA 的光学性质、VIPA 光谱仪的构成、布里渊光谱成像、以及相关的研究应用进行了总结和介绍，为研究者提供了布里渊光谱体统的搭建和进行相应研究的参考。

关键词：布里渊散射 VIPA 光谱仪 光谱成像 生物医学 生物材料 磁性材料 高压物理

拉曼光谱在半导体中的应用

陈寿方[1]

[1] 奥谱天成(厦门)光电股份有限公司，福建省厦门市集美区软件园三期 F02 栋 5 楼

*chenshoufang@optosky.com

一、 技术原理及应用概述拉曼原理介绍

物质识别与结构分析
定量与定性分析
应力与温度测量

二、 在半导体领域的具体应用

拉曼光谱是半导体材料与器件特性的重要表征工具，其应用广泛且深入：

材料组分与质量表征
结晶度检测
晶型鉴别与相变研究
应力表征
应力大小与分布测量

金刚石、非晶硅薄膜以及各类半导体器件的应力分析

掺杂与缺陷分析
掺杂机理研究
缺陷与有序性评估
温度测量
器件温度与热管理

三、 技术要点与设备考量

高光谱分辨率
高空间分辨率
高灵敏度

四、 总结

拉曼光谱技术作为一种强大的无损、非接触式分析工具，在半导体材料的研发、生产制造及质量监控中发挥着不可替代的作用。它能够从分子层面提供关于材料结构、应力、掺杂、缺陷和温度等关键信息，是推动半导体技术持续进步的重要表征手段之一。

墙报

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

水溶液中苯甲羟肟酸的快速检测

吴钧毅*，谢拯

[1]江西理工大学稀土学院，江西省赣州市客家大道 1958 号，341000

*Email: sdwjyi@163.com

摘要：苯甲羟肟酸是最为常用的稀土浮选剂，由于其具有致癌和致畸性，痕量的苯甲羟肟酸排放会对人体和环境造成巨大危害[1]。苯甲羟肟酸传统检测方法有液相色谱法，分光光度法等，这些方法存在操作复杂，耗时长，难以在线监测的问题，无法满足环境中苯甲羟肟酸的快速痕量检测[2]。本研究通过设计并制备了银纳米颗粒/氧化铈纳米颗粒/二氧化钛纳米棒作为表面增强拉曼散射基底，实现了对苯甲羟肟酸的高灵敏度检测。该基底通过氧化铈颗粒对苯甲羟肟酸进行配位结合[3]，提升基底对于苯甲羟肟酸的吸附，显著提升了苯甲羟肟酸拉曼散射信号的强度和稳定性，并且实现了无前处理的秒级快速检测。基底对苯甲羟肟酸的检测极限提高了 1 个数量级，检测极限达到 3×10^{-7} M。该基底在羟肟酸类稀土矿物浮选药剂的快速检测中表现出极高的潜力，为水环境中苯甲羟肟酸快速检测和在线监测提供了可靠的技术支持。

关键词：表面增强拉曼散射；氧化铈；苯甲羟肟酸；快速检测

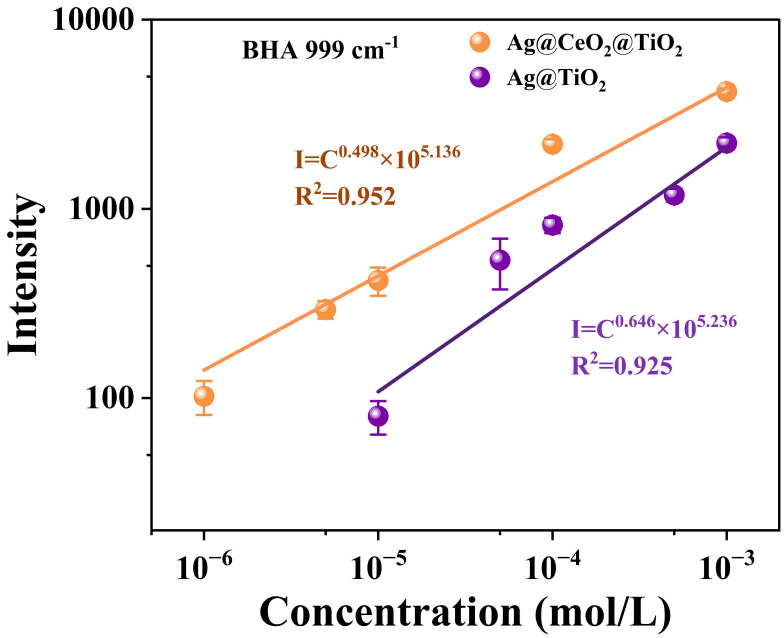


图 1 有无生长氧化铈颗粒的 SERS 基底与不同浓度的苯甲羟肟酸建立的标准曲线

参考文献：

[1] B. Dong, P. Wang, Z. Li, W. Tu, Y. Tan, Degrading hazardous benzohydroxamic acid in the industrial beneficiation wastewater by dielectric barrier discharge reactor, Separation and Purification Technology, 299 (2022).

[2] C. Luo, Z. Sun, Z. Jin, C. Chen, Z. Fu, Treatment of benzohydroxamic acid synthetic wastewater by electrochemical oxidation, Journal of Water Process Engineering, 69 (2025).

[3] <稀土选矿药剂研究现状及展望_谢美英.pdf>.

SERS 技术在深海极端微生物及其代谢产物领域的应用

王思羽[1]，赵婷婷[2]，王志成[1]，李博伟[2,*]，陈令新[2,*]，张鑫[1,*]

[1]崂山国家实验室，青岛，266237
[2]中国科学院烟台海岸带研究所，烟台，264003

*Email: sywang1@qnlm.ac

深海极端微生物，比如那些存在于冷泉或热液喷口中的微生物，利用化学合成将无机碳转化为有机碳，从而为深海生态系统提供有机物质和能量来源1。对深海极端微生物的研究具有重要意义。它能够揭示生命在极端条件下的生存策略和生态功能，为阐明生命的起源和演化提供关键线索，并为生物技术和医学领域的创新提供潜在的新资源2。然而，深海极端微生物的研究面临着环境复杂和采样困难的双重挑战3。它们栖息地的极端条件和动态变化、深海环境的难以到达和操作困难，以及绝大多数此类微生物尚未被培养的事实，都凸显了开发深海原位检测极端微生物技术的迫切需求4。因此，我们基于表面增强拉曼散射（SERS）技术，结合我们自主研制的深海拉曼探测系统开发了一种深海原位SERS传感器。通过这种传感器在南海的海马冷泉区，我们在1200m处的水下成功实现了深海极端微生物及其代谢产物的直接原位检测（图1）。

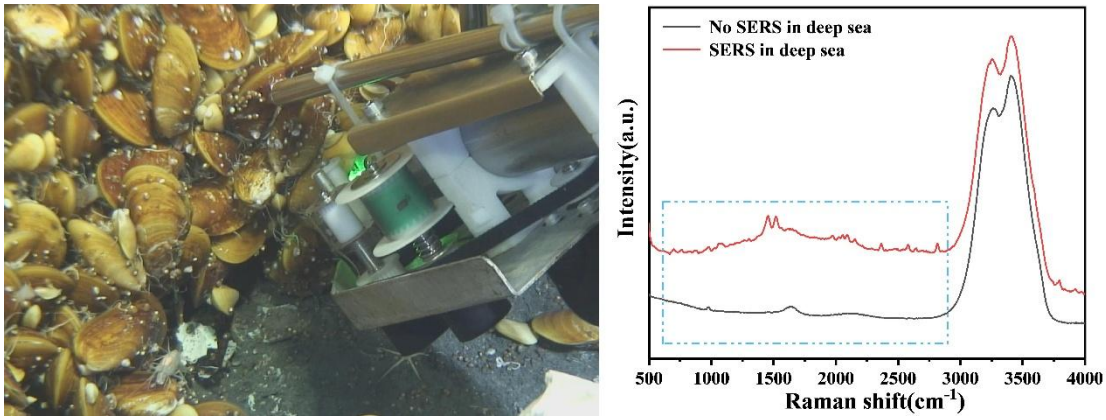


图1：左图为SERS探针在深海原位工作示意图；右图为获取的SERS谱图和普通拉曼光谱

关键词：深海；表面增强拉曼散射；原位；极端微生物

参考文献：

[1] Peng, X.; Du, M.; Gebruk, A.; Liu, S. et al. *Nature* **2025**.
[2] Runge, E.A.; Mansor, M.; Kappler, A.; Duda, J.P. *Geobiology* **2023**, 21, 355-377.
[3] Dick, G.J. *Nat. Rev. Microbiol.* **2019**, 17, 271-283.
[4] Wang, S.; Li, B.; Li, L.; Xiang, J. et al. *Chem. Eng. J.* **2025,** 510, 161592.

中国自来水硫酸盐的空间异质性：基于快速可靠 SERS 分析

黄秋婷[1]，潘思琪[1]，刘国坤[1,*]

[1]厦门大学环境与生态学院，近海海洋环境科学国家重点实验室，厦门 361102

*Email: guokunliu@xmu.edu.cn

作为生物地球化学循环与生命科学中的关键阴离子[1]，痕量硫酸根离子（SO_4^{2-}）的分析是一项常规却费时费力的实验室工作。传统实验室方法操作繁琐耗时，难以实现国家/全球尺度上的实时、高时空分辨率筛查与追踪。为应对这一挑战，我们开发了一种基于表面增强拉曼光谱（SERS）的痕量SO_4^{2-}分析策略。以PPITA保护的Au NPs (+)为SERS基底，利用硫脲分子与SO_4^{2-}之间的分子间氢键作用，实现了对SO_4^{2-}的选择性捕获与检测。同时采用饱和单层覆盖的硫脲作为内标，显著提升SERS测量的稳定性，以及定量分析的可靠性和重现性。硫脲的选择性也有效降低了常见离子的干扰，同时采用梯度稀释法作为快速简便的样品预处理手段去除DOM干扰，并辅以C18固相萃取处理重度污染样本。该方法可实现对湖泊水、自来水、地下水及海水等各类水样中痕量SO_4^{2-}的快速（≤1分钟）、灵敏定性（≥1μg/L）和精准定量（RSD<10%）分析。在此基础上，对中国主要城市自来水中的SO_4^{2-}水平进行快速筛查，其空间分布呈现显著异质性，这与近期理论预测一致[2]，受气候、水文地球化学及人为因素的综合作用影响。该SERS平台有望建立国家/全球尺度SO_4^{2-}动态监测的高通量传感框架，生成空间分辨的实时数据集，为数据驱动的硫循环建模提供支持。此外，该技术还有望为其他与环境相关的阴离子（如硝酸根、亚硝酸根和高氯酸根）提供可靠的实时环境监测。

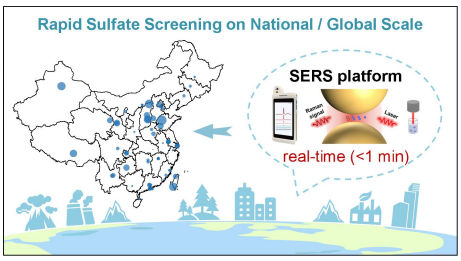


图1：硫酸盐的SERS平台开发与环境应用

关键词：硫酸根离子；SERS；定性定量；自来水；空间异质性

参考文献：

[1] Zhou, Z.; Tran, P. Q.; Cowley, E. S.; Trembath-Reichert, E.; Anantharaman, K. *Nat. Rev. Microbiol.* **2025**, 23 (2), 122-140.

[2] Xiao, C.; Qu, S.; Ren, Z. J.; Chen, Y.; Zou, X.; Chen, G.; Zhang, Z. *Environ. Sci. Technol.* **2024**, 58 (47), 21002-21014.

柔性贴片式 SERS 增强基底及其光谱检测应用

翁国军[1,*]，李剑君[1]，朱键[1]，赵军武[1,*]

[1] 西安交通大学生命科学与技术学院生物医学信息工程教育部重点实验室，陕西省西安市咸宁西路 28 号，710049

*Email: gjweng@xjtu.edu.cn

表面增强拉曼散射（Surface-enhanced Raman scattering, SERS）由于其特异性强、灵敏度高、及检测无损等优点，近年来已被广泛应用于生物医学检测、环境监测及食品安全检测等领域。但SERS光谱检测的灵敏度、稳定性及可重复性与所用的SERS基底增强性能密切相关。目前SERS检测以表面修饰有贵金属纳米增强颗粒的硬质基底为主，硬质SERS基底存在制备过程复杂、柔韧性和拉伸性差等问题，难以满足在体表等非规则表面原位检测方面的需求。设计制备具有柔性的SERS增强基底是解决当前体表等非规则表面原位检测的重要途径之一。利用纸张、高分子膜材料作为支撑的柔性SERS基底具有制备简单、易携带等特点，能有效解决常见硬质基底存在的问题，适用于生物医学检测与诊断领域快速、可穿戴以及个性化检测的要求。本文通过种子喷墨打印、膜过滤、界面转移自组装以及静电纺丝等方法设计制备了一系列柔性贴片式SERS基底，具有特异性好、灵敏度高的特点，在体表原位检测、食品安全以及危险气体等领域实现原位、无损、高灵敏的检测。本报告介绍了几种柔性贴片式SERS基底的制备方法及其检测应用，显示出柔性SERS基底在生物医学、食品安全等领域的广阔应用前景，为SERS光谱实际检测应用提供了基础。上述研究结果表明，柔性贴片式SERS基底在体表可穿戴检测领域具有广阔的应用前景，提高柔性SERS基底的稳定性是未来研究的重点方向之一。

关键词：拉曼散射；局域表面等离激元共振；柔性基底；生化检测；食品安全检测

参考文献：

[1] Gao Y, Weng G, Li J, Zhu J and Zhao J. *Microchim. Acta.* 2025, 192(7): 429.

[2] Weng G, Feng Y, Zhao J, Li J, Zhu J and Zhao J. *Sens. Actuators, B.* **2020**, 308, 127754.

离子风与溴化钾压片法抑制拉曼光谱中荧光干扰

梁庆优[1,2,*]，宋国胜[1]

[1] 华南理工大学分析测试中心，广东广州，510640
[2] 华南理工大学材料科学与工程学院，广东广州，510640
*Email: liangqy@scut.edu.cn

荧光是正常拉曼光谱最大的干扰因素。对于块状固体样品，我们已经提出了原创的离子风增强拉曼光谱（Ionic-wind-enhanced Raman spectroscopy, IWERS）方法；对于粉末和粘稠液体，我们也提出了原创的溴化钾压片（KBr pellet）方法，可淬灭任意强度荧光。此两法操作简便，只需要最常用的532 nm或633 nm激光器，且无需特殊的基底和特殊的仪器配置。

对于IWERS方法，我们制作了离子风枪（IWG），部署原始IWERS装置需要至少1小时，而IWG仅需5 min，极大提高了实验效率。我们利用IWG对IWERS方法的机理进行了考察，证实了先前假设。离子风中的离子（比如O_2^-）与样品表面接触后，将电子转移给样品分子，提高了样品分子的极化率，从而实现拉曼光谱的增强。样品表面电势用开尔文力显微镜检测。

对于溴化钾压片方法，先在空白溴化钾片上用320目砂纸制作刻痕，然后加载微量样品，去掉大颗粒样品并使样品尽量分布与刻痕内，再用红外压片机压片，即可完成制样。在拉曼光谱仪的50X镜头下寻找条带，要求条带的宽度小于10 μm（2~5 μm较佳），由此可获得高质量的拉曼光谱图。若条带过宽，则荧光仍会很强。溴化钾方法除了可淬灭荧光，亦可实现样品的分离，对低含量样品（如含量<1%）实现检测，而常规拉曼光谱方法较难实现这一点。

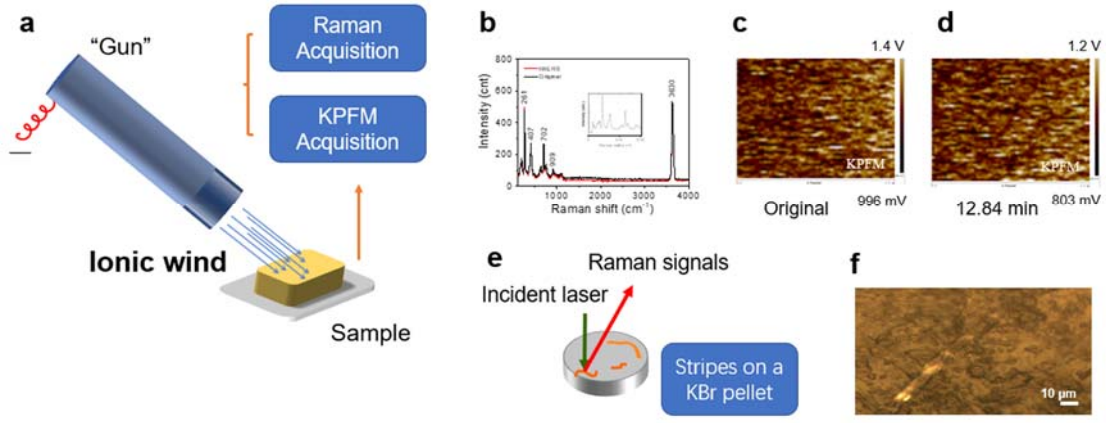


图1：IWERS装置 (a)、IWERS原理 (b-d)、溴化钾方法示意图与OM照片 (e-f).

关键词：离子风增强拉曼光谱；溴化钾压片；荧光干扰抑制

参考文献：

[1] **Liang, Q. Y.***; Gong, X. J.*; Liu, J. C.; Ke, C. M.; Dong, J.; Song, G. S.; Feng, P.; Yu, H. K.; Yang, X. F.*; Cui, J.; Deng, C. L.*; Li, Z. Y.; Liu, S.*; Zhang, G. Z. *Anal. Chem.* **2023**, *95*, 1318-1326.

银纳米粒子膜-单晶金片耦合体系中热点效应的 SERS 研究

张晨杰，祁昭，袁亚仙，姚建林*

苏州大学，材料与化学化工学部，苏州，215123

*Email: jlyao@suda.edu.cn

表面增强拉曼光谱（SERS）由于具有极高的表面灵敏度而广受关注，然而粗糙金属表面不同区域的信号并不相同，绝大多数的信号由少数分子占据的“热点”区域贡献，因此“热点”效应的研究有助于进一步理解 SERS 增强机理[1]。虽然通过理论计算可以模拟“热点”分布情况，但由于“热点”的复杂性，仍然亟待实验结果的支持。

本工作选择银纳米粒子膜和单晶金片构建耦合体系作为研究模型，构筑了两种“热点”耦合形式，即粒子-表面间隙模式和粒子-粒子间隙模式。图1为不同激发线下表面的SERS成像图，由图可见，对于532 nm、638 nm和785 nm三种激发波长，金片区域的 SERS 信号均强于非金片区域，其主要由于在金片区域存在两种“热点”效应， 即银纳米粒子-金片间隙“热点”和银纳米粒子-银纳米粒子间隙“热点”；而金片以外区域仅包含银纳米粒子-银纳米粒子间隙“热点”[2]。仔细对比发现，当选用785 nm为激发波长时，金片区域内外的SERS信号强度差别较532 nm和638 nm激发线时更加明显（如图1AB所示），其信号强度比值达到24倍（如图1 C 所示），其主要因为“热点”随激发线变化而发生转移，激发线红移至785 nm时，在金片区域，SERS “热点”几乎全部集中于银纳米粒子-金片间隙。通过紫外-可见漫反射光谱（图 1D ）可见，银纳米粒子膜-单晶金片耦合体系在850 nm处出现新的吸收峰，该吸收峰归属于银纳米粒子与金片SPR耦合形成的“热点”，该结果亦表明785 nm激发时，SERS“热点”集中于银纳米粒子和单晶金片间隙。

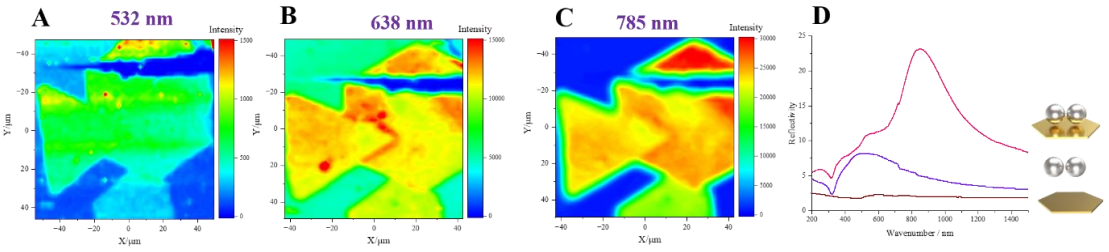


图 1. Ag 纳米粒子膜-单晶 Au 片耦合体系在 532 nm (A)、638 nm (B) 和 785 nm (C)下的 SERS 成像图；Ag 纳米粒子膜-单晶 Au 片耦合体系的紫外漫反射图（D）。

关键词： SERS；热点；单晶金片；银纳米粒子膜；耦合效应

参考文献：

[1] Fang, Y.; Seong, N. H.; Dlott, D. D. *Science*, **2008**, *321*, 388.

[2] Wang, X.; Li, M. H.; Meng, L. Y.; Lin, K. Q.; Feng J. M.; Huang T. X.; Yang Z. L.; Ren, B. *ACS Nano*, **2014**, *8*, 528.

Au@Ag 纳米粒子与金片碰撞限域内 C-C 偶联的 SERS 研究

董欢欢，徐敏敏，姚建林*

苏州大学材料与化学化工学部，江苏苏州，215123

*Email: jlyao@suda.edu.cn

C-C 偶联反应是合成天然产物、药物分子和高分子材料的关键手段，但传统的 C-C 键偶联往往需要较为繁琐的反应步骤，而表面等离激元(SPR)催化反应为 C-C 键偶联提供了一种新型温和的路径，在药物合成、材料开发以及环境检测等领域中具有重要价值[1,2]。本文基于表面增强拉曼光谱(SERS)和纳米粒子-金片碰撞产生限域，开展了静态和限域空间内动态 SPR 催化对溴苯硫酚（BTP）分子的 C-C 偶联反应效率和有效反应分数的相关研究，系统考察了 Au@Ag 纳米粒子的浓度、施加电压、激光功率、溶液 pH 值、粘度、粒子种类、电极种类、氧气含量等条件对 SPR 催化 BTP 分子的 C-C 偶联反应的影响。

图 1 为纳米粒子-金片碰撞模型，当纳米粒子与金片碰撞时形成限域，限域内在电场和 SPR 作用下可诱导发生化学反应，图 2 为 -0.2V 时 BTP 分子 1562cm-1 谱峰强度变化轨迹图及对应的 SERS 光谱。研究结果表明 BTP 分子的 C-C 偶联反应的产物为 4，4′-联苯二硫醇，其中 Au@Ag 纳米粒子的适宜浓度为 2.28×10^{-12} mol/L，电位负移和激光功率提高有利于 BTP 的 C-C 偶联反应的发生。受粒子容易聚沉的影响，当 pH=5 时降低溶液粘度有利于 BTP 的 C-C 偶联反应的发生。同时发现 Au@Ag 的催化活性优于 Au 纳米粒子。增加溶液中的氧气含量有利于 BTP 的 C-C 偶联反应的发生。该研究为提高 C-C 偶联反应的效率提供了新方法。

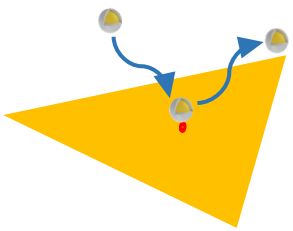


图 1. 纳米粒子-金片碰撞模型

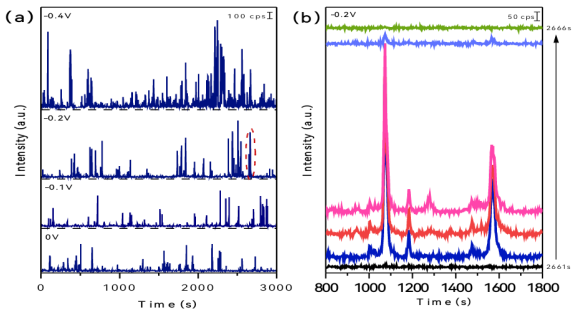


图2. (a) 随电位变化的BTP分子1562cm^{-1}谱峰强度变化轨迹图。(b) 提取 -0.2 V时“簇峰”信号的SERS

关键词：表面增强拉曼光谱；Au@Ag纳米粒子；对溴苯硫酚；C-C偶联反应；SPR催化

参考文献：

[1] Wu, Q.; Yin, L.; Yang Q.; Yuan, Y. X.; Zhang, C. J. *J. Colloid Interf. Sci.* **2023**, 629, 864.
[2] Liu, X. Y.; Zhang, C. J.; Wang, C.; Yuan, Y. X. *Chem. Commun.* **2024**, 60, 9805.

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

Suzuki 反应过程的智能 SERS 识别

赵千翔，袁亚仙*，姚建林*

苏州大学材料与化学化工学部，江苏 苏州，215123

*Email: yuanyaxian@suda.edu.cn , jlyao@suda.edu.cn

表面增强拉曼散射(SERS)技术因其具有分子指纹识别能力和超高灵敏度，在复杂反应体系的监测中得到广泛应用，但SERS技术在应对复杂反应体系时仍面临着复杂光谱识别困难以及难以解析大量数据等问题，而机器学习算法和模型的引入为解决这些分析问题提供了新思路。本研究聚焦Suzuki偶联反应中苯基吡啶类、联苯类、溴吡啶类及苯硼酸类分子的快速识别难题，通过使用机器学习算法将SERS光谱结合SMILES字符表示的化学结构，提出“结构-全谱识别光谱拼图-决策树(sFullSP-DT)组合分类识别”方法(如图1所示)。该方法将SERS光谱划分为若干特征子区间，识别分子振动模式对应的分子结构，并通过提取各子区间的峰值相对强度、位移及半峰宽等多维特征参数，对各个子区间的特征参数进行组合，形成各类分子的“光谱-结构”特征，构建出具有高辨识度的"光谱拼图"判别式集合，实现对以上四类分子的快速分类识别。通过对10个最重要特征(SHAP特征)重要性排序发现：1500-1550 cm^{-1}、1300-1350 cm^{-1}两个特征子集对于光谱特征区分的贡献度最高，1150-1200 cm^{-1}、1250-1300 cm^{-1}、1450-1500 cm^{-1}次之；发现在800-1100 cm^{-1}区域的特征多样性是最多。为增强模型的可解释性并验证关键特征的有效性，本研究引入SHAP分析，使模型的分类决策过程变得透明且可理解[1-2]。

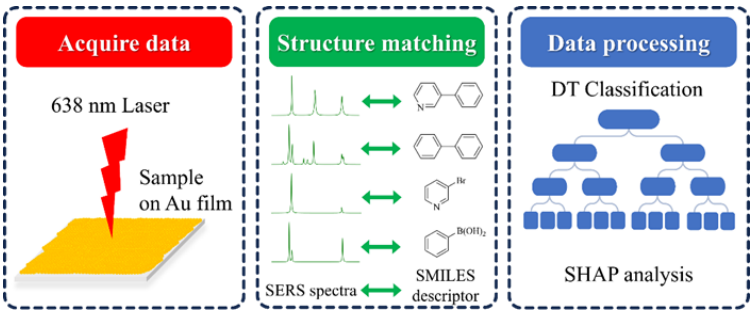


图1：结构-全谱识别光谱拼图-决策树(sFullSP-DT)组合分类识别方法示意图

关键词：表面增强拉曼光谱；机器学习；决策树；分类识别；SHAP分析

参考文献：

[1] Ju, Y.; Neumann, O.; Bajomo, M.; Zhao, Y.; Nordlander, P.; Halas, N. J.; Patel, A. *ACS Nano*, **2023**, *17*, 21251.

[2] Chen, J. R. T.; Tan, E. X.; Tang, J.; Leong, S. X.; Hue, S. K. X.; Pun, C. S.; Phang, I. Y.; Ling. X. Y.; *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, *147(8)*, 6654.

银立方体纳米间隙中的热电子传输距离埃级别分辨探测

王雨晴，程欢，张月皎*，李剑锋*

厦门大学，福建省厦门市思明区，361005

*Email: zhangyuejiao@xmu.edu.cn

*Email: Li@xmu.edu.cn

在纳米技术领域，等离激元纳米腔是探究纳米尺度光-物质相互作用的核心对象。等离激元纳米结构中，自由电荷载流子与光子共振产生集体振荡，经非辐射跃迁耗散能量后形成热电子，热电子在纳米间隙中的传输距离是一个关键参数，它直接影响着热电子的利用效率和相关器件的性能。传统的探测技术在研究热电子传输距离时，往往受到分辨率的限制，难以提供高精度的信息。而实现埃级别分辨探测等离激元纳米间隙中的热电子传输距离，对于深入理解热电子的传输机制具有至关重要的作用。

本研究通过一系列饱和烷基硫醇分子修饰银纳米立方体，利用碳链长度调控纳米间隙，并以金膜基底负载热电子探针分子，将探测分辨率提升至2 Å。采用 633 nm 激光匹配银立方体等离激元耦合模式测试发现：随碳链增长，纳米间隙增大导致等离激元共振蓝移，主偶极振动模式增强；通过探针分子偶联转化实验，测得热电子最长传输距离达20个碳位置。

基于上述结果，我们建立了埃级尺度热电子传输理论模型，在高空间分辨水平下揭示了等离激元诱导的热电子直接转移机制，构建了不同距离的纳米光腔，明确了热电子转移效率与距离的关联性。

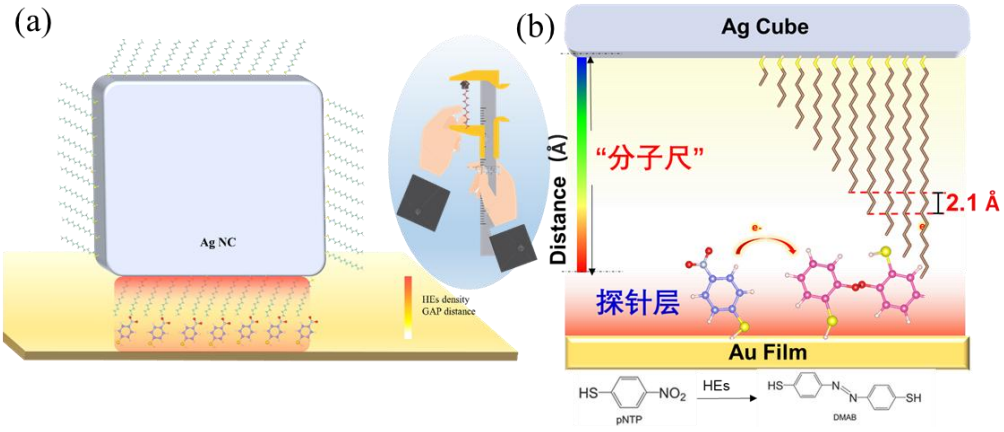


图1：银纳米立方体间隙构筑示意图：(a) 银纳米立方体耦合超平金膜，由烷基硫醇与探针分子共同构筑纳米间隙高度；(b) 纳米间隙中由不同长度烷基硫醇调控热电子传输距离

关键词：拉曼；等离激元；热电子；银立方体

参考文献：

[1] Li, CY., Duan, S., Wen, BY. et al. Nat. Nanotechnol. **2020**,15, 922–926

[2]Yang, JL.; Wang HJ.; Zhu ZW. et al. Angew. *Chem. Int. Ed*. **2022**, 61, e202112749.

光热效应驱动的衬底-激光耦合固态 SERS 基底检测

郭浩宇[1,2]，支升福[2]，田中群[1,*]，刘国坤[2,*]

[1] 厦门大学化学系，表界面物理化学全国重点实验室，厦门 361005
[2] 厦门大学环境与生态学院，海洋生物地球化学全国重点实验室，厦门 361102

*Email: guokunliu@xmu.edu.cn, zqtian@xmu.edu.cn

固态基底的表面增强拉曼光谱（Surface enhanced Raman spectroscopy, SERS）高灵敏检测依赖于基底的合理设计，一种重要的策略即是通过减小纳米间隙以提升电磁场耦合扩大热点数和面积，进而提升增强的能力[1]。激光在SERS检测中不仅提供激发源，还能主动重构表面纳米结构，却常被忽视[2]。本工作通过引入低热导率材料（如石英玻璃）替换传统常见的高热导率材料（如硅）作为固态SERS基底的衬底材料，采用高功率密度激光进行测试时，可使4-巯基苯甲酸检测灵敏度跃升3个数量级。机理探究结果表明，这一增强归因于低热导率衬底与高功率激光协同形成的高热梯度：光热效应驱动纳米粒子整体运动，缩小了纳米粒子间间隙，从而显著提升信号。进一步扩展分子测试普适性时发现，该增强效应与分子表面吸附能力紧密相关：光热诱导的间隙收缩与分子受热脱附之间存在动态平衡。因此，依据检测需求，合理匹配衬底热导率与激光功率密度，可实现更灵敏、更高信噪比的固态 SERS 检测。

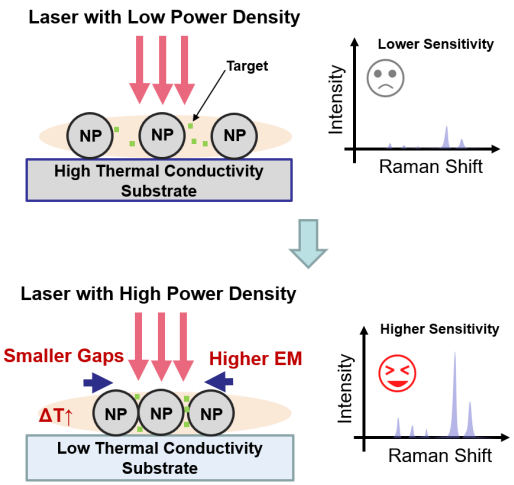


图1：通过引入低热导率衬底替换和引入高功率密度激光实现高灵敏SERS检测示意图

关键词：表面增强拉曼光谱；光热效应；纳米间隙重构

参考文献：

[1] Guo, H.; Zhi, S.; Zhao, Z.; Zhao, Z.; Gao, T.; Ma, H.; Luo, S.; Luo, S.; Zhang, W.; Guo, P.; Ren, B.; Tian, Z.; Liu, G. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2025**, *17*, *33318–33339*.

[2] Zhu, M.; Li, M.; Su, M.; Liu, J.; Liu, B.; Ge, Y.; Liu, H.; Hu, J. *J. Phys. Chem. C* **2021**, *125*, *13443–13448*.

超圆单晶金纳米球构建单个高度均匀且可重现的等离激元热点

程欢[1,2]，张月皎[1,*]，胡家文[2,*]，李剑锋[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院，能源学院，厦门，361005
[2] 湖南大学化学化工学院，长沙，410082

*Email: zhangyuejiao@xmu.edu.cn; jwhu@hnu.edu.cn; Li@xmu.edu.cn

热点是等离激元金属纳米结构中可以产生强电磁场的纳米级区域。由于热点中的电磁场对构成热点的金属纳米结构高度敏感，不同热点中的电磁场很难实现高度均匀，导致光谱重现性差。本论文开发了一种一锅合成法，可以批量（每批次 ＞500 mL）合成尺寸可调（38至92 nm范围）、单分散、超圆单晶金纳米球（Au NSs），用于构建具有“纳米球-镜面”（NSoM）构型的热点，以提高热点的均匀性和可重现性。表面增强拉曼散射研究揭示，不同的单个NSoM热点的电磁场强度的变化小于4.0%，其电磁场的均匀性显著优于相同尺寸下单个“纳米粒子-镜面”（NPoM）构型的热点的电磁场的均匀性。这是因为Au NSs具有高度均匀的球形和尺寸，赋予了NSoM热点一致的“点-镜面”构型。此外，Au NSs的单晶性质，相比于其多晶对应物，可以减少等离激元的能量耗散，从而贡献了额外9%的电磁场增强。这一发现为表面增强光谱学、等离激元传感等应用的定量化研究提供了重要的材料基础和技术支撑，也能很好地推动等离激元器件的实际应用。

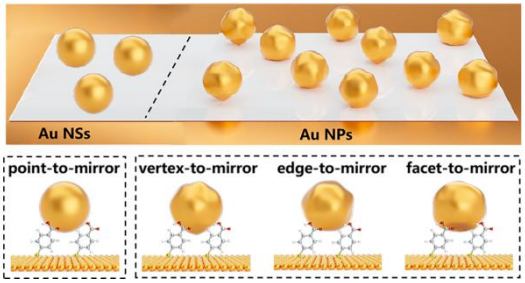


图1 超圆单晶金纳米球替代多面多晶金纳米粒子构建单个高度均匀且可重现的等离激元热点

关键词： 等离激元；表面增强拉曼散射；超圆金纳米球；单晶；热点

参考文献：

[1] Cheng, H.; Wang, K.; Gao, R.; Fu, S.-Y.; Wang, X.-T.; Lin, J.-S.; Liu, Y.; Sun, X.; Yang, Z.; Duan, X.*; Zhang, Y.-J.*; Hu, J.*; and Li, J.-F.* *Nano Lett*. **2024**, *24*, 16374.

面向定量 SERS 应用的核壳结构光学性质与电磁场分布演变

吴虓[1]，张凡利[1,*]

[1] 中国计量大学，浙江省杭州市钱塘区学源街 258 号，310018

*Email: zhangfl@cjlu.edu.cn

表面增强拉曼散射（Surface-enhanced Raman Scattering, SERS）技术在定量分析中一直面临信号重现性差和热点分布不均匀等关键挑战[1, 2]。近年来，等离激元核壳结构因其光学响应可调和环境稳定性良好，已成为提升 SERS 定量性能的重要研究方向[3]。然而，现有研究多集中于静态结构分析，对壳层生长过程中光学性质与电子传输机制的动态演变仍缺乏系统研究。本研究以 Au@BDT@Au 为模型体系，通过调控金外壳的包覆程度，模拟从无覆盖到完全包覆的动态生长过程，系统考察了该过程中 SERS 谱峰的位移行为与电磁场分布的变化。实验结果表明，外壳覆盖程度显著影响亚纳米间隙内的局域电磁场增强效应与电荷转移行为，从而有效调制 SERS 信号的强度和峰位。本研究从“包覆程度”这一新视角揭示了具有亚纳米间隙的等离激元核壳结构在动态过程中的电磁场演化规律，为理解隧道电荷转移等离激元效应提供了新思路。该工作不仅深化了对核壳结构在生长过程中光物理机制的认识，也为开发高重现性、可定量化的 SERS 纳米标签提供了重要参考[4]。

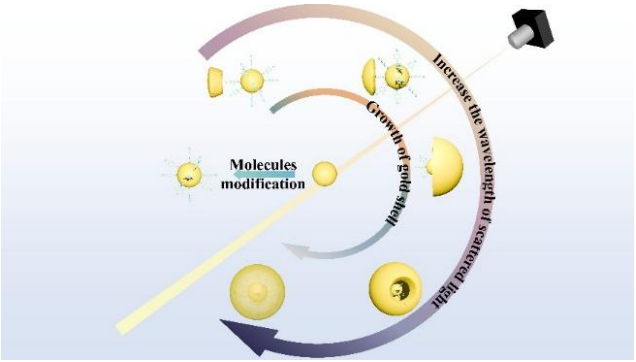


图 1：Au@IS@Au 核壳结构示意图

关键词：等离激元壳核结构；表面增强拉曼光谱；电荷转移；分子结

参考文献：

[1] Fan M.; Brolo A G. *ACS Nano*. **2025**, 19, 3969.
[2] Ma H.; Pan S Q.; Wang W L.; Yue X. *ACS Nano*. **2024**, 18, 14000.
[3] Kim G H.; Son J.; Nam J M. *ACS Nano*. **2025**, 19, 2992.
[4] Tan S F.; Wu L.; Yang J K W.; Bai P. *Science*. **2014**, 343, 1496.

Au@4-MBA@Ag 纳米立方体制备及 SERS 增强机制研究

吴雨婷[1]，张凡利[1,*]

[1] 中国计量大学，浙江省杭州市钱塘区学源街 258 号，3100184

*Email: zhangfl@cjlu.edu.cn

银纳米立方体因其独特的光学、电学和化学性质，在医疗健康、电子器件、能源转换及环境保护等多个领域展现出广阔的应用前景。实现对其生长形貌的精确调控，是提高材料性能、推进可控制备及发展绿色合成方法的关键所在[1]。本研究成功设计并制备了具有明确核壳结构的 Au@4-MBA@Ag 纳米立方体复合材料。该结构以 50 nm 金纳米球为核，通过自组装方式在其表面修饰单层 4-巯基苯甲酸（4-MBA）分子作为内标与连接层，最终外覆银壳构成三明治型功能纳米单元。系统考察了金核浓度对银壳生长形貌的调控规律，揭示了 4-MBA 分子在 Au-Ag 异质界面处电磁增强与化学电荷转移协同作用机制。实验结果表明，通过优化合成参数可实现对银壳形貌、表面粗糙度及厚度（20–25 nm）的有效控制，在维持立方体主体结构的同时显著增强其等离子体共振效应。银壳的包覆通过电磁耦合作用大幅增强了金核与银壳间隙区域的表面增强拉曼散射（SERS）“热点”效应。同时，4-MBA 作为内标分子，其拉曼特征峰（1076 cm^{-1}与 1583 cm^{-1}）在核壳结构中表现出优异的信号稳定性和重复性，为 SERS 定量分析提供了可靠的内参比基准。本研究发展的形貌可控核壳结构不仅深化了对贵金属纳米粒子生长机制与增强机理的理解，也为构建高精度、可定量化的 SERS 传感平台提供了新思路，在环境污染物检测与生物分子识别等领域具备重要应用潜力[2]。

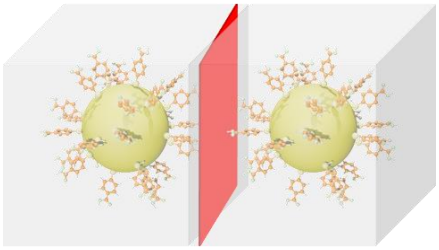


图 1：Au@4-MBA@Ag 核壳结构示意图

关键词：核壳结构；内标分子；形貌可控；表面等离激元

参考文献：

[1] Lin, S.; Lin, X.; Han, S.; Wang, L. *Analytica Chimica Acta* **2020**, *1108*, 167-176.
[2] Fang G, Lin X, Wu J, Dong B. *Small*, **2025**, *21*(7), 2408670.

基于 Au@ZIF-8 复合结构的高灵敏度 SERS 甲醛传感器研究

黄家卫[1]，张凡利[1,*]

[1] 中国计量大学，浙江省杭州市钱塘区学源街 258 号，310018

*Email: zhangfl@cjlu.edu.cn

甲醛作为典型的室内挥发性有机污染物，对人体健康具有严重危害。它广泛来源于建筑材料、家具等，可干扰人体神经系统与免疫系统功能。因此，开发高灵敏度、高选择性的甲醛气体传感器具有重要现实意义。表面增强拉曼散射（Surface-enhanced Raman Scattering，SERS）技术因具备优异的灵敏度和特异性，能够识别分子的特征振动模式，在痕量检测中显示出巨大潜力。然而，由于甲醛分子拉曼信号弱、与金属基底吸附能力差，传统 SERS 策略难以实现对其有效检测。针对上述问题，本文提出一种基于金纳米颗粒（AuNPs）表面原位生长沸石咪唑酯骨架材料（ZIF-8）的复合结构[1]，并结合多维化学计量方法，实现在室温下对挥发性甲醛的高效检测[2]。在该设计中，ZIF-8 的高比表面积和丰富的孔隙结构为甲醛分子提供了大量吸附位点，同时 AuNPs 产生的局域表面等离子体共振（Localized Surface Plasmon Resonance, LSPR）效应显著增强了 SERS 响应信号。通过调控阵列表面不同层数的 Au@ZIF-8 结构，进一步提升检测性能。实验结果表明，该复合材料在室温环境下对甲醛表现出优异的灵敏度和高选择性，同时具备较短的响应时间和良好的稳定性。本研究为开发高性能甲醛气体传感器提供了新思路，在环境监测与室内空气质量评估等领域具有广泛的应用潜力。

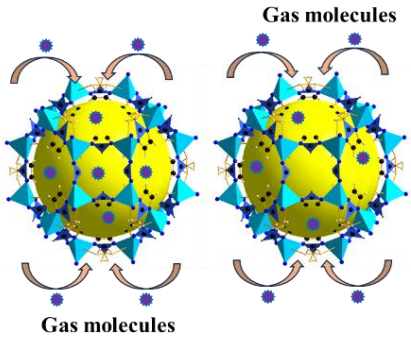


图 1：Au@ZIF-8 复合结构检测挥发性甲醛示意图

关键词：表面增强拉曼散射；Au@ZIF-8 纳米结构；界面自组装；甲醛检测

参考文献：

[1] Liu, Y.; Chui, K. K.; Fang, Y.; Wen, S.; Zhuo, X.; Wang, J. *ACS Nano* **2024,** *18* (17), 11234-11244.

[2] Qu, C.; Fang, H.; Yu, F.; Chen, J.; Su, M.; Liu, H. *Chemical Engineering Journal* **2024,** *482*. 148773

原位拉曼跟踪等离激元半导体 Au@ZnS@CdS 的载流子迁移机理及其引发的水分解反应的机理研究

Zuoming Chen[1]，Jingliang Yang[1,*]

[1] 贵州大学，贵州省贵阳市花溪区贵州大学东校区，550025
[1,*]贵州大学，贵州省贵阳市花溪区贵州大学东校区，550025

*Email: yangjl@gzu.edu.cn

摘要：等离激元增强半导体可以大大提高半导体光催化剂的催化效率。其主要作用包括远场散射增强、近场耦合增强、共振能量转移增强和热载流子注入增强，不同的增强模式在不同的材料和结构中作用的强度不同，找到相应的增强机理是研究的关键。作者在过去的工作中通过水浴加热法在Au纳米粒子的表面包上CdS和ZnS壳层，通过调整两种半导体的层级顺序来追踪载流子的迁移方向。结果表明Au@ZnS@CdS具有最高的产氢活性。在近场增强作用下，ZnS和CdS产生的光电子以及Au纳米颗粒带内跃迁或带间跃迁产生的热电子能够高效地转移到CdS表面。同时利用原位拉曼光谱追踪在HER过程中CdS表面的中间物种。

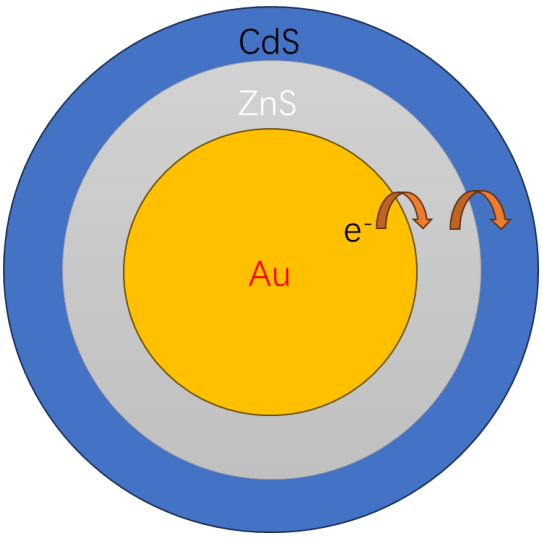


图1：Au@ZnS@CdS纳米颗粒的结构示意图，以及在光照条件下的载流子转移方向。

关键词：等离激元；半导体；光催化；原位拉曼光谱；Au@ZnS@CdS

参考文献：

[1] Jing-Liang Yang, Hong-Jia Wang, Zhenwei Zhu, Mu-Fei Yue, Wei-Min Yang, Xia-Guang Zhang, Xiangyu Ruan, Zhiqiang Guan, Zhi-Lin Yang, Weiwei Cai, Yuan-Fei Wu, Feng-Ru Fan*,Jin-Chao Dong*, Hua Zhang, Hongxing Xu, Zhong-Qun Tian, Jian-Feng Li*. Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e2021112749.

[2] Zhengye Xu, Huijie Liu, Jing-Liang Yang*, Xiu Gong, Yanli Chen, Yang Meng*, Qiong Peng, Junfei Ding, Yunpeng Qu, Qixuan Zeng, Xiaosi Qi*, Ye Yang. Adv. Mater. 2025, 37, 2501091.

构建电荷转移度模型作为连接 SERS 和光电转换效率的媒介

常艺萱[1]，宋雨亭[2]，李轶凡[3]，孙逸[4]，纪伟[1,*]

[1] 东北林业大学，黑龙江省哈尔滨市香坊区和兴路 26 号，150040
[2] 东北林业大学，黑龙江省哈尔滨市香坊区和兴路 26 号，150040

*Email: jiwei@nefu.edu.cn

表面增强拉曼散射光谱（surface-enhanced Raman scattering，SERS）作为一种极具前景的分析工具，为研究光电转换器件在工作状态下的界面电荷转移（CT）过程提供了直接的动态信息。[1, 2]然而，这种特征背后的机制仍然存在争议，要准确揭示其基础物理学原理尚具挑战性。在这项研究中，我们将SERS数据与ZnO_{1-x}/MPy/FePc杂化结构的传统光电化学测试相结合，揭示了SERS光谱、界面电荷转移和光电转换性能之间的内在相关性。实验结果表明，界面电荷转移效率与SERS强度并非简单的正相关关系；实际上，该效应取决于电荷转移程度（ρCT）——这一参数由非完全对称与完全对称振动谱带的相对强度所定义，且与拉曼测试采用的激发波长密切相关。因此，在进行SERS表征之前，选择与所使用光源的有效波长范围一致的适当激发波长对于获得准确的结果至关重要。本研究为SERS探索电荷转移提供了机理性的见解，并强调了基于SERS的电荷转移度模型在预测和评估光电转换器件界面电荷转移行为方面的应用潜力。

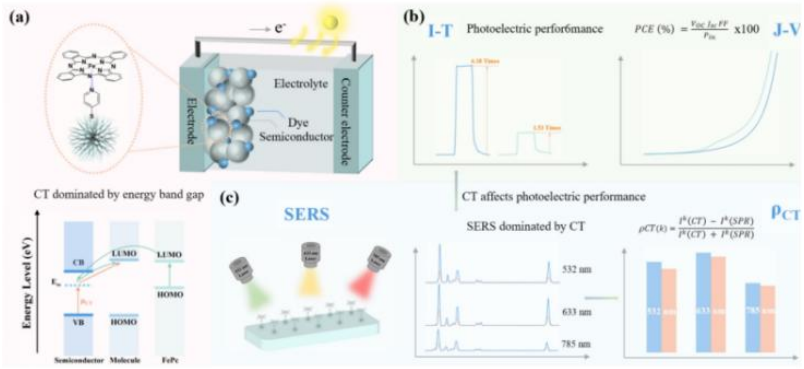


图1：（a）传统染料敏化太阳能电池的组装（b）传统光电转换效率的表征（c）SERS增强性能表征与分析

关键词： 界面电荷转移；SERS；光电转换；染料敏化太阳能电池

参考文献：

[1] Wang, Y.; Liu, J.; Ozaki, Y.; Xu, Z.; Zhao, B. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58(24)*, 8172-8176.
[2] Yan, L.; Zhang, X.; Lv, D.; Liu, Z.; Yang, F.; Gao, Y.; Wang, X.; Jiang, Y.; Zhao, B. *J. Mater. Chem. C* **2023**, *11(27)*, 9179-9188.

柔性可贴附表面增强拉曼散射衬底的可控制备

李宏涛[1]，王佩[1,*]，房喻[1,**]

[1]陕西师范大学化学与化工学院应用表面与胶体化学教育部重点实验室，
陕西省新概念传感器及分子材料重点实验室，西安，710119

*Email: wangpei630@snnu.edu.cn，**Email: yfang@snnu.edu.cn

表面增强拉曼散射（SERS）技术因其卓越的灵敏度和分子识别能力，在痕量检测、生物传感和原位分析等领域具有广泛应用前景。然而，实现高性能SERS衬底的均匀、可控、可重复制备极具挑战。针对这一问题，本工作利用纳米膜的限域生长效应，实现了银纳米颗粒（AgNPs）和AgNPs分布的可控生长。由此，得到了结构均一且透明的SERS衬底。该衬底因纳米膜的存在而具有突出的柔韧、自支撑、无缺陷特点。利用这一性质，实现了对复杂表面样品的原位实时灵敏检测（罗丹明6G（R6G）：增强因子（EF）可达2.1×10^{10}，检测限（DL）低至1.2×10^{-15} mol L^{-1}）。该制备方法温和、重复性突出（60次重复制备没有显著差异）。室温真空至少可保存三个月，衬底结构和传感性能不因放大制备（25.0 cm^2）而改变。借助所制备的衬底和手持式拉曼光谱仪，实现了对樱桃表面残留福美双的灵敏检测（24.1 ng cm^{-2}）。本工作不仅为高性能SERS衬底的构建提供了新选择，也为SERS技术在环境监测、食品安全及生物医药等领域的原位在线分析应用奠定了基础。

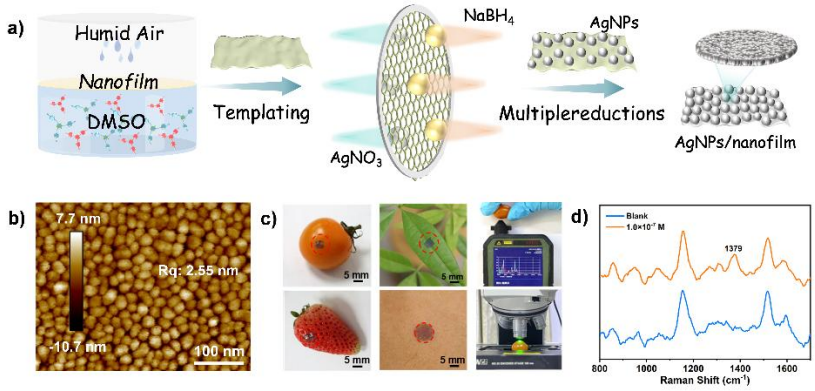


图 1： a) 以纳米薄膜限域生长柔性 SERS 衬底的制备流程。b) 纳米薄膜表面银纳米颗粒的形貌及粗糙度。c) 衬底在不同样品表面贴附及原位分析的照片。d) 衬底结合手持式拉曼光谱仪对农残的原位实时测试。

关键词： SERS衬底；纳米膜；Ag纳米颗粒；界面化学；原位分析

参考文献：

[1] Zhai, B.; Tang, J.; Liu, J.; Wang, H.; Liu, K.; Peng, J.; Fang, Y. *J. Colloid Interface Sci*. **2023**, *647*, 23-31.

[2] Luo, Y.; Zhai, B.; Li Min.; Zhou W.; Yang J.; Shu Y.; Fang Y. *J. Colloid Interface Sci*. **2024**, *660*, 513-521.

具有光催化自清洁功能的单层 MoS_2/ZnO 微米管复合结构 SERS 性能研究

张鑫蕊[1]，赵艳[1]，蒋毅坚[1]，闫胤洲[1,*]

[1] 北京工业大学，物理与光电工程学院，北京，100124

*Email: yyan@bjut.edu.cn

表面增强拉曼光谱（SERS）技术是一种响应速度快、灵敏度高的光学检测分析方法。近年来，二维过渡金属硫族化合物（2D-TMDCs）SERS 基底凭借其化学稳定性和均匀性等优势备受关注。然而，由于原子级厚度 2D-TMDCs 对激发光吸收能力弱、光场限域能力差等问题，导致其拉曼增强效果远低于传统贵金属纳米结构。氧化物半导体可通过调控生长过程获得支持多种光学模式的微腔结构，光学谐振模式对激发光有较强的光学限域效应。通过范德华力构建 2D-TMDCs/半导体微腔异质结，可显著提高激发光与 2D-TMDCs 的相互作用强度，进一步匹配能级提升电荷转移共振过程，可获得媲美金属纳米结构的 SERS 性能[1]。本工作设计并制备了单层 MoS_2/ZnO 微米管腔（ML-MoS_2/ZnO-MT）异质结 SERS 衬底，利用微管腔中法布里-珀罗（F-P）光学谐振模式调控 ML-MoS_2、ZnO 和待检分子（亚甲基蓝）的多重共振拉曼散射增强过程，包括激子共振、分子共振、电荷转移共振及荧光共振能量转移[2]，实现了增强因子 2.4×10^7、检测限 10^{-12} M 的 SERS 检测能力。此外，ML-MoS_2/ZnO-MT 展现出优异的光催化降解性能，通过紫外激光辐照可实现 SERS 基底的快速自清洁，使该衬底具有循环使用能力。本工作为面向实际应用的低成本、高灵敏度、可循环半导体异质结 SERS 基底设计提供了新方向。

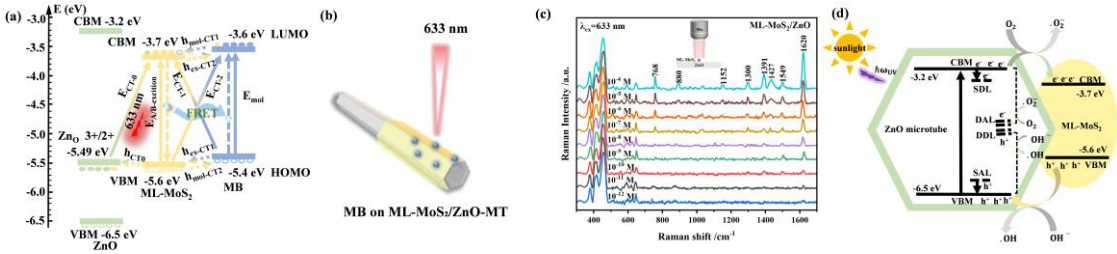


图1： ML-MoS_2/ZnO-MT SERS基底。(a) ML-MoS_2/ZnO-MT在633 nm激发波长下与MB的多重共振示意图；(b) ML-MoS_2/ZnO-MT检测MB的示意图；(c) 10^{-4} M-10^{-12} M浓度MB溶液在共振激发下的拉曼光谱；(d) ML-MoS_2/ZnO-MT光催化机理图。

关键词： 表面增强拉曼光谱；单层MoS_2；ZnO微米管腔；共振拉曼；自清洁

参考文献：

[1] Quan Y, Yao J, Sun Y, et al. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2021**, 327: 128903.

[2] Yao Y, Zhao C, Li X, et al. *Advanced Optical Materials*, **2024**, 12(9): 2301948.

SERS 分析基质金属蛋白酶 MMP-9

刘玮怡[1]，汪鑫[1]，徐抒平[1,2*]

[1] 吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，吉林长春，130012
[2] 吉林大学化学学院超分子化学生物学研究中心，吉林长春，130012

*Email: xusp@jlu.edu.cn

基质金属蛋白酶-9（MMP-9）在癌细胞侵袭、转移和肿瘤生长中起着关键作用。然而，由于MMP蛋白家族结构和功能的相似性，实现MMP-9的高灵敏、高选择性的靶向检测仍面临挑战。为此，本研究开发了一种基于DNA弯曲的表面增强拉曼散射（SERS）新型传感策略，用于MMP-9的超灵敏和高选择性检测。在传感系统中，将MMP-9适配体和亚甲基蓝标记的互补DNA共同修饰在Fe_3O_4@AgNPs基底上。当MMP-9存在时，适配体与目标物结合，从Fe_3O_4@AgNPs上脱离，修饰了亚甲基蓝的互补DNA链由于靠近Fe_3O_4@AgNPs表面，使得SERS信号增强。由于适配体与目标物之间的高亲和力，该传感系统具有高选择性。该方法成功用于检测癌症患者血清和细胞中的MMP-9，依据检测的SERS结果可以有效区分正常细胞和癌细胞以及正常人血清和癌症患者血清。这一策略有望发展成为与MMP-9相关特定癌症诊断及评估癌症发生、发展和转移程度的新方法。

本研究受国家自然科学基金项目（22373041，22173035）、国家重点研发计划（2023YFC3706002）、吉林省科技发展计划项目（20220101046JC）、超分子结构与材料国家重点实验室创新研究课题（2024、2025）资助。

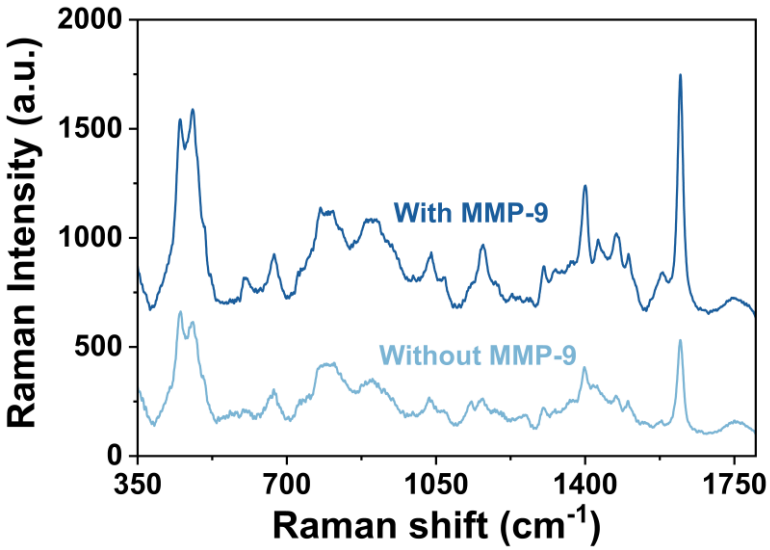


图 1：加入 MMP-9 前后的 SERS 响应图

关键词： 表面增强拉曼；适配体；基质金属蛋白酶-9；亚甲基蓝

基于癌细胞膜的仿生脂质体模型构建及其表面增强拉曼光谱研究

陈一凡[1]，徐抒平[1,2*]

[1] 吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，吉林长春，130012

[2] 吉林大学化学学院超分子化学生物学研究中心，吉林长春，130012

*Email: xusp@jlu.edu.cn

胆固醇是细胞膜脂筏的关键组分，调控细胞膜性质与功能。癌细胞常呈现胆固醇代谢异常，但其膜上纳米级分布动态及药物互作机制不明。甲基β-环糊精（MβCD）可通过其疏水空腔络合胆固醇。本研究利用磷脂/胆固醇二元仿生脂质体模型，排除干扰，探究胆固醇掺杂对膜性质的影响及 MβCD 的络合作用。采用原位 SERS 技术（克服传统破坏性检测局限），建立磷脂/胆固醇特征峰强比（1667/1446 cm^{-1}）指标，实现 MβCD 作用前后膜成分变化的无标记、动态监测。该研究揭示了胆固醇动态行为，为评估 MβCD 等药物效率提供了高灵敏方法，并为 SERS 研究膜蛋白/脂筏奠定方法学基础。

本研究受国家自然科学基金项目（22373041，22173035）、国家重点研发计划（2023YFC3706002）、吉林省科技发展计划项目（20220101046JC）、超分子结构与材料国家重点实验室创新研究课题（2024、2025）资助。

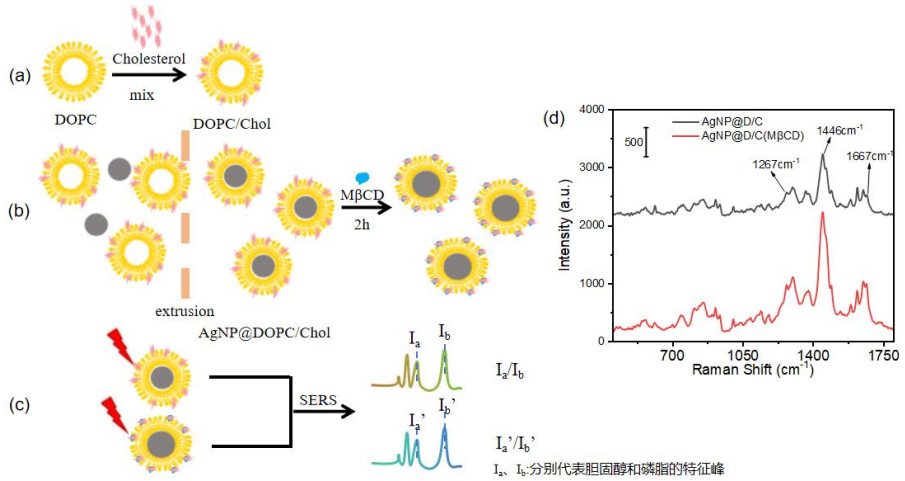


图1：(a) 磷脂和胆固醇混合形成脂质体；(b) 脂质体包裹银纳米粒子的原理图；(c-d) 甲基β环糊精作用前后的SERS光谱；

关键词： SERS；细胞膜；脂质体；胆固醇；甲基β环糊精；

基于微液滴-SERS 的单细胞免疫分析平台：Jurkat T 细胞 IL-2 和 IFN-γ 分泌研究

汪鑫[1]，徐抒平[1,2*]

[1] 吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，吉林长春，130012
[2] 吉林大学化学学院超分子化学生物学研究中心，吉林长春，130012

*Email: xusp@jlu.edu.cn

T细胞在免疫系统中发挥关键作用，尤其在抗肿瘤免疫中，其激活状态直接影响免疫治疗效果。Jurkat细胞作为研究T细胞白血病和TCR信号通路的经典模型，广泛用于探讨T细胞活化机制及功能。传统检测方法如ELISA和流式细胞术虽可定量细胞因子，但对样本量要求高，且难以在单细胞水平实现高灵敏度和多因子同步检测。在单细胞层面对T细胞免疫应答进行精细解析，有助于揭示细胞功能异质性、动态分泌特征及其在肿瘤微环境中的调控机制，这对于评估免疫治疗反应、优化治疗策略具有重要意义。因此，亟需开发一种高灵敏度、多通道、低串扰的单细胞分析技术，以推动对T细胞功能及其在肿瘤免疫治疗中作用的深入理解。本研究构建了一种融合液滴微流控与表面增强拉曼光谱（SERS）的单细胞分析平台，能够高通量、高灵敏地检测T细胞在单细胞水平的细胞因子分泌行为。以Jurkat T细胞为模型，研究了在单细胞水平的活化情况，并且系统评估与正常上皮乳腺细胞（MCF-10A）和不同乳腺癌亚型（MCF-7和MDA-MB-231）共培养条件下的活化状态及IL-2和IFN-γ的分泌特征。结果显示，不同微环境显著影响T细胞的免疫响应，反映出肿瘤微环境对T细胞功能的调控作用。该平台为深入解析肿瘤相关免疫机制提供了技术支持，拓展了单细胞免疫功能研究的新路径。

本研究受国家自然科学基金项目（22373041，22173035）、国家重点研发计划（2023YFC3706002）、吉林省科技发展计划项目（20220101046JC）、超分子结构与材料国家重点实验室创新研究课题（2024、2025）资助。

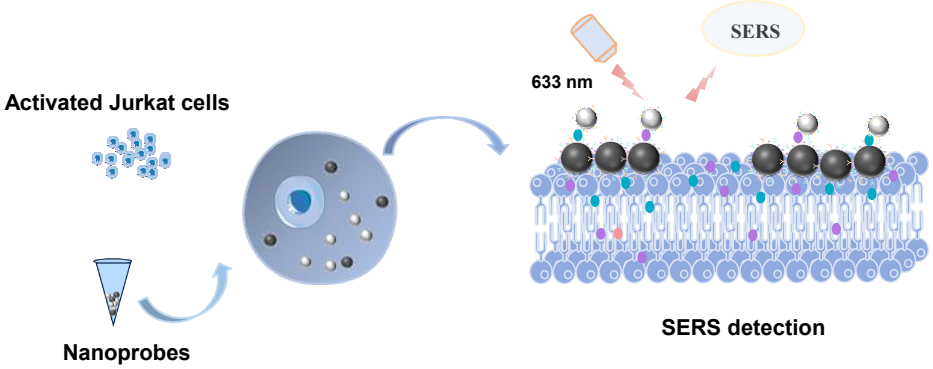


图1：基于微液滴-SERS平台的单细胞免疫分析

关键词：微滴微流体，SERS，单细胞，细胞因子，免疫分析

CHA/HCR 辅助的 SERRS 平台鉴别转基因作物

鲍铖昕[1]，王慧敏[1]，李飞武[2]，刘琳[1,4]，何禹璇[2]，刘相国[3]，尹悦佳[2,*]，徐抒平[1,5*]

[1] 吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，吉林省长春市，130012
[2] 吉林省农业科学院农业质量标准与检测技术研究所，吉林省长春市，130012
[3] 吉林省农业科学院农业生物技术研究所，吉林省长春市，130033
[4] 长春理工大学化学与环境工程学院，吉林省长春市，130022
[5] 吉林大学化学学院超分子化学生物学研究中心，吉林省长春市，130012

*Email: xusp@jlu.edu.cn (S.X.)；yyjqishi@163.com (Y.Y.)

通过整合无酶、空间限制催化发夹组装（SC-CHA）和杂交链反应（HCR），开发了一种不依赖于目标基因扩增的表面增强共振拉曼散射（SERRS）生物传感器，用于检测转基因作物中CaMV35S启动子下游的RNA。首先制备了改性磁性等离子体复合探针（Fe_3O_4/AgNPs/C1），其表面修饰了CHA序列的第一部分。少量目标RNA可激活该探针启动CHA循环（C1与C2交错杂交），该过程受益于复合探针提供的空间限制效应，显著提升CHA效率。生成的CHA产物连接后续HCR循环（H1与H2交错杂交），在探针上方形成DNA纳米线。这些富含GC碱基的双链DNA链可高负载DNA特异性染料（如亚甲蓝），从而实现SERRS检测。该平台具有高度特异性和灵敏度， LOD低至10 fM。本研究具有几个特点：（1）与其他非扩增核酸检测方法相比，其灵敏度降低了2至3个数量级；（2）无需扩增；（3）空间限制提高CHA效率，缩短了反应时间；（3）一步法可以避免气溶胶污染，更适合现场检测。

本研究受国家自然科学基金项目（22373041，22173035）、国家重点研发计划（2023YFC3706002）、吉林省科技发展计划项目（20220101046JC）、超分子结构与材料国家重点实验室创新研究课题（2024、2025）资助。

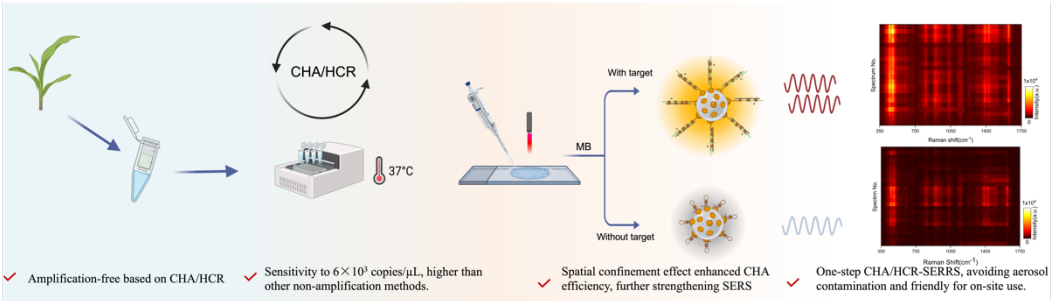


图1：基于一步法无酶、空间限制的CHA/HCR-SERRS传感技术在转基因作物中的应用工作流程

关键词： 免扩增；CHA；HCR；空间限制；SERS

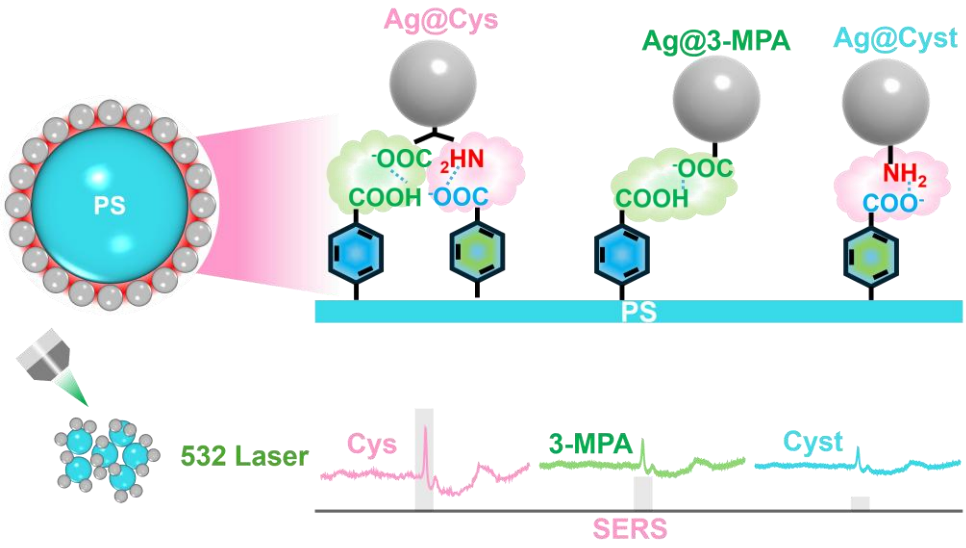
基于氢键的 SERS 方法用于超高灵敏检测水中纳米塑料

余俊杰[1]，李大伟[1*]

[1] 华东理工大学，梅陇路 130 号，200237

*Email: **y30230260@mail.ecust.edu.cn**

表面增强拉曼光谱（SERS）近年来已成为环境风险评估中一种前景广阔的分析工具。然而，实现纳米塑料的超高灵敏检测仍然是一个挑战。本文提出了一种氢键驱动策略，用于聚苯乙烯（PS）纳米塑料的超痕量检测。通过半胱氨酸（Cys）修饰，可以消除银纳米颗粒（Ag NPs）表面的背景干扰。依靠半胱氨酸（Cys）与聚苯乙烯（PS）表面的羧基之间的分子间氢键作用，银纳米颗粒（Ag NPs）能有效附着在PS表面，从而提供丰富的SERS“热点”。因此，该方法可实现对50-800 nm范围内PS的高灵敏检测，检测限低至50 ng L^{-1}，线性范围达2-3个数量级。在利用自来水进行的加标回收实验中，标准PS的回收率在86.7%至106.6%之间。此外，从包装材料中分离出的PS质量浓度为3 mg L^{-1}，与商品化的纳米颗粒跟踪分析结果一致。



（示意图）

图1：氢键检测PS纳米塑料的示意图。

关键词：氢键，表面增强拉曼散射，纳米塑料

用于单分子水平生物传感的可控纳米孔 SERS 平台

梁延博[1]，韩琳[1,*]

[1] *Institute of Marine Science and Technology, Shandong University, Qingdao, 266237, China*

*Email: 202321141@mail.sdu.edu.cn

摘要：

表面增强拉曼光谱（SERS）是一种基于光、纳米结构和分子之间相互作用的重要分析技术。其增强效率依赖于SERS衬底表面局部电磁场和电荷转移的协同作用产生的“热点”。然而，由于这些热点的增强特性和分布不均匀，只能有效增强有限数量的靶分子。纳米孔结构的“密闭空间效应”进一步提高了热点的定位精度，增加了热点区域的分子富集，从而为单分子（SM）分析提供了新的机会。首先，综述了世纪之交以来SERS技术的发展历程，并总结了研究方向。然后讨论了SERS的增强机制以及影响纳米孔SERS热点的关键因素。本文从材料体系和孔隙形貌的角度，重点研究了多孔纯金属和多孔金属-非金属复合材料两种类型的SERS基体。本文从随机无序和规则有序两种孔隙结构的角度系统地探讨了多孔SERS平台的制备策略和性能。此外，本文分析了纳米孔结构在基于SM SERS的定量分析中的显著进展。本综述还涵盖了多孔SERS平台在医疗保健中的应用，特别是在与预防、筛查和预后相关的传感研究中，包括健康预防检测、气体分子检测、液体活检以及肿瘤成像和治疗等领域。最后，基于当前的研究，该综述提出了关于纳米孔SERS底物的关键见解。

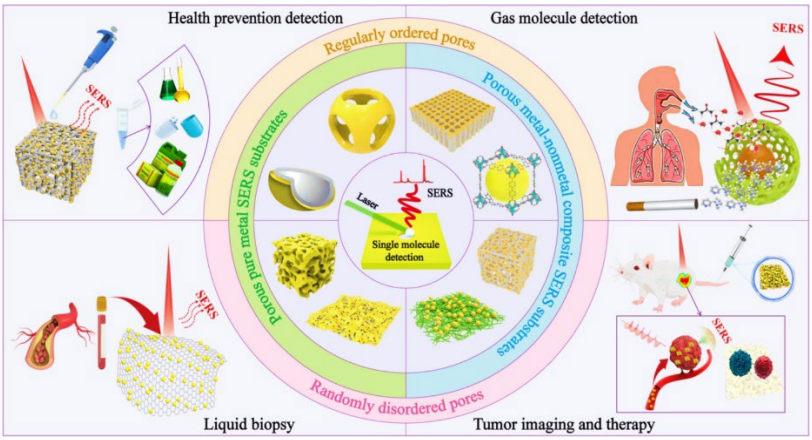


图1：纳米孔SERS平台概述

关键词：SERS；等离子体纳米材料；纳米孔

参考文献：Yanbo Liang, Mingyuan Sun, Chao Wang, Hongpeng Zhou, Yunhong Zhang, Xue Zhang, Miao Huang, Xiaoshuang Chen, Wei Lu, Jun Li, Hong Liu, Yu Zhang*, Lin Han*, Controllable nanopore SERS platform for single-molecule level biosensing, ***Coordination Chemistry Reviews***, 2025, 530, 216476.

酪胺触发动态热点工程用于霉菌毒素的超灵敏 SERS 检测

包美淇[1]，张谦[1,*]，夏佳睿[2,*]

[1] 辽宁大学化学学院，辽宁沈阳，110036
[2] 中国医科大学健康科学研究所，辽宁沈阳，110122

*Email: zhangq@lnu.edu.cn, jrxia@cmu.edu.cn

由于生物样品中分析物浓度极低且种类繁多，如进一步提升灵敏度仍然是SERS应用中的一大挑战。构建富含“热点”的等离子体纳米结构被认为是显著增强SERS灵敏度的有效策略。然而，传统SERS基底固定热点配置面临显著挑战：固定的纳米孔隙限制了分析物的渗透，且不受控的纳米粒子聚集会影响可重复性[1]。为解决这一问题，创建动态“热点”成为一种有趣的策略[2]。本研究中，我们设计了一种酪胺介导的多维等离子体耦合系统，将动态胶体组装与界面电磁增强结合，实现了超灵敏检测黄曲霉毒素B_1（AFB_1）。具体而言，我们首先利用金纳米粒子单层功能化4-mercaptobenzoic acid（4-MBA）探针建立基线电磁“热点”，随后通过辣根过氧化物酶引导的酪胺功能化银纳米粒子进行苯酚聚合，生成次级等离子体结构。免疫检测机制将AFB_1与抗体结合的事件转化为银纳米粒子沉积衰减信号，从而实现了可量化的检测结果。这一胶体界面策略在SERS平台中成功实现了可编程等离子体耦合与生物识别的结合，为其在食品安全、医学诊断和环境监测等领域的应用奠定了坚实的基础。

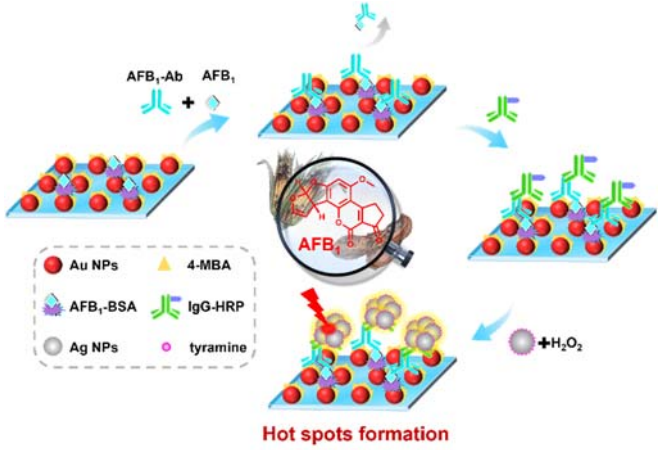


图1：酪胺介导的动态热点工程SERS生物传感检测黄曲霉毒素B_1

关键词：表面增强拉曼散射；动态热点；酪胺；金属纳米颗粒；黄曲霉毒素B_1

参考文献：

[1] Zhang, C., Li, C., Yu, J., Jiang, S., Xu, S., & Yang, C., et al. *Sensors and Actuators B: Chemical*. **2018**, *258*, 163-171.

[2] Park, E.; Jin, S.; Park, Y.; Guo, S.; Chang, H.; Jung, Y.M. *Journal of Colloid and Interface Science*. **2022**, *607*, 782-790.

用于均一性与可靠性分子检测的先进 SERS 平台

Advanced SERS Platform for Uniform and Reliable Molecular Detection

朱体颖 [1,2,3]，裴志阳 [2]，谭平恒 [3]，李振 [2,*]，张超 [2,*]

[1] 北京工业大学，北京市朝阳区平乐园 100 号，100124
[2] 山东师范大学，山东省济南市长清区大学路 1 号，250358
[3] 中国科学院半导体研究所，北京市海淀区清华东路甲 35 号，100083

*Email: lizhen19910528@163.com，czsdnu@126.com

信号均一性是实现可靠且可定量表面增强拉曼散射（SERS）检测的关键，但局域热点效应与咖啡环效应常导致信号分布不均。本文构建了分级银纳米孔-微碗结构（HANM），并结合超疏水/超亲水（SHB/SHL）调控，以同时扩大热点区域并抑制咖啡环效应，从而实现分析物的均匀沉积与稳定增强。以罗丹明 6G 为报告分子（10^{-9}–10^{-12} M）验证，二维 mapping 显示整体 SERS 信号高度均一，200 个采样点的强度相对标准偏差仅为 3.81%，彰显其信号同质性检测潜力。在五个不同水源样品中检测双酚 A 时，该平台亦获得稳定一致的信号响应。结果表明，HANM-SHB/SHL 平台兼具热点增强与信号均一化双重优势，可为复杂样品的高灵敏度、可定量分子分析提供可靠途径。

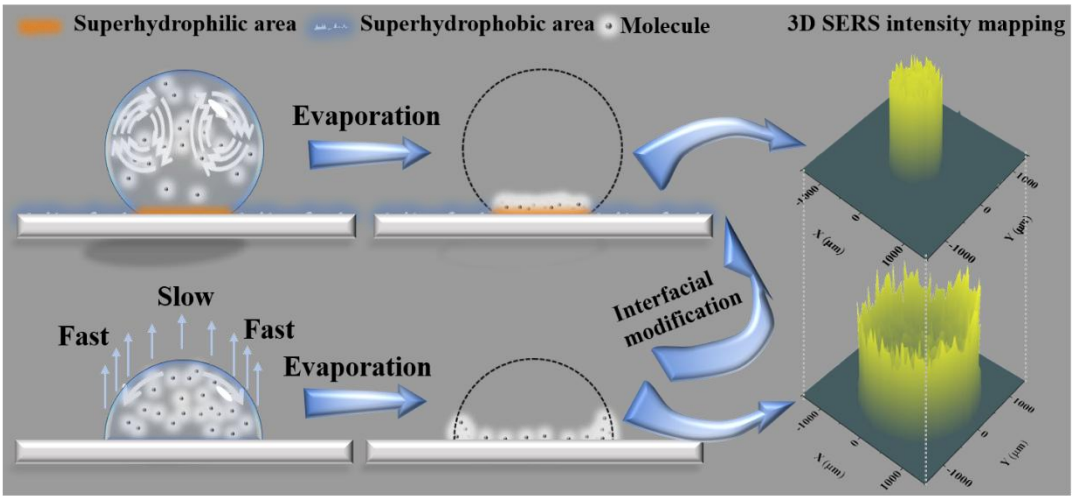


图1：报告分子液滴在经SHB/SHL修饰、未修饰的HANM表面的蒸发示意图及其对应的SERS信号三维mapping图

关键词： 表面增强拉曼散射；分级Ag腔；浸润性；咖啡环

参考文献：

[1] Zhu, T., Pei, Z., ... Tan, P.H., Li, Z.& Zhang, C. *Anal. Chem.* **2024**, 96, 52, 20612–20621

基于双功能分子 IR808 的共振 SERS 探针结合 SA 试纸条用于猴痘病毒的高灵敏快检

李红梅[1]，张凯乐[1]，张月皎[1,*]，李剑锋[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院、厦门大学附属第一医院临床研究所，厦门 361005，中国

* E-mail: Li@xmu.edu.cn

猴痘病毒作为高风险人畜共患病毒，高灵敏检测是防控关键。本文基于抗原抗体特异性识别原理，利用具共振拉曼效应与捕获抗体的双功能分子IR808，制备了超敏表面增强共振拉曼散射（SERRS）生物传感探针（金@IR808@抗体）；结合生物素—链霉亲和素（Bio-SA）系统强亲和力，制得Bio抗体和SA试纸条进行检测；设计的条状光斑拉曼探头0.2 mm的光斑确保对T线的全覆盖与SERS谱稳定性。实验显示，该双功能探针传感器检测灵敏度比其他高敏分子至少低2个数量级。在咽拭子体系中，0.5%的S9表面活性剂凭借其优异的疏水优势降低了复杂基质干扰产生的假阳性，使得最终检测限达到1 pg。该体系依托双功能拉曼探针与Bio-SA系统，保证了SERS信号的强度、更高效的抗体附载量以及试纸条捕获探针能力；且验证了S9抑制假阳性的有效性。实验结论证明该方案对基于SERS技术实现猴痘病毒的现场高灵敏度POCT快检手段有一定参考价值[1]。

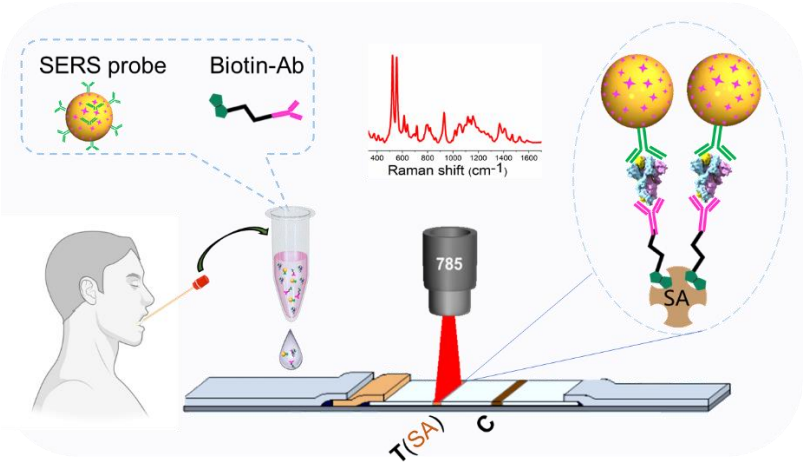


图1： Au NPs@IR808@Ab SERS探针结合SA试纸条检测猴痘病毒蛋白的流程图

关键词： SERRS；IR808；试纸条；猴痘病毒；咽拭子

参考文献：

[1] H. Li, K.-L. Zhang, Y.-J. Zhang, J.-F. Li. Spectrochim. Acta A. 2025, 331, 125761.

席夫碱反应辅助的高灵敏 SERS 内标策略用于茶叶中香兰素类分子检测

陈宇佳[1]，张月皎[1,*]，李剑锋[1,*]

[1] 厦门大学能源学院化学与化学工程学院固体表面物理化学国家重点实验室，361005，厦门
*Email: Li@xmu.edu.cn

香兰素被广泛用作食品工业中的添加剂，然而过量摄入香兰素会引发恶心、头晕、过敏等不适症状。目前多种检测香兰素含量的方法受限于前处理复杂、检测耗时以及昂贵的仪器成本。本研究提出一种基于希夫碱反应的表面增强拉曼光谱(SERS)检测方法，将4-氨基苯硫酚(4-ATP)修饰于银纳米立方(Ag NCs)表面，4-ATP的氨基可与香兰素的醛基发生希夫碱反应，实现对香兰素的高灵敏检测。该方法无需繁琐的前处理，对实际茶叶样品中香兰素的检测限可达到 10 μg/L，且在不同茶叶中的醛类香精检测表现出良好通用性。本研究为基于希夫碱反应实现醛类香精的高灵敏检测提供了一种通用策略，同时也展现出SERS技术在香精分子检测领域的巨大应用潜力。

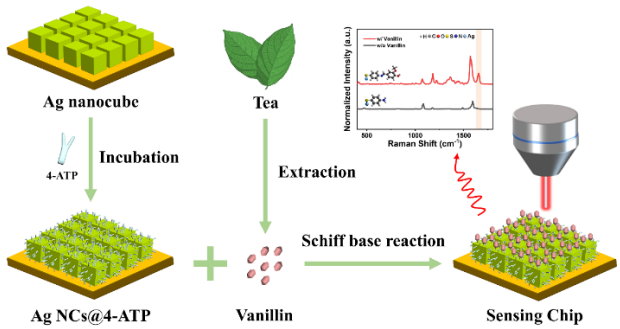


图1：基于SERS的希夫碱策略检测茶叶中香兰素的示意图。

关键词：表面增强拉曼光谱；席夫碱反应；香兰素

参考文献：

[1] Zhou, M.; Li, C. L.; Zhu, Z. W.; Huang, L. R.; Dai, C. H.; Zhang, L. H.; Fakayode, O. A.; Zhou, C. S. Advances in catalytic conversion of lignin to vanillin using ionic liquids and deep eutectic solvents. Food Chemistry, 2025, 487, 144638.

[2] Amr, K.; Rasheed, D. M.; Khachila, M.; Farag, M. A. Production, extraction, and authentication of natural and non-natural vanillin. A comprehensive review and economic future biotechnology perspectives. Food Chemistry, 2025, 466, 142249.

基于钯纳米立方二聚体单颗粒的间隙增强拉曼散射及其在钯催化反应原位检测中的应用

王丹[1]，石发兴[1]，胡艳芳[1]，谢微[1,*]

[1] 南开大学化学学院，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*Email: wei.xie@nankai.edu.cn

构建兼具催化活性与等离激元活性的双功能纳米结构是利用无标记表面增强拉曼散射光谱（SERS）技术对非均相催化反应进行原位表征的关键。本工作中，我们将具有催化活性的过渡金属钯纳米粒子组装成二聚体，成功将单体水平上较弱的等离激元活性提升数个数量级，从而在单二聚体水平上实现了对各种重要的非均相催化反应的原位SERS检测。具体而言，我们将钯纳米立方体通过双巯基分子可控组装成间隙约1纳米的单个二聚体，在保留其固有催化活性的同时展现出了充足的SERS增强性能。理论模拟结果显示，单二聚体结构间隙处具有最显著的局域电磁场增强，相应的理论SERS增强因子约为10^4，这使其能够作为一种单一组分-双功能纳米平台对Suzuki-Miyaura偶联反应进行原位检测。使用具有单颗粒灵敏度的纯过渡金属基SERS增强基底检测催化反应的尝试改变了必须将货币金属与催化活性金属相结合的传统模式，避免了等离激元组分对催化性能产生干扰。基于二聚体组装的等离激元活性增强方法可以扩展到其他过渡金属纳米颗粒，显著扩大货币金属之外的其他材料的SERS适用性，为非均相催化反应的原位SERS表征提供了普适性技术方案。

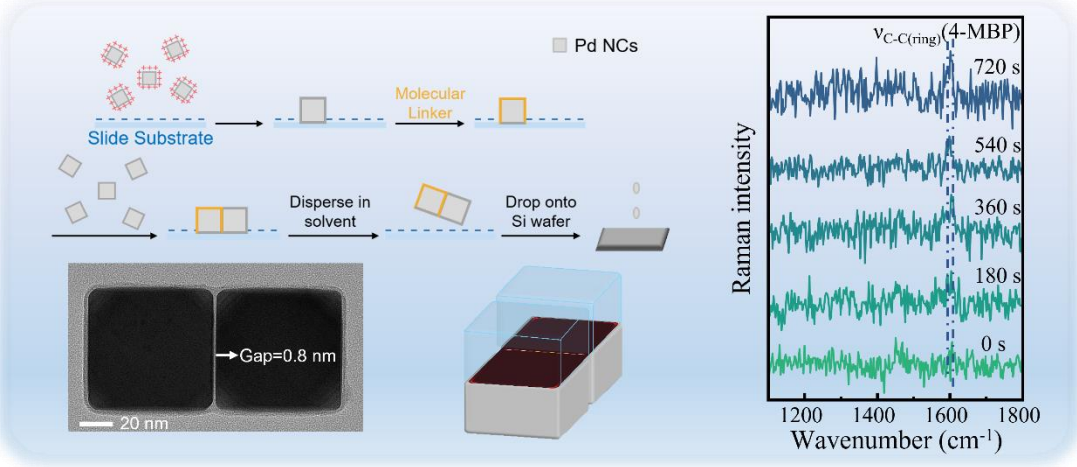


图1：双功能Pd纳米立方体二聚体的组装及其单颗粒反应的原位SERS光谱检测

关键词： 原位SERS检测；纳米二聚体；钯立方体

参考文献：

[1] Gargiulo, J., Herran, M., Violi, I. L., Sousa-Castillo, A., Martinez, L. P., Ezendam, S., Barella, M., Giesler, Helene., Grzeschik, R., Schlücker, S., Maier, S. A., Stefani, F. D., Cortés, E. *Nat. Commun.* **2023**, *14*, 3813.

钯纳米棒的可控合成及其 SERS 检测与催化性能研究

杜奥旋[1]，王丹[1]，谢微[1,*]

[1] 南开大学化学学院，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*Email: wei.xie@nankai.edu.cn

等离激元金属纳米材料由于其独有的与光相互作用的能力，在光化学、光谱学和催化等领域受到广泛关注。材料的等离激元共振特性和自身的形貌、大小和材料种类等有关，因此等离激元纳米材料的可控合成直接影响到材料的相关性能。本工作中，我们利用了简单的种子生长法，通过调控纳米颗粒生长中的表面活性剂种类、温度、酸碱性、种子量等条件，成功合成了一系列长度、宽度和长径比可控的钯纳米棒。合成的钯纳米棒具有可控的近红外-可见光区域（520 nm-1200 nm）的等离激元共振吸收。我们将其作为SERS和催化基底用于原位SERS检测红外光促进的钯催化Suzuki碳碳偶联反应，证明了其作为SERS基底和光催化反应器的潜力。通过FDTD计算模拟材料的表面电场，结果证明了材料的等离激元共振会极大增强材料末端的局域电场强度，增强了材料的SERS灵敏度及催化性能。此项工作的钯纳米棒具有可控的大小和可调的近红外等离激元共振特性，扩大了钯纳米结构的光催化应用范围，实现了兼具反应活性与近红外等离激元活性的钯基双功能纳米结构的构建。

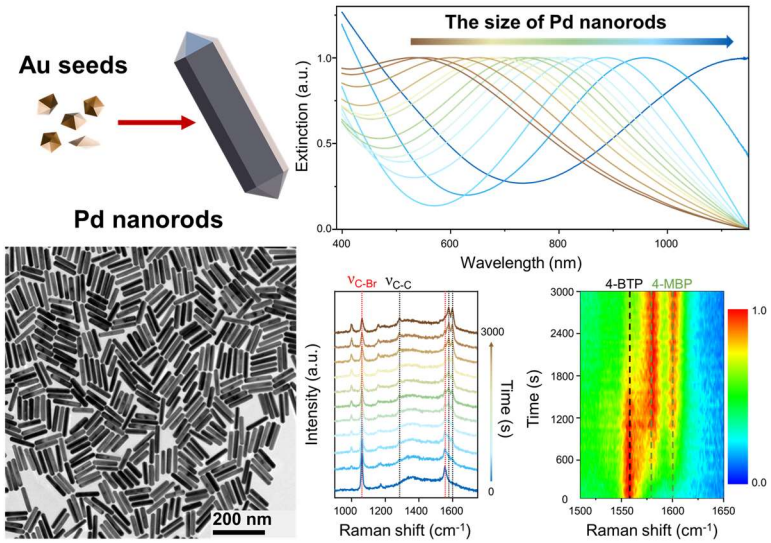


图1：钯纳米棒的合成示意图、表征及其在近红外785 nm激光下原位SERS检测钯表面Suzuki反应。

关键词：钯纳米棒；种子生长法；SERS；近红外催化；Suzuki偶联反应

参考文献：

[1] Wang, D.; Shi, F.; Jose, J.; Hu, Y.; Zhang, C.; Zhu, A.; Grzeschik, R.; Schlücker, S.; Xie, W. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 5003.

[2] Huang, X.; Tang, S.; Mu, X.; Dai, Y.; Chen, G.; Zhou, Z.; Ruan, F.; Yang, Z.; Zheng, N. Nat. Nanotech. **2010**, *6*, 28.

可见光照射下热电子驱动铜纳米颗粒等离子体界面化学

张钊[1]，李永龙[1]，谢微[1,*]

[1] 南开大学，化学学院，先进能源材料化学教育部重点实验室，300071

*Email: wei.xie@nankai.edu.cn

等离子体激元激发所产生的热电子能够在可见光照射下诱导化学转化，然而，由于难以实现对热电子的持续利用，六电子等离激元激发过程仍然较为罕见且极具挑战。此外，目前的等离子体激元光催化剂主要依赖于贵金属纳米材料，例如金和银纳米结构。在本研究中，我们探索了在可见光照射下，利用非贵金属铜纳米颗粒实现六电子化学转化的等离子体催化过程。研究结果表明，无需添加化学还原剂，成本低廉的铜纳米颗粒即可高效催化4-硝基苯硫酚（4-NTP）发生等离子体辅助还原，生成4-氨基苯硫酚（4-ATP）——这一反应在相同条件下无法通过贵金属金或银纳米颗粒实现。通过原位表面增强拉曼光谱（SERS）分析，我们提出假设：界面水分子可补偿铜表面因等离子体激元激发所产生的高能热空穴，从而提供充足的热电子以驱动六电子光催化反应。在可见光激发下，铜催化剂表面产生等离子体诱导的热电子-空穴对。借助质子耦合电子转移过程，热电子持续转移至吸附于铜纳米颗粒表面的4-NTP分子上。由于铜纳米颗粒的费米能级较低（－7.1 eV），费米能级以下的热空穴表现出极强的氧化能力。随着热空穴在催化剂表面积累，界面水分子可与高能热空穴发生反应，从而恢复铜表面的等离子体状态。一系列对照实验表明，酸性水溶液在推动该六电子光催化还原反应中发挥了关键作用。这一有趣的现象通过原位SERS光谱得以观测，该手段不仅提供了对等离子体光催化反应动力学的表征，也检测到了铜表面关键中间物种（Cu–Oad）的存在。这一光催化策略为太阳能驱动的化学反应提供了令人振奋的新途径，通过利用地球上丰富的金属Cu作为主要催化剂实现化学能转换，不同于以往依赖于贵金属（金和银）的等离激元催化体系。

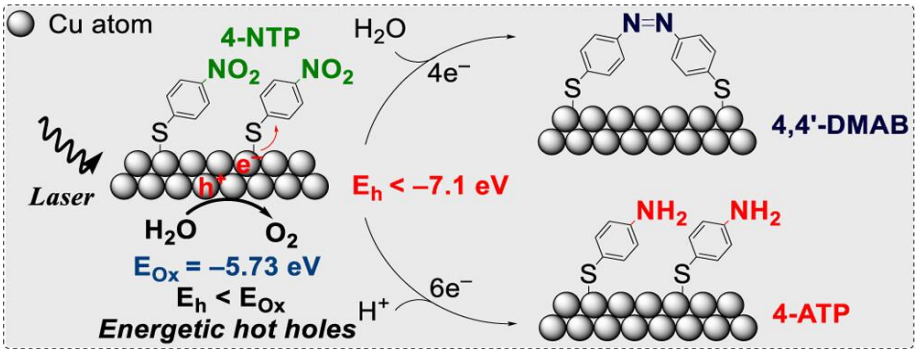


图1：可见光照射下热电子驱动铜纳米颗粒4NTP还原

关键词：等离子体催化，超热电子，界面化学，多电子转移，SERS

参考文献：

[1] Bai, S.; Qiu, H.; Song, M.; He, G.; Wang, F.; Liu, Y.; Guo, L. Porous Fixed-Bed Photoreactor for Boosting C−C Coupling in Photocatalytic CO_2 Reduction. eScience 2022, 2, 428−437.

Chiral Gold Nanopropellers: Engineering Plasmonic Chirality for Enantioselective Recognition through Stereoselective Binding

Tingting Ren[1], Muhammad Haroon[1], Xiao You[1,*]

[1]School of Engineering, Westlake University, Hangzhou, Zhejiang Province 310030
[2]Key Laboratory of Intelligent Low-Carbon Biosynthesis of Zhejiang Province, Westlake University, Hangzhou, Zhejiang Province 310030

*Email: youxiao@westlake.edu.cn

The sensitive and selective detection of chiral molecules remains a significant analytical challenge, often limited by weak chiroptical signals and the insufficient stereospecificity of conventional plasmonic substrates. Herein, we report a novel platform that synergistically integrates intrinsic plasmonic chirality with molecular recognition by employing cysteine-functionalized chiral gold nanopropellers (CGNPs) as a highly stereoselective Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) substrate. Utilizing phenylalanine as a model analyte, the platform demonstrates a powerful "handedness-matching" effect, achieving a high chiral discrimination ability (CDA) of 36.0% and a limit of detection (LOD) as low as 2.75 μM for L-phenylalanine. The superiority of this integrated approach is confirmed by control experiments, where bare CGNPs showed minimal selectivity and achiral plasmonic substrates with chiral functionalization exhibited only moderate performance (CDA≈15.6%). The underlying mechanism is elucidated by computational modeling; Finite-Difference Time-Domain (FDTD) simulations reveal stronger near-field intensities for handedness-matched CGNP-analyte complexes, while Density Functional Theory (DFT) calculations corroborate this with lower binding energies and shorter interaction distances, confirming a more stable binding configuration. The platform's robustness is validated by Principal Component Analysis (PCA) of SERS spectra, which provides unambiguous separation of L/D enantiomers, and by reproducible spectral peak shifts (~10–16 cm^{-1}) that significantly exceed the instrumental resolution (~1.5 cm^{-1}). In conclusion, by successfully coupling engineered plasmonic chirality with stereoselective molecular binding, we have established CGNPs as a robust and highly sensitive SERS platform for enantioselective analysis, paving the way for next-generation analytical technologies.

Keywords: Chiral Gold nanoparticle, SERS, enantioselectivity, Nanopropellers, Chirality

基于 SERS 技术观测 MOF 吸附/催化行为

柯衍菁 [1]，谢微 [1,*]

南开大学化学学院，天津，300071

*Email: wei.xie@mail.nankai.edu.cn

金属有机骨架材料（Metal-organic framework, MOFs）由于其优异的比表面积和可调孔径等特点具有广泛的应用[1]。然而，MOF的多孔结构和活性位点分布复杂等特点使得其吸附和催化等行为机理难以解析，这严重阻碍了MOF结构的精确设计和进一步发展。表面增强拉曼光谱（Surface-enhanced Raman spectroscopy, SERS）作为一种高灵敏度、无损的表面分析技术具有原位监测并解析各种反应机理的巨大潜力[2]。然而，MOF的超大体积与SERS的“表面”特性并不匹配，这极大限制了SERS技术在MOF吸附/催化行为解析方面的应用[3]。鉴于此，本文在常温常压下设计合成了一种具有超薄MOF壳层(~5 nm)的Au@UiO-66核壳结构。实验结果表明，一方面，Au拓宽了UiO-66的光响应范围，通过LSPR热电子注入增强了其光催氨氧化性能，另一方面，Au作为SERS基底，超薄的MOF壳层允许将被吸附分子固定在Au的“热区”范围之内，这使得Au@UiO-66结构具有更短的SERS响应时间并能够原位监测到MOF在吸附/催化过程中的中间物种。这项工作解决了MOF体积与SERS“表面”特性不适配的问题，为SERS技术在MOF行为分析方面发挥作用提供了一条可行途径。

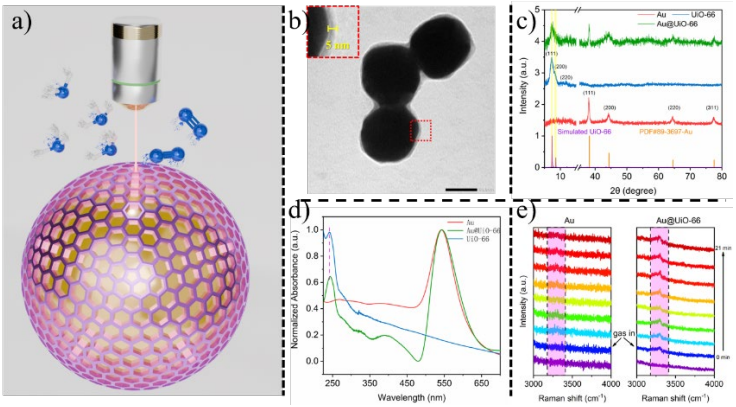


图1：a) SERS监测Au@MOF核壳行为示意图。b) Au@UiO-66的TEM图。Au和Au@UiO-66的 c) XRD、d) 紫外和 e) 拉曼图谱。

关键词：UiO-66；SERS；核壳结构；氨氧化

参考文献：

[1] Sun N.; Shah S. S. A.; Lin Z. *Chemical Reviews*. **2025**, *125(5)*, 2703-2792.
[2] Zheng X; Ye Z; Akmal Z. *Chemical Society Reviews*. **2024**, *53(2)*, 656-683.
[3] Cheng J; Liu Y; Wang P. *ACS Materials Letters*. **2023**, *5(10)*, 2776-2784.

高精度纳米压印图形化制备大面积 SERS 芯片的研究

谭伶俐[1]，张轩铭[2]，娄飞，吴春卉，程鑫[1,*]

[1]南方科技大学，广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055

*Email:12432555@mail.sustech.edu.cn

高精度图案化表面增强拉曼光谱(SERS)基底是一种通过精确控制基底的微纳结构和尺寸而得到的具有选择性和多功能性的SERS基底，其有利于实现SERS信号的高重复性，并可用于多种目标物的检测与应用。然而，现有微纳加工技术（如电子束曝光(EBL)[1]、聚焦离子束刻蚀(FIB)[2]）普遍存在工艺复杂、成本高昂、难以大面积制备等局限，制约了SERS技术的应用拓展。因此，开发低成本、大面积制备高增强电场金属薄膜的简易工艺至关重要。本工作展示了通过纳米压印光刻（NIL）制备的、由金纳米光栅等高精度结构组成的金属SERS基底。采用纳米压印光刻结合电子束蒸发镀膜的技术制备具有百纳米线宽的金纳米光栅SERS基底，可显著降低图案化增强基底的制备成本与难度。进一步通过原子层沉积（ALD）在压印模板上沉积Al_2O_3层，实现光栅线宽的有效缩减。系统研究光栅线宽及金膜厚度等几何参数对基底SERS增强性能的影响。得益于光栅间隙产生的高密度“热点”，该基底展现出优异的分析物检测灵敏度，使得本工作中所开发的具备高重复性、高性价比、高灵敏度的SERS基底在生物医学、精确分子鉴定和现场环境监测等领域展现出广泛的应用前景。

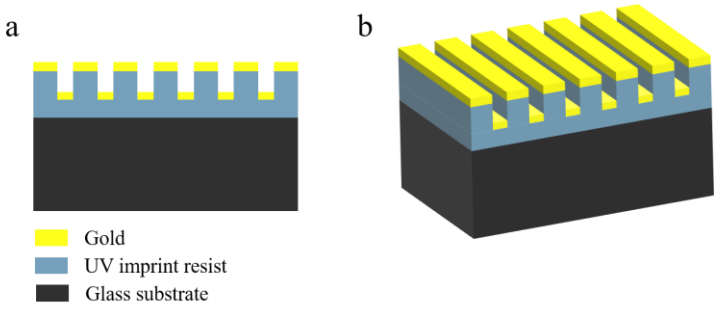


图1：纳米压印技术制备的Au光栅结构作为SERS基底示意图

关键词：纳米压印；SERS基底；高精度图案化

参考文献：

[1] Chen Y F，Microelectronic Engineering，2015，135，57.

[2] Qu M N，Shen Y L，Wu L Y，Xuecheng Fu，Precision Engineering，2020，62，10.

动态 Ni^{2+}循环于 Fe_3O_4 表面揭示中性 OER 的催化剂–电解液协同演化

周泓[1]，谢微[1,*]

[1] 南开大学化学学院，天津 300071；

*Email: 2120231274@mail.nankai.edu.cn

中性体系中析氧反应（OER）动力学迟缓，传统固相合金策略受限于活性-稳定性权衡。本工作提出电解质驱动的动态Ni^{2+}循环机制，在Fe_3O_4表面实现固-液协同催化。原位拉曼与表面增强拉曼实时追踪Ni^{2+}的“吸附-晶格掺杂-γ/β-NiOOH相变-脱附”完整循环，证实Fe–O–Ni瞬态活性位自再生。电化学测试表明，该策略在0.1 M磷酸盐缓冲液（pH=8）中活性与稳定性均优于静态合金对照。机制分析揭示晶格畸变优化*OOH吸附，突破传统合金设计范式，为中性水氧化提供普适的“电解质即催化剂”新思路。

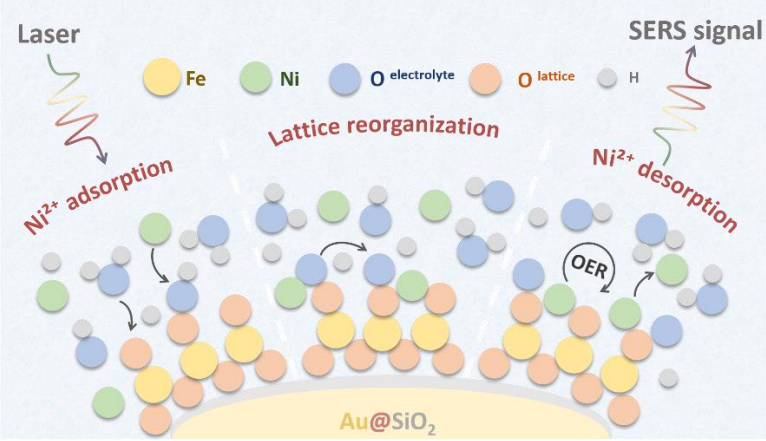


图1：动态Ni^{2+}循环的中性OER原位SERS示意图

关键词：动态循环；中性OER；催化剂-电解液协同

参考文献：

[1] Klaus, S.; Cai, Y.; Louie, M. W.; Trotochaud, L.; Bell, A. T. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 7243–7254.

[2] Wang, Z. Y.; Xiao, H. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 29540–29550.

[3] Kuai, C. G.; Liu, L. P.; Hu, A. Y.; Zhang, Y.; Zhang, Y. X.; Xia, D. W.; Nordlund, D.; Sokaras, D.; Decarolis, D.; Gianolio, D.; Xin, H. L.; Li, L. X.; Lin, F. *Nat. Catal.* **2025**, *8*, 523–535.

基于金纳米粒子的尺寸及组装结构精准调控 SPR 效应

翁婷炜[1]，吴德印[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院，表界面化学全国重点实验室，福建 厦门 361005

*Email: dywu@xmu.edu.cn

发展定量表面增强拉曼光谱（SERS）的关键在于可精准调控的SERS基底。SERS的增强机制主要依赖于表面等离激元共振（SPR）效应。通常，金、银、铜等贵金属纳米粒子在可见光区展现出很强的SPR效应，从而显著增强其表面的电磁场。目前，许多SERS基底的研究侧重于增强因子的提升和制备工艺的简化，却普遍忽视了SERS增强机制中SPR位置与激发激光波长之间的匹配关系。为了解决这些问题，该工作提出了一种制备高度有序金纳米球组装单层膜的方法，并将其用于制备均匀和可调控的SERS基底[1]。通过设计不同尺寸和间隙的金纳米粒子阵列结构，可以精确调控其SPR峰的位置，使其与激发光或拉曼散射光的波长有效匹配，进而优化SERS增强效果。我们系统地合成了不同直径（16-80 nm）的金纳米球形粒子，并将它们组装成有序的阵列，进而精准调控SPR位置。紫外-可见（UV-Vis）吸收光谱显示，随着纳米颗粒尺寸的增大，吸收峰有明显的红移（图1a）。扫描电子显微镜（SEM）表征证实形成了具有六方紧密堆积的均匀阵列（图1b）。我们的方法有效地为设计可靠的SERS基底提供了一种有前途的策略。最后，这些高度有序的SERS基底可以修饰到金属电极表面，从而实现在电化学电势调制下进行原位SERS测量，提供对表面反应的研究。

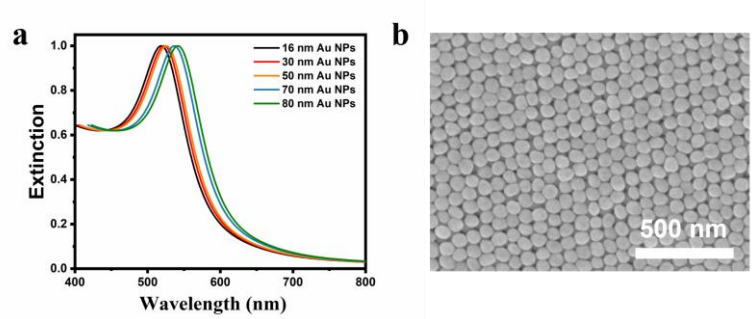


图 1：Morphology of Au NPs. a, Extinction spectra of Au NPs with size of 16 nm, 30 nm, 50 nm, 70 nm and 80nm dispersed in aqueous solution. b, SEM image of self-assembled nanostructures of 80 nm citrate-stabilized Au NPs.

关键词：表面等离激元共振；自组装；电化学

参考文献：

[1]Xiahou, Y.; Liu, J.; Zheng, J.; Yi, J.; Wang, D.; Xia, H. *Chem. Eng. J.* 2023, 460: 141835.

在 AuNPs 自组装单层膜基底上 MG 分子表面增强拉曼光谱的动力学吸附模型研究

张雨琲[1]，吴德印[1,*]

[1]厦门大学化学化工学院，福建 厦门，361005

*Email: dywu@xmu.edu.cn

孔雀石绿（MG）可通过其分子中的氨基氮原子吸附在贵金属基底表面，并产生强烈的表面增强共振拉曼散射（SERS）信号，因而成为一种高灵敏度的SERS探针分子。本研究通过检测MG在金纳米粒子自组装单层膜上SERS信号强度随时间的变化，系统地探究了其在固-液界面的吸附动力学和等温吸附行为。

图1给出实验测定MG在不同浓度下SERS信号随时间的变化和几种吸附等温式模型。结果表明，在所有浓度下MG的吸附动力学曲线均呈现典型的S型特征。初始吸附阶段速率较慢，符合一级自催化吸附动力学模型。在吸附初期，MG分子在金纳米粒子表面形成"成核位点"，这些位点诱导后续分子以更有序的方式排列，从而加速后序吸附过程。随着表面吸附量增加，分子间排斥作用逐渐显现，成为吸附过程的主要阻力，导致吸附速率减慢，最终系统达到吸附平衡状态。在吸附平衡时，表面吸附MG分子的SERS强度与溶液浓度关系较符合Sips等温吸附模型，揭示了吸附过程中MG分子之间存在明显的侧向相互作用。

本研究通过SERS 技术实时跟踪MG的吸附过程，结合动力学和热力学模型分析，揭示了其在纳米结构金表面的吸附机制。研究结果为MG作为定量SERS探针分子的应用提供了理论依据，也为理解类似染料分子在固-液界面上的吸附行为提供了参考。

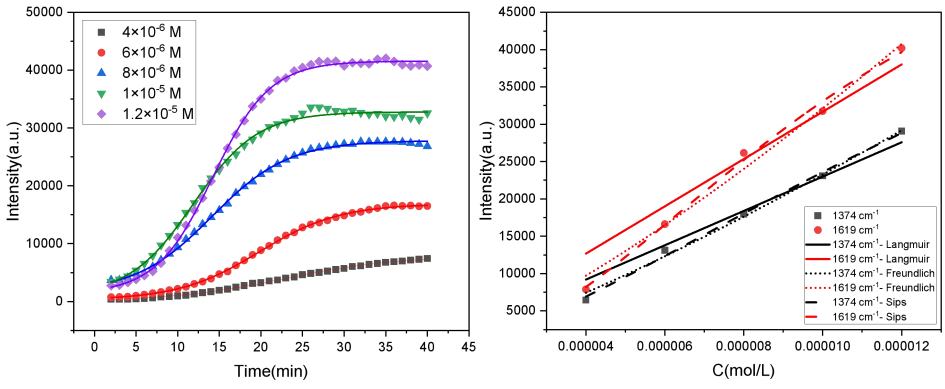


图1：SERS 信号强度-时间关系及基于SERS强度-浓度的吸附等温式

关键词：SERS，孔雀石绿，S型曲线，Logistic 模型，金纳米粒子膜

表面增强拉曼光谱研究 G 四链体中碱基与金纳米表面冷冻条件下形成的相互作用

罗洪，许官通，李百云，国新华*

吉林大学化学学院，长春市前进大街 2699 号，130012

*Email: guoxh@jlu.edu.cn

核酸分子中的碱基能够通过配位与金纳米颗粒（Au NP）相互作用，使核酸分子吸附到Au NPs表面。[1,2]近几年，在金表面通过冷冻定向组装DNA的方法被建立并迅速发展。研究显示：冷冻过程中，单链DNA（ssDNA）分子被拉伸和重新排列，其暴露的末端碱基与Au NP的作用导致DNA分子高密度附着在金纳米粒子表面。[3]但是对于折叠状态的DNA序列，冷冻过程不会对其结构产生影响。[4]基于吸附在Au NP表面核酸分子的拉曼信号被增强的原理，我们选择了一系列形成不同构型的核酸G四链体（G4-DNA）序列，经冷冻-融化处理以及拉曼检测（如图1），研究了序列在折叠状态、非折叠状态，碱基种类，以及碱基在结构中不同位置与Au NP表面相互作用导致的指纹谱图的变化。通过金纳米粒子冷冻法获得的表面增强拉曼光谱（SERS）指纹图谱与我们之前使用阴离子清洗剂和阳离子聚集剂聚集金溶胶纳米粒子获得谱图相比，检测灵敏度和重现性都得到了改进，为进一步基于SERS研究核酸二级结构提供了新思路。

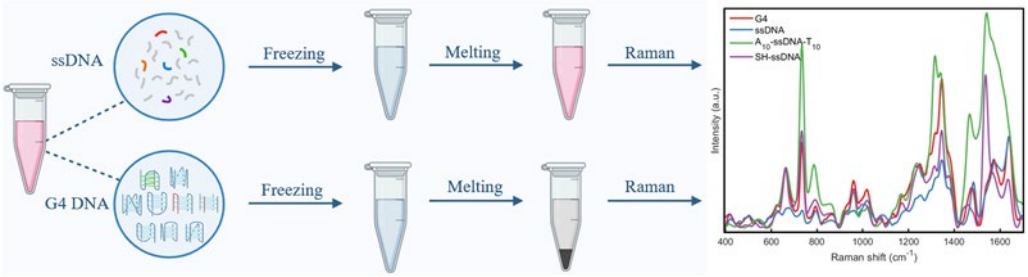


图1：基于SERS的金纳米粒子冷冻法测定ssDNA与G4-DNA结构的简易流程示意图

关键词： 表面增强拉曼光谱；核酸结构；金纳米粒子；G四链体

参考文献：

[1] Jang N H. *Bulletin of the Korean Chemical Society*, **2002**, 23, 1790.
[2] Kryachko E S, Remacle F. *The Journal of Physical Chemistry B*, **2005**, 109, 22746.
[3] Liu B, Wu T, Huang Z, et al. *Angewandte Chemie International Edition*, **2019**, 58, 2109.
[4] Li Z, Lv Y, Duan X, et al. *Angewandte Chemie International Edition*, **2023**, 62(45).

分子夹层桥连的金属半导体在光催化中的电荷传输分析

童凌波[1]，朱奥男[1]，张茂笛[1]，谢微*

[1]特种化学电源全国重点实验室，化学学院，南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*Email: wei.xie@nankai.edu.cn

Plasmonic metals generate hot electron–hole pairs through localized surface plasmon resonance (LSPR), yet ultrafast recombination and low hole-utilization efficiency restrict their application in oxidative photocatalysis. Semiconductors possess suitable band edges and abundant surface defects for molecular activation, but suffer from poor conductivity and sluggish carrier transport. Here, we intercalate a molecular layer between Au and Cu_2O to construct metal–molecule–semiconductor heterostructures, decoupling plasmonic energy harvesting from oxidative hole chemistry while preserving interfacial charge recombination. Au@Cu_2O, Au@L-cys@Cu_2O, and bare Au all functionalized with 4-mercaptobenzoic acid (MBA), and monitored by time-resolved surface-enhanced Raman spectroscopy. After 300 s of irradiation, MBA was fully oxidized on Au@L-cys@Cu_2O, partially oxidized on Au@Cu_2O, and barely reacted on Au, demonstrating that the embedded cysteine layer selectively suppresses hot-electron injection into Cu_2O without hindering hole-enriched Cu_2O to catalysis the reaction. Steady-state UV–vis and femtosecond transient absorption measurements reveal that the cysteine interlayer prolongs hole lifetime and suppresses non-radiative recombination. Replacing cysteine with penicillamine retains comparable activity, confirming the universality of this strategy. This work provides a simple and tunable route to synergistically exploit plasmonic field enhancement and semiconductor-driven oxidation, offering new insights for the design of efficient visible-light photocatalysts.

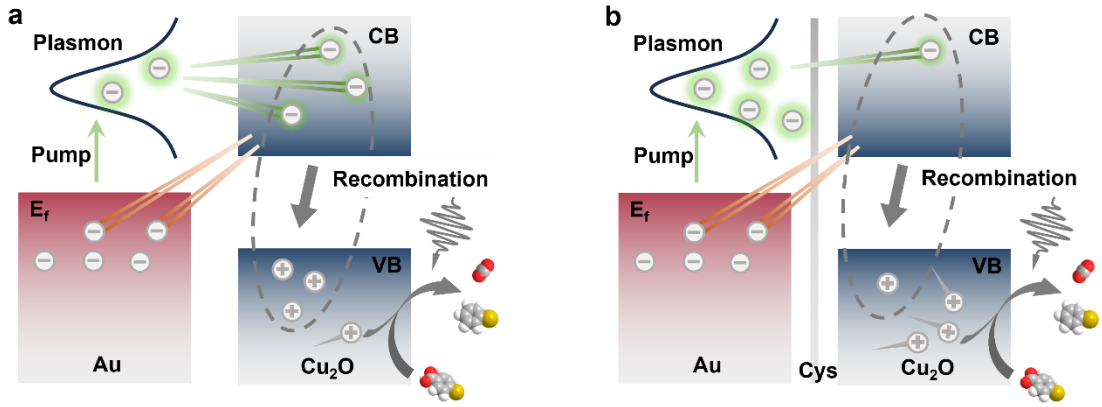


图1：催化反应中的电荷传输机制示意图 a. Au@Cu_2O; b. Au@L-cys@Cu_2O

关键词：等离激元场增强；分子夹层；半导体；空穴寿命

多金属氧酸盐改性二氧化钛对孔雀石绿的 SERS 增强效应

姜文姬，杨玉美，邵心依，宋薇*

吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，吉林 长春 130012

*Email: weisong@jlu.edu.cn

本工作采用溶胶-凝胶一步溶剂热法成功制备了磷钨酸（$H_3PW_{12}O_{40}$，一种典型的Keggin型多金属氧酸盐/POMs）改性的二氧化钛（TiO_2/PW_{12}）复合纳米材料，并系统研究了其对阳离子染料孔雀石绿（MG）的表面增强拉曼散射（SERS）增强效应。研究旨在利用POMs的独特性质调控TiO_2半导体的性能。结果表明，POMs的引入有效调节了TiO_2的能带结构，优化了基于半导体-分子间电荷转移（CT）的SERS增强机制，这是该复合材料展现SERS活性的关键；同时，POMs作为优异的电子受体，显著抑制了TiO_2光生电子-空穴对的复合过程，协同提升了材料的整体性能[1-2]。此外，复合材料形成了独特的连接网状结构，具备优异的吸附能力，可高效富集目标分子孔雀石绿至其表面，从而极大地增强了拉曼信号的探测灵敏度。得益于上述优势，该TiO_2/PW_{12}复合材料对MG分子表现出优异的SERS性能，检测限低至1 μM，并展现出良好的信号重现性。本工作不仅证实了多金属氧酸盐改性策略在提升二氧化钛SERS活性方面的有效性，特别是针对孔雀石绿分子，而且凸显了该复合材料在环境污染物高灵敏分析检测与潜在协同降解应用中的巨大潜力。

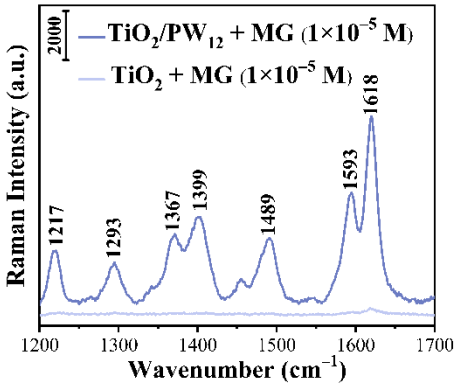


图1 以纯TiO_2和TiO_2/PW_{12}为基底获得的关于孔雀石绿的SERS光谱

关键词： SERS；多金属氧酸盐；二氧化钛

参考文献：

[1] Chen, J. J.; Ma, B. H.; Song W. *Appl. Catal. B: Environ.* **2023,** *325*, 122350.

[2] Chen, J. J.; Li, M. Y.; Song W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025,** e202424986.

基金支持：国家自然科学基金（92161119, 22474048）

硅层厚度对蛋黄壳结构 $Cu_2O@SiO_2/Ag$ 协同增强超高 SERS 活性的影响

杨玉美，姜文姬，邵心依，宋薇*

吉林大学化学学院超分子结构与材料国家重点实验室，吉林 长春 130012

*Email: weisong@jlu.edu.cn

核壳结构是一种具有多层级空间分布的特殊微观结构，通常由核心材料和包覆在外的壳层材料组成，展现出单一材料无法比拟的优势，在催化、能源、生物医学、光学等领域应用广泛。Cu_2O（氧化亚铜）作为一种具有独特物理化学性质的半导体材料，在表面增强拉曼散射（SERS）领域展现出多方面的应用优势[1]。凭借“光学活性-表面缺陷-结构稳定-成本可控”的综合优势，成为贵金属SERS基底的理想替代材料。SiO_2壳层可以阻隔水和氧气与Cu_2O核心接触，抑制其氧化为CuO。贵金属Ag在硅外层均匀分布，此时的Cu_2O可以作为“光学放大器”。Ag壳层提供强LSPR，Cu_2O核心通过激子-等离子体共振耦合延长电磁场作用范围[2]。因此，我们设计了一种易于操作的层层组装策略，制备了具有核壳结构的$Cu_2O@SiO_2/Ag$复合纳米材料，通过煅烧合成了具有不同硅厚度的蛋黄壳结构，用于表面增强拉曼光谱研究。该复合材料对4-巯基苯甲酸（MBA）分子等目标物的检测灵敏度极高，能够检测到低至10^{-10}M的浓度，展现出卓越的分子识别能力与检测能力。此外，该SERS模板表现出良好的稳定性。

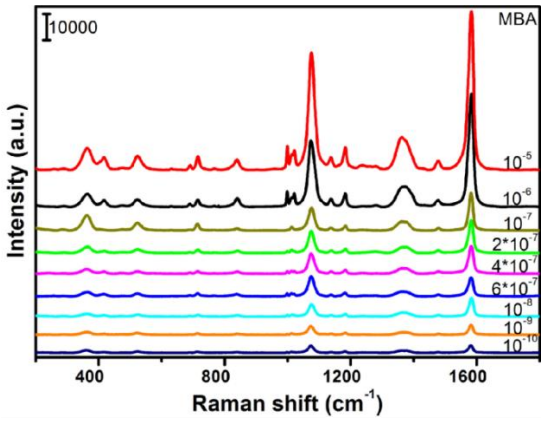


图1 $Cu_2O@SiO_2/Ag$蛋黄壳复合材料吸附MBA的浓度依赖性SERS谱

关键词： SERS；核壳结构；4-巯基苯甲酸

参考文献：

[1] Shang, L. J.; Wen, S. S.; Song W. *Sensors and Actuators: B.* **2024,** *417*, 136075.

[2] Chen, J. J.; Ma, B. H.; Song W. *Applied Catalysis B: Environmental.* **2023,** *325*, 122350.

基金支持：国家自然科学基金（22474048, 92161119）

二维过渡金属硫化物基类漆酶-SERS 双功能基底的研究

温思思[1]，黑亚双[1]，郑丙肖[1]，巴丽思[1]，赵治巨[1,*]，宋薇[2,*]

[1]河北省功能高分子材料研发与工程应用技术创新中心，邢台，054001
[2]吉林大学超分子结构与材料全国重点实验室，长春，130012

*Email: weisong@jlu.edu.cn

漆酶作为一类重要的氧化还原酶，广泛分布于真菌和植物体内，其能够在不依赖辅助因子的条件下高效催化酚类化合物的有氧氧化反应，这一特性使其成为研究热点。近年来，兼具纳米酶催化与表面增强拉曼散射（SERS）双功能活性的纳米材料因其在构建多功能检测系统中的优势而受到广泛关注[1-3]。本研究基于金属Ni独特的3d轨道未满电子态特性，采用水热法成功制备了$NiCo_2S_4$纳米片。通过优化Na_2S的浓度和比例，所得材料展现出优异的形貌特征及显著的纳米酶-SERS双功能特性。如图1a所示，其对于结晶紫探针分子的检测可以达到10^{-7} M，除此之外，Ni的电子态特性使其能够与氧气分子有较强的吸附作用，提供丰富的活性位点促进反应物的活化和转化，继而提高催化效率。如图1b所示，通过典型的漆酶与2,4-二氯苯酚（2,4-DP）和4-氨基安替吡啉（4-AP）的显色反应，利用紫外-可见光谱评估其漆酶样活性，并比较了各种茶多酚的抗氧化性能，发现羟基的数量显著影响了$NiCo_2S_4$纳米片催化多酚的反应速率。这种二维金属硫化物模拟漆酶纳米材料在分析检测、抗菌性能和环境污染物降解方面具有重要的应用前景。

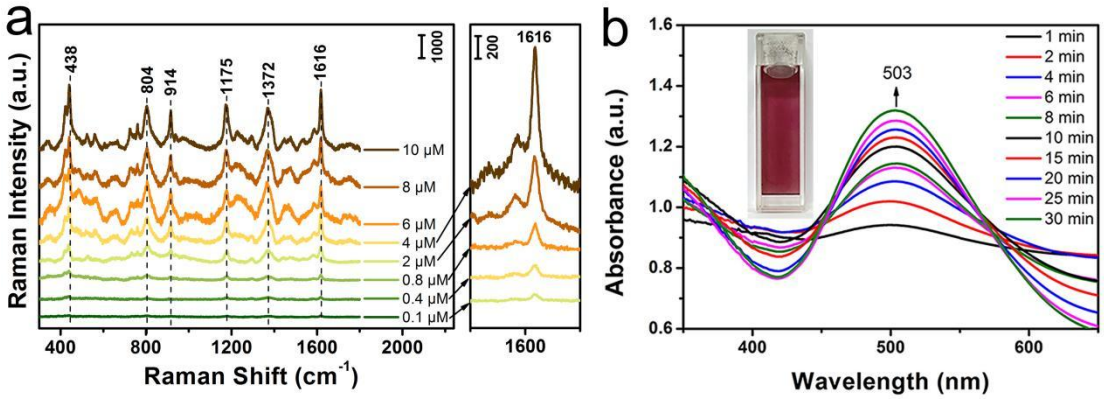


图1：（a）结晶紫在$NiCo_2S_4$上的SERS光谱**（b）**$NiCo_2S_4$纳米片漆酶活性的紫外监测。

关键词：纳米酶；表面增强拉曼光谱；过渡金属硫化物；茶多酚

参考文献：

[1] Wen, S. S.; Jiang, W. J.; Yang, Song, W., *J. Phys. Chem. C* **2024,** 128, 4224−4232.
[2] Shang, L. J.; Wen, S. S.; Liu, D.; Song, W., *Sensors and Actuators: B.* **2024,** 417, 136075.
[3] Liu, D.; Yang, J. Wen, S. S.; Song, W., *Sensors and Actuators: B.* **2024,** 418, 136251.

基金/项目支持：邢台市科技局（过渡金属硫化物基纳米酶-SERS 基底的开发及利用 SERS 光谱对其催化反应机 制的研究）；国家自然科学基金（22474048，92161119）。

基于 $TiO_2@Ag_6$ 团簇材料的抗生素降解过程的 SERS 监测研究

邵心依，姜文姬，杨玉美，宋薇*

吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，吉林 长春，130012

*Email: weisong@jlu.edu.cn

表面增强拉曼散射（SERS）作为一种灵敏度高、分子识别能力强的光学表征手段，在环境污染物的原位检测中具有独特优势。本研究通过静电纺丝结合450 °C煅烧的工艺，成功制备了具备光催化与SERS双重功能的$TiO_2@Ag_6$复合材料[1-2]。实验结果表明，该材料在紫外光照射下可高效催化降解氟喹诺酮类抗生素代表物——盐酸二氟沙星（DIF）。同时，借助材料表面银团簇产生的强SERS效应，成功实现了对DIF光降解过程的实时监测[3]。该体系为污染物的“降解-监测”一体化提供了新的材料设计思路，并展现出其在光散射分析、环境治理及抗生素污染控制中的应用潜力。

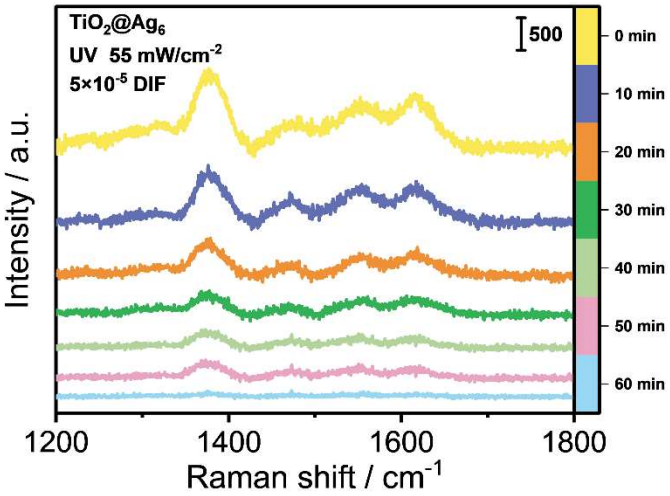


图1 SERS监控$TiO_2@Ag_6$降解盐酸二氟沙星

关键词：表面增强拉曼；半导体；Ag团簇；光催化；抗生素

参考文献：

[1] Song, W.; Wang, Y.; Zhao B. *J. Phys. Chem. C* **2007**, *111*, 12786.

[2] Tu, J.; Wu, T.; Yu, Q., Li, J.; Zheng, S.; Qi, K.; Sun, G.; Xiao, R.; Wang, C. *J. Hazard. Mater.* **2023**, *448*, 130912.

[3] Liu, X.; Liu, Y.; Lu, S.; Wang, Z.; Wang, Y.; Zhang, G.; Guo, X.; Guo, W.; Zhang, T.; Xi, B.; *Chem. Eng. J.* **2020**, *385*, 123987.

基金支持：国家自然科学基金（92161119, 22474048）

以电荷转移度作为连接 SERS 光谱与光催化的桥梁

陈俊杰[1]，宋薇[2,*]

[1] 国网四川省电力公司电力科学研究院，四川成都，610041
[2] 超分子结构与材料全国重点实验室，吉林大学，吉林长春，130012

*Email: weisong@jlu.edu.cn

光催化利用光能驱动化学反应，是实现绿色能源转化与污染治理的关键途径。其反应效率取决于催化剂表面载流子与吸附分子间的电荷转移（CT）过程。在分子层面解析CT机制，对提升催化活性及光能利用率至关重要。本研究基于CT增强型表面增强拉曼散射（SERS）技术，通过Herzberg-Teller耦合项定量表征电荷转移度（ρ_{CT}），建立了一种原位监测界面CT过程的光谱方法。通过MOF衍生技术制备铜掺杂氧化锌纳米颗粒（ZnO@CuO_x-y），其优异的SERS性能与光催化活性为界面CT研究提供了理想平台。首次在纯半导体上利用原位SERS直接观测到4-溴苯硫酚（BTP）的脱溴偶联与加氢反应过程。研究表明：不同铜掺杂浓度下BTP的光催化反应速率与ρ_{CT}呈线性正相关。结合光电测试与理论计算，证实铜掺杂通过调控半导体-分子界面的ρ_{CT}，同步优化SERS效应与催化活性。本工作提出基于CT-SERS的定量评估策略，实现了光催化活性的原位预测。该策略在多种半导体材料及催化反应体系中均验证有效，证实ρ_{CT}作为描述SERS增强机制与催化活性描述因子的普适性，为光催化界面过程研究提供了分子光谱学新范式。

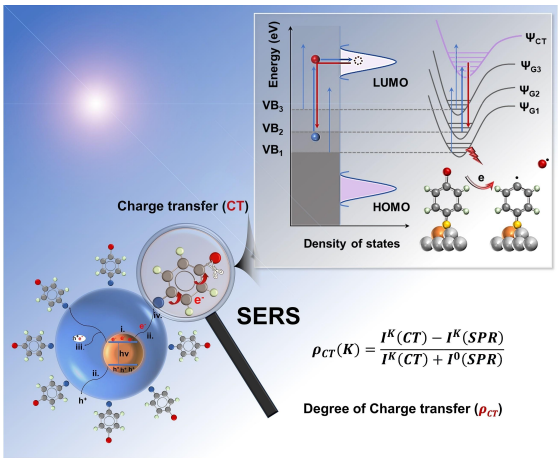


图1：利用SERS光谱研究半导体界面电荷转移度与催化活性示意图

关键词：电荷转移；光催化反应；表面增强拉曼散射，氧化锌

参考文献：

[1] J. Chen, M. Li, X. Wang, H. Liu, W. Jiang, B. Zhao, W. Song*. Angew. Chem. Int. Ed. 2025, e202424986

基于 Ag/Ag_3PO_4/MXene 异质结的双功能可重复使用 SERS 基底：有机污染物的高效检测与光催化降解

马晓艳[1]，张谦[1,*]，夏佳睿[2,*]

[1] 辽宁大学化学学院，辽宁沈阳，110036
[2] 中国医科大学健康科学研究所，辽宁沈阳，110122

*Email: zhangq@lnu.edu.cn, jrxia@cmu.edu.cn

成功合成了一种基于棉织物的柔性Ag/Ag_3PO_4/MXene三元复合材料（APMX），可作为双功能可重复用表面增强拉曼散射（SERS）基底，实现对目标物质的灵敏检测和有机染料的高效降解。复合材料优异的SERS性能源于Ag NPs引起的电磁增强效应、Ag_3PO_4的电荷转移增强效应及MXene的化学增强机制[1]。用于结晶紫（CV）检测时，该材料表现出优异的灵敏度，其检测限（LOD）可低至3.82×10^{-11} mol/L。此外，Ag NPs的局域表面等离子体共振（LSPR）与MXene高电导率的协同作用显著促进了Ag_3PO_4表面的电荷转移，从而进一步提升了光催化效率[2]。在可见光照射条件下，该复合材料对CV的降解率在90分钟内可达83.64%。将复合材料负载在棉织物上，赋予了基底柔性和实用性，使其能够在不规则表面上进行原位SERS检测和有效分析。同时，光催化降解功能赋予其自清洁特性，显著提高了材料的可重复使用性和可持续性。作为一种高性能的双功能材料，APMX在环境监测和污染控制方面展现出巨大的应用潜力，能够提供灵敏的SERS检测并高效降解废水中的污染物。

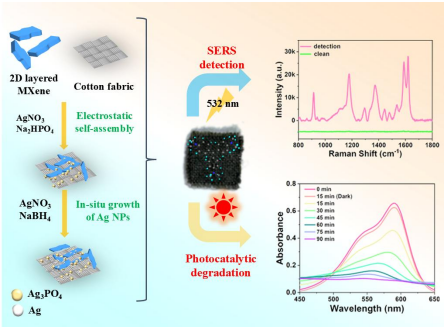


图1： Ag/Ag_3PO_4/MXene棉织物的制备过程及高效SERS检测与光催化降解功能集成的示意图

关键词： 异质结；协同效应；表面增强拉曼散射；光催化降解

参考文献：

[1] Cai, T.; Wang, L.L.; Liu, Y.T.; Zhang, S.Q. Appl. Catal. B-Environ. **2018**, 239, 545-554.

[2] Zhang, C.; Tan, B.Q.; Ji, C.; Pei, Z.Y. ACS Appl. Mater. Interfaces. **2024**, 16, 12085-12094.

电化学-生物催化 CO_2 还原快速合成二醇类 C_3-C_4 化合物

李永龙[1]，张冰[2]，刘建明[2]*，曾安平[2]*，孙立成[1]*

[1] 人工光合作用与太阳能燃料中心，化学系，西湖大学理学院，杭州，310030
[2] 合成生物学与生物智造中心，西湖大学工学院，杭州，310030
*Email: liujianming@westlake.edu.cn; zenganping@westlake.edu.cn; sunlicheng@westlake.edu.cn

在全球气候变化与能源危机日益严峻的背景下，将温室气体 CO_2 高效转化为高附加值产物已成为实现碳中和目标的关键路径之一[1]。近年来，电化学 CO_2 还原（CO_2RR）技术因其高效、环保的特点，受到了广泛关注。通过电化学方法，CO_2 可以被还原为多种碳基化合物，如甲酸、甲醇、乙醇、乙烯等。然而，现有的 CO_2RR 技术仍面临选择性低、产物单一等问题，难以直接生成高附加值的 C_{3+}产物[2]。因此，我们开发了一种电化学-生物合成的级联系统，实现了直接从 CO_2 以超高产率合成 C_3-C_4 二醇（1,3-丙二醇和 1,3-丁二醇）。该体系结合了在安培级电流密度（-1,100 mA cm^{-2}）下运行的 CuZn 催化的电化学 CO_2 还原反应器，用于生产乙醇（接近 1,200 μmol h^{-1} cm^{-2}），以及用于 C-C 键延伸的生物催化模块。在前期设计的西瓜皮膜 CO_2 还原体系启发下[3]，定制化设计了仿生离子交换膜以防止乙醇交叉，使乙醇产量积累至 4.6 g L^{-1} h^{-1}，而工程化的海栖热袍菌 DERA 变体（S233D/F43T）通过结合 AI 和理性设计的协同方法，提高了生物催化的效率，使 1,3-丙二醇的生产率达到了 1.8 g L^{-1} h^{-1}。通过原位光谱研究揭示了电化学 CO_2 还原制乙醇过程中关键中间体 CO*和*OH 的存在，以及氢键网络的形成，可显著增强了乙醇的电化学合成效率，而分子动力学模拟阐明了 DERA 中突变引起的构象变化，提高了底物亲和力。该系统的多功能性还通过将乙醇延伸至 1,3-丁二醇，生产率达到了 1.0 g L^{-1} h^{-1}。这项工作建立了一个可扩展的范例，从 CO_2 直接合成 C_{3+}二醇，弥补了电催化和合成生物学之间的差距，为可持续制造提供了新的途径。

关键词： CO_2转化；电催化；光谱表征；酶催化；C_{3+}化合物

参考文献：

[1] Pan, Y.; Zhang, H.; Zhang, B.; Gong, F.; Feng, J.; Huang, H.; Vanka, S.; Fan, R.; Cao, Q.; Shen, M.; Li, Z.; Zou, Z.; Xiao, R.; Chu, S. *Nat. Commun.* **2023**, *14*, 1013.
[2] Wi, T.-U.; Xie, Y.; Levell, Z. H.; Feng, D.; Kim, J. Y. T.; Zhu, P.; Elgazzar, A.; Jeon, T. H.; Shakouri, M.; Hao, S.; Fang, Z.; Qiu, C.; Lee, H.-W.; Hicks, A.; Liu, Y.; Liu, C.; Wang, H. *Nat. Synth.*, **2024**, *3*, 1392.
[3] Liu, Q.; Tang, T.; Tian, Z.; Ding, S.; Wang, L.; Chen, D.; Wang, Z.; Zheng, W.; Lee, H.; Lu, X.; Miao, X.; Liu, L.; Sun, L. *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 6722.

原位电化学 SERS 检测*N_2H_3 中间体：高耐久性 PtIr 催化剂上氨氧化的新途径

张茂笛[1]，王腾[1]，杜晓萌[1]，毛越[1]，朱奥男[1]，杜奥旋[1]，童凌波[1]，谢微[1*]

[1]特种化学电源全国重点实验室，化学学院，南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*Email: wei.xie@nankai.edu.cn

The electrochemical ammonia oxidation reaction (AOR) is a cornerstone technology for sustainable on-site hydrogen production and clean energy conversion. While Pt-based alloys such as PtIr have emerged as promising AOR electrocatalysts to address the rapid deactivation of pure Pt systems, the atomic-level mechanisms governing their superior stability remain unresolved. Here, we employ in situ electrochemical surface-enhanced Raman spectroscopy to directly track the evolution of intermediates on Pt and PtIr catalysts during AOR. On pure Pt electrodes, increasing potential drives sequential oxidation of *NH_2 to *N_3^-, ultimately forming surface-bound *NO_x species that poison active sites and degrade performance. In stark contrast, PtIr alloys bypass this detrimental pathway by enabling an unconventional *N_2H_3-centered mechanism. Through N-N coupling of *NH and *NH_2 intermediates at Pt-Ir integrative catalytic sites, *N_2H_3 is generated and dehydrogenated to N_2 without forming toxic byproducts. Therefore, PtIr alloy catalysts exhibit significantly enhanced durability compared to monometallic Pt catalysts. This work highlights the paramount importance of directly observing key reaction intermediates via in situ spectroscopy for elucidating catalytic mechanisms.

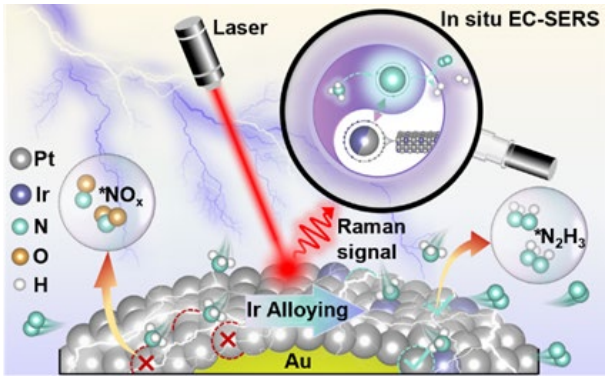


图1：Pt基催化剂上AOR过程的原位电化学SERS示意图

关键词：表面增强拉曼光谱；氨氧化；抗中毒机制；反应中间体

参考文献：

[1] Zhang, M.; Wang, T.; Du, X.; Mao, Y.; Zhu, A.; Du, A.; Tong, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147, 28331−28339.

量子点催化中激子-分子串扰的原位 SERS 研究

王腾[1]，张茂笛[1]，黄转转[2]，岳鑫欣[2]，朱奥男[1]，童凌波[1]，谢微[1,*]

[1] 特种化学电源全国重点实验室，化学学院，南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071
[2] 弱光非线性光子学教育部重点实验室，物理学院，南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*Email: wei.xie@nankai.edu.cn

Semiconductor quantum dots (QDs) have emerged as a paradigm-shifting catalytic platform for visible light-driven organic synthesis due to their highly tunable excitonic properties. However, the critical role of nanoconfined exciton evolution in governing surface reactions remains experimentally elusive. Here, we apply Au@perovskite QD superstructures for in-situ surface-enhanced Raman spectroscopy to probe exciton-molecular crosstalk during the photocatalytic self-coupling of aromatic thiols on QD surfaces. We find that quasi-ligand coordination of thiols with surface Pb sites simultaneously attenuates three exciton relaxation pathways: radiative recombination, Auger recombination and exciton-phonon coupling, while enhancing trap-assistant recombination. Thermodynamically, the charge dipole effect of coordinating molecules reduces the exciton binding energy in QD systems by inducing exciton-molecular crosstalk. In response, this excitonic modulation effectively lowers the activation barrier during the reaction and thus facilitates S-S bond coupling. This work establishes ligand-exciton-reaction coupling as a fundamental principle in QD catalysis and enriches the theoretical framework of heterogeneous catalytic processes under quantum confinement.

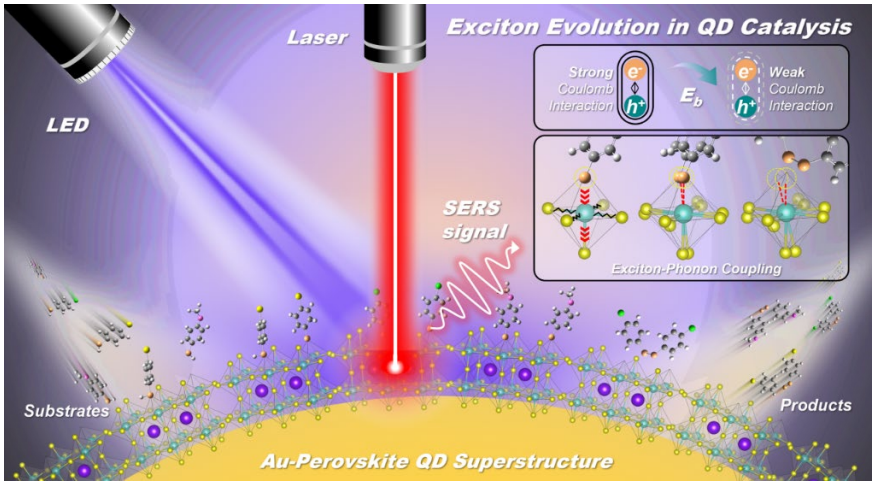


图1：核-卫星超级结构（Au@$CsPbBr_3$）上原位SERS解析量子点催化中的激子弛豫

关键词： 表面增强拉曼散射；量子点催化；核-卫星自组装；激子弛豫

参考文献：

[1] Wang, T.; Zhang, M.; Huang, Z.; Yue, X.; Zhu, A.; Tong, L.; Xie, W. Exciton–Molecular Crosstalk Drives Surface Reactions on Perovskite Quantum Dot Catalysts. ***Under Review.***

一箭双雕：Cu_2O@Ag 用于检测和抑制大肠杆菌 O157:H7

姜浩[1]，张月皎[1,*]，李剑锋[1,*]

[1] 厦门大学能源学院化学与化学工程学院固体表面物理化学国家重点实验室，361005，厦门
*Email: Li@xmu.edu.cn

大肠杆菌O157:H7是一种常见的食源性病原体，即使在低剂量下也会引起感染。然而，在实际的检测过程中存在许多挑战，如选择性差、耗时长、灵敏度低和许多其他干扰因素。在这项工作中，我们合成了银包覆的Cu_2O纳米粒子(Cu_2O@Ag通过在Cu_2O NP表面原位生长Ag-NP来制备纳米颗粒。在用特异性抗体和磁珠（MB）功能化后，进一步构建了基于表面增强拉曼光谱（SERS）的三明治结构传感器。具体而言，构建的探针证明了（1）在受污染的牛奶样本中超灵敏的SERS检测，以及（2）复合材料的协同增强抗菌活性。对实验中的一系列关键条件进行了优化和验证。最终，开发的SERS传感平台可以在22分钟内实现牛奶中大肠杆菌的分离和检测，检测限（LOD）为1 CFU/mL，范围为1至10^4 CFU/mL。此外，Cu_2O@AgNP表现出优异的抗菌活性，对大肠杆菌和金黄色葡萄球菌的最低抑菌浓度（MIC）分别为62.5μg/mL和125μg/mL。我们的工作提供了一种将细菌敏感性检测与抑制相结合的策略，在未来监测食源性致病菌中具有巨大的潜力。

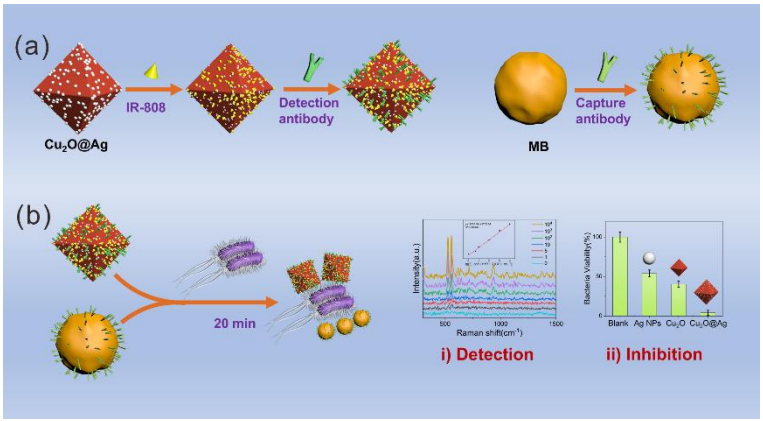


图1：SERS夹心检测平台用于特定细菌鉴定、检测和抑制的示意图。

关键词：大肠杆菌 O157:H7, Cu_2O@Ag, SERS, 抗菌

参考文献：

[1] Xie, Y. J.; Chen, C.; Zhang, C. G.; Xu, X. W.; Ren, Y.; Lin, J.; Wu, A. G. Synergistic enhancement of ultrahigh SERS activity via Cu_2O@Ag Core-Shell structure for accurate label-free identification of breast tumor subtypes. Nano Today. 2024, 54, 102140.

[2] Wang, P. J.; Zhu, L.; Zhao, B. SPR Characteristics of Semiconductor Nanomaterials and Their Applications in SERS. Chinese Journal of Light Scattering. 2023, 35, 150-159.

基于表面增强共振拉曼光谱的心梗检测微流控芯片

吴晓航[1]，张月皎[1,*]李剑锋[1,*]，

[1] 厦门大学，福建省厦门市思明区思明南路 422 号，361000

*Email: Li@xmu,edu.cn

心梗是一种严重的心血管疾病，早期诊断对于救治患者至关重要[1]。表面增强共振拉曼光谱（SERRS）技术因其高灵敏度和分子特异性而成为一种潜力巨大的心梗检测方法[2]。本研究旨在开发一种基于SERRS的微流控芯片和配套的手持式POCT仪器，用于快速、灵敏和定量检测心梗相关生物标志物。首先，我们采用磁珠免疫蛋白质的快速检测方法，将超顺磁性磁珠修饰上cTnT抗体A后，用于捕获血液中的cTnT，同时被捕获的cTnT抗原可以与修饰了抗体B的SERRS标签纳米粒子（Au@IR808）亲和，形成免疫夹层结构，最后在外加磁场作用下进行简单地磁分离富集磁珠免疫复合物进行检测。其次，我们设计并制备了一种微流控芯片，用于自动化操控样品和磁珠免疫复合物的混合和反应过程。该芯片通过不断分流以及合流，还有鱼骨状突起的设计使得该芯片具有较强的混合能力，能够实现快速、均匀的混合反应，通过磁吸富集SERRS探针并进行检测，提供稳定的SERRS信号。最后，我们根据所设计的微流控芯片设计建造了一台一键式全自动化检测的手持式POCT仪器。结果表明，我们的手持式POCT仪器配合微流控芯片具有较高的灵敏度和极快的检测速度，可以在5分钟内可靠地检测到心梗生物标志物，实现定性分析。综上所述，我们成功地开发了一种基于SERS的微流控芯片和手持式POCT仪器，用于心梗检测。该芯片具有高灵敏度和快速响应的优势，为心梗早期诊断提供了一种可行的解决方案。这项研究为微流控芯片在心血管疾病诊断领域的应用提供了新的思路，并为其他生物分析和医学诊断领域的研究提供了借鉴。

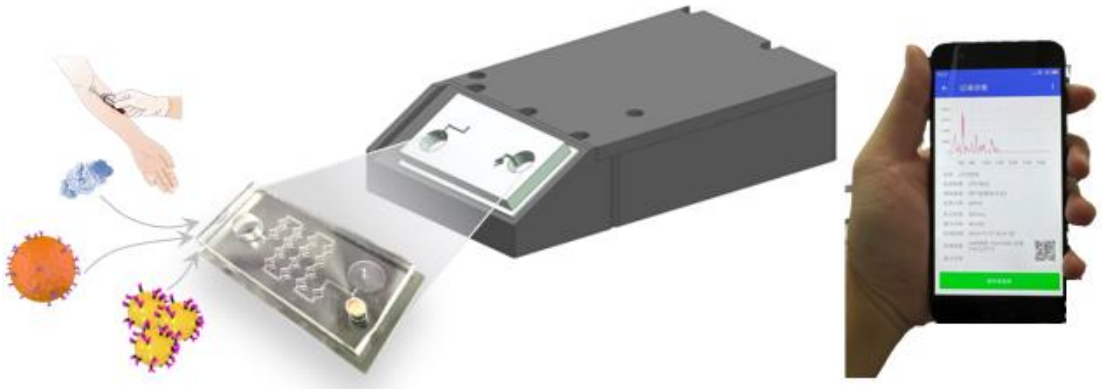


图1：基于表面增强共振拉曼光谱的心梗检测微流控芯片搭配拉曼光谱仪检测流程

关键词：微流控；拉曼；心梗标志物检测，POCT仪器

参考文献：

[1] Christoph K, Ricardo O R F, Zhijian L, et al. Nature, 2022, 608(7924): 766-777.

[2] Xuan X, Shuzhen Y, Keke T, et al. Analytical Chemistry, 2024, 96(29): 11853-11861.

三维 SERS 活性水凝胶微球用于生物体系中碱性磷酸酶的高灵敏度均相检测

丛丽丽[1,2]，张松灵[1,*]，徐抒平[2,*]

[1] 吉林大学第一医院肿瘤妇科，吉林，长春，130021
[2] 吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，吉林，长春，130012

*Email: slzhang@jlu.edu.cn; xusp@jlu.edu.cn

碱性磷酸酶（Alkaline phosphatase, ALP）是许多疾病的生物标志物，监测其浓度水平对疾病的诊断和治疗具有重要意义。在本研究中，首先采用微液滴技术结合原位激光诱导聚合的方法，制备了孔径可调的掺杂银纳米粒子的水凝胶微球，该微球可以允许小分子进入，同时阻断大分子。除此之外，封装在水凝胶微球中的银纳米粒子可以显著增强扩散到微球内部的小分子的SERS信号。其次，通过引入ALP对5-溴-4-氯-3-吲哚基磷酸酯（BCIP）的特异性水解反应，并利用其产物5,5′-二溴-4,4′-二氯-1H,1H-[2,2']双吲哚基-3,3′-二酮（BCI）的高共振拉曼活性来评估ALP的浓度。该传感平台被用于评估血清中的ALP浓度，与紫外-可见吸收光谱法相比，SERS检测方法显示出更高的灵敏度，最低可检测到的ALP浓度为1.0×10^{-20} M。此外，还利用该传感平台评估了HepG2细胞在缺氧和铁死亡时的ALP浓度，结果显示在缺氧和铁死亡的情况下，ALP的表达量低于对照组。这种具有SERS活性的水凝胶微球在ALP检测方面显示出巨大的潜力，有望帮助分析复杂的临床样本[1]。

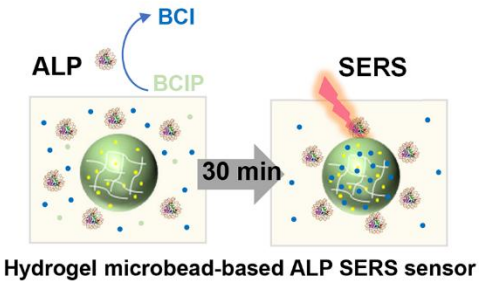


图1：SERS活性水凝胶检测ALP的示意图。

关键词：微流控液滴；SERS活性水凝胶；碱性磷酸酶；铁死亡；细胞缺氧

参考文献：

[1] Cong, L.; Wang, X.; Wang, J; Liu, W.; Xu, W.; Zhang, S.; Xu, S. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* **2025**, *17*, 5933-5941.

CRISPR/Cas12a-SERS 平台检测转基因大豆

刘琳 [1,2]，徐抒平 [2,3*]，常晶晶 [1*]

[1] 长春理工大学化学与环境工程学院，吉林长春，130022

[2] 吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，吉林长春，130012

[3] 吉林大学化学学院超分子化学生物学研究中心，吉林长春，130012

*Email: xusp@jlu.edu.cn (S. X.); changjingjing@cust.edu.cn (C.J.)

基于表面增强拉曼光谱（SERS）的核酸检测方法，凭借其高灵敏度与强特异性，成为当下光谱检测领域的研究前沿。随着转基因技术的不断发展，转基因大豆的商业化不可避免的带来了食品安全问题，因此需要建立可靠，高效的转基因鉴定检测方法。本研究构建了一种融合 G-三联体/血红素、CRISPR/Cas12a 技术的转基因大豆 SERS-比色双模式检测体系。具体来说，首先我们在 Fe_3O_4/Ag 上修饰带有 SH-ssDNA，借助 K^+促使其折叠成 G-三联体结构，进而与血红素结合形成 FeAgG-Hemin 探针。该探针可以催化 2,2'-偶氮双(3-乙基苯并噻唑啉-6-磺酸)(ABTS)生成显色的 $ABTS^{\cdot+}$分子，并伴随 SERS 强度的变化。为了增大 CRISPR/Cas12a 体系检测效率，采用多重 crRNA 同时识别转基因大豆 DNA 靶标的不同区域。当目的基因存在时，Cas12a 对目的基因进行顺式切割，并对 FeAgG-Hemin 探针进行反式切割，使探针释放血红素，使得纳米酶活性降低，ABTS 无法被催化，在 1603 cm^{-1} 处呈现出较强峰；反之，当目的基因不存在时，无法激活 Cas12a，FeAgG-Hemin 探针保持完整，可以催化 ABTS 转变成 $ABTS^{\cdot+}$ 在 1603 cm^{-1} 处峰位有明显下降。在转基因大豆实际样本检测中，实验结果表明对于转基因和非转基因 SERS 信号有明显区分，证明了该方法的可行性。

本研究受国家自然科学基金项目（22373041，22173035）、国家重点研发计划（2023YFC3706002）、吉林省科技发展计划项目（20220101046JC）、超分子结构与材料全国重点实验室创新研究课题（2024、2025）资助。

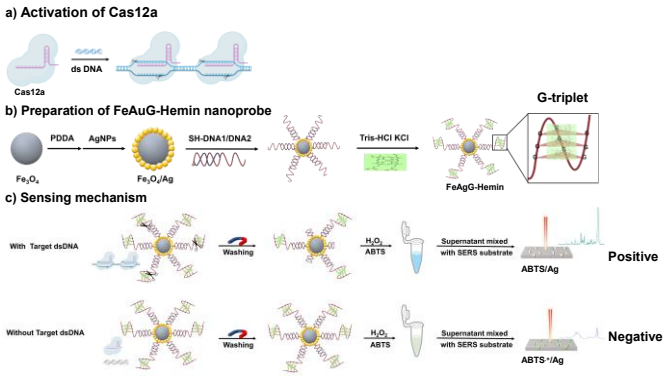


图 1：(a) CRISPR/Cas12a 体系中多重 crRNA 设计；(b) FeAgG-Hemin 探针的制备及其 G 核酸序列与 Hemin 分子结合的示意图；(c)基于 FeAgG-Hemin 探针的 CRISPR 介导的用于转基因作物 SERS 检测的流程图。

关键词：SERS；ABTS；转基因检测；G-三联体；血红素

基于激光共振纳米颗粒的高灵敏度前列腺特异性抗原 SERS 检测平台

扶世英[1]，许珊珊[1]，王涛[1,*]，张月皎[1,*]，l 李剑锋[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院、能源学院，厦门大学第一附属医院泌尿外科，泌尿系肿瘤与结石重点实验室，厦门 361005，中国

*Email: taowang@xmu.edu.cn, zhangyuejiao@xmu.edu.cn, li@xmu.edu.cn

临床血清中癌症相关特异性生物标志物的精准定量分析，对癌症早诊早治意义重大。医院常用血清前列腺特异性抗原（PSA）作为前列腺癌诊断与预后标志物，癌细胞产生的 PSA 多于良性细胞，会使血液中 PSA 升高。本研究建立结合磁珠与 SERS 纳米标签、基于表面增强拉曼散射（SERS）的 PSA 免疫检测方法。当前医院检测需2小时，设备及检测费用高，乡镇医院普及率低；而 SERS 技术10分钟出结果，操作简、成本低、设备便携，适配乡镇卫生院。研究检测75份男性血清样本（多处于4.0-10.0ng/mL 的 PSA“灰色区域”），结果与医院电化学发光（ECL）系统一致性好，检测限达0.029ng/mL。故该 SERS 检测方法在乡镇地区有巨大潜在市场。

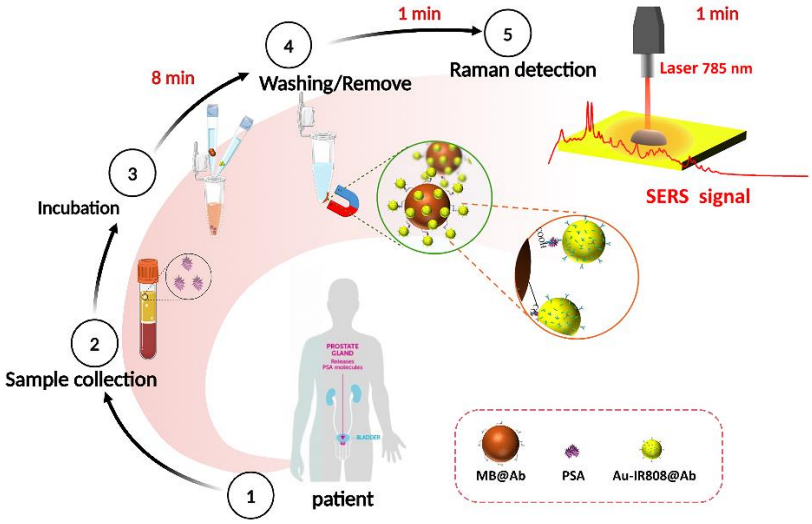


图1：基于SERS的PSA生物传感器检测过程示意图

关键词：SERS；前列腺癌；血清前列腺特异性抗原

参考文献：

[1] T. Hao, X. Wu, L. Xu, L. Liu, W. Ma, H. Kuang and C. Xu, Small, **2017**, *13, 1603944.*

带相反电荷的银纳米颗粒通过静电作用实现分子选择性 SERS 增强

倪爽[1]，顾雨清[1]，吴思毅[1]，罗哲文[1]，林俐[1,*]，叶坚[1**]

[1] 上海交通大学生物医学工程学院，上海，200030

*Email: linli92@sjtu.edu.cn , yejian78@sjtu.edu.cn

无标记的表面增强拉曼光谱（SERS）作为一种新兴的生物样品分子表型分析技术，已经引起了广泛的关注。然而，由底物与分析物之间复杂相互作用所介导的 SERS 选择性增强特性不利于分子分。静电力是导致分子选择性吸附于带电基地的最重要相互作用之一。这意味着，如果仅使用带负电荷或正电荷的SERS基底，那么来自部分分析物的大量SERS信息将丢失，从而阻碍全面的SERS检测。在这项工作中，我们使用带负电荷和带正电荷的胶体银（Ag）纳米颗粒（NPs）来检测各种带电分子。带负电荷的柠檬酸盐稳定的Ag和基于十六烷基三甲基氯化铵的电荷反转方案制备的带正电荷的Ag被用作SERS基底。所有的银纳米颗粒都具有良好的分散性和均匀性。在将带有相反电荷的纳米颗粒应用于带电分子的检测之后，我们发现SERS结果明确地展示了静电驱动的 SERS 选择性增强现象，这一结果还得到了分子静电势计算的进一步支持和阐明。我们的研究强调了开发带有适当表面电荷的 SERS 底物对于各种分析物的重要性，并启发我们通过使用带有相反电荷的底物组合，可以从复杂的生物样本中获取更多的分子 SERS 信息。

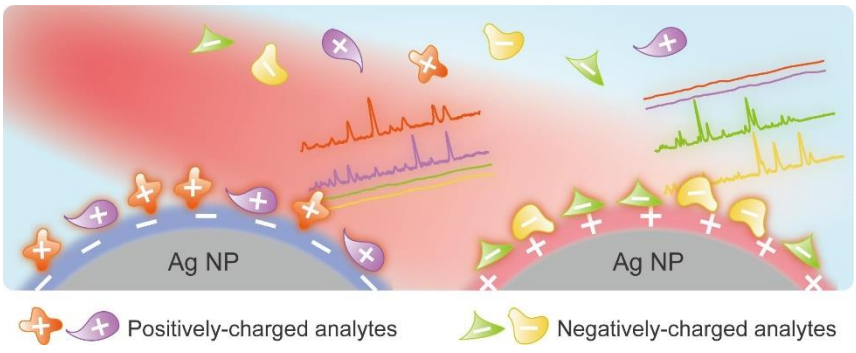


图1：通过SERS使用带相反电荷的Ag NP进行静电相互作用依赖的选择性分子检测的示意图。

关键词：表面增强拉曼光谱（SERS）；静电作用；SERS选择性检测；带相反电荷的银纳米颗粒

碳化钒纳米复合材料的表面增强拉曼研究及其应用

赵巍丹，刘嘉丽，姜丽*，陈亮*

中国计量学院光学与电子科技学院，杭州，310018

*Email: lijiang@cjlu.edu.cn

二维过渡金属碳化物（MXene）作为一种新型纳米材料，因其良好的生物相容性和易于修饰的表面特性，在生物传感领域展现出显著的应用潜力。本研究以V_2CT_x型MXene为主要研究对象，系统探究其表面增强拉曼散射（Surface-enhanced Raman scattering, SERS）性能。以V_2CT_x纳米材料作为SERS基底，对罗丹明6G（R6G）、结晶紫（CV）和孔雀石绿（MG）分子进行拉曼检测，其最低检测浓度分别可达10^{-9} M、10^{-9} M和10^{-8} M，表明V_2CT_x具备良好的SERS增强效应。为进一步提升基底性能，采用静电自组装方法构建了V_2CT_x-Au复合材料。在相同浓度R6G分子检测中，该复合材料表现出更高的SERS信号强度和更低的噪声水平，说明金纳米粒子（Au NPs）的引入有效增强了V_2CT_x的SERS性能。基于V_2CT_x-Au复合材料，成功实现了对大肠杆菌及其耐药菌株的无标记快速SERS检测，并进一步将其应用于光热与光动力协同杀菌过程中。本研究为构建集SERS检测与光热杀菌于一体的多功能纳米平台提供了实验依据。

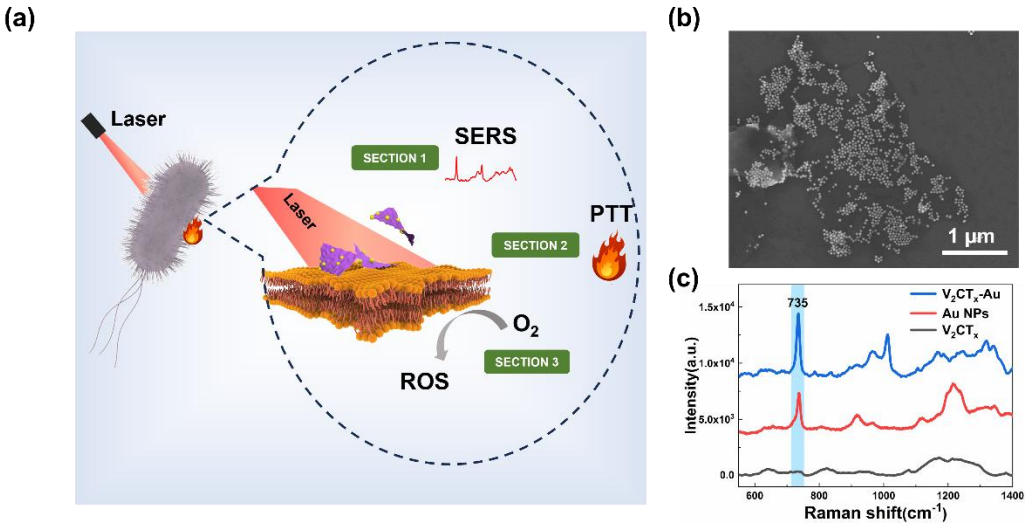


图 1：（1）V_2CT_x-Au 纳米材料 SERS 测菌与光热/光动力协同杀菌示意图，（2）V_2CT_x-Au 纳米结构的 SEM 图像，（3）大肠杆菌在 V_2CT_x-Au、V_2CT_x 和 Au NP 上的 SERS 光谱。

关键词： MXene；表面增强拉曼光谱；光热抗菌

参考文献：

[1] Yu Z, Jiang L, Liu R, et al. *Chemical Engineering Journal*, 2021, 426: 131914

[2] Zhao W, Jiang L, Pan W, et al. *ACS Applied Nano Materials*, 2024, 7(12): 14673-14683.

基于 SERS 技术对尿液中 LA 对映体的非标记性手性识别

齐绍瑞[1]，孟凡盛[1]，纪伟[1,*]

[1] 东北林业大学，黑龙江省哈尔滨市香坊区和兴路 26 号，150040

*Email: jiwei@nefu.edu.cn

基于表面增强拉曼散射光谱（surface-enhanced Raman scattering, SERS）的非标记性手性识别传感技术，因其无需依赖手性光和复杂手性基底的优势，为手性分子识别提供了新的研究思路。然而，该方法在实际应用条件下的对映体检测仍面临显著挑战。[1, 2]在本研究中，基于半导体异质结材料ZIF-8/ZnS-40构建了手性识别传感平台（CDSP）并成功应用于手性分子的非标记性识别。实验结果表明，D-和L-乳酸（LA）与CDSP之间电荷转移度（ρCT）存在差异，这一差异可以被灵敏的反映在SERS光谱中。基于这一原理，该CDSP不仅在LA浓度低至10^{-8} mol/L下实现了对D-和L-LA对映体的识别，而且在尿液中同样展示出高识别能力和强SERS稳定性，特征峰面积与LA对映体过量（ee %）值具有良好的线性关系。与标准检测方法相比，检测结果呈现出良好的一致性。本研究不仅拓展了基于无标记性手性识别方法检测的应用，而且为短肠综合征等肠道类疾病提供了无创、快速的早期临床检测方法。

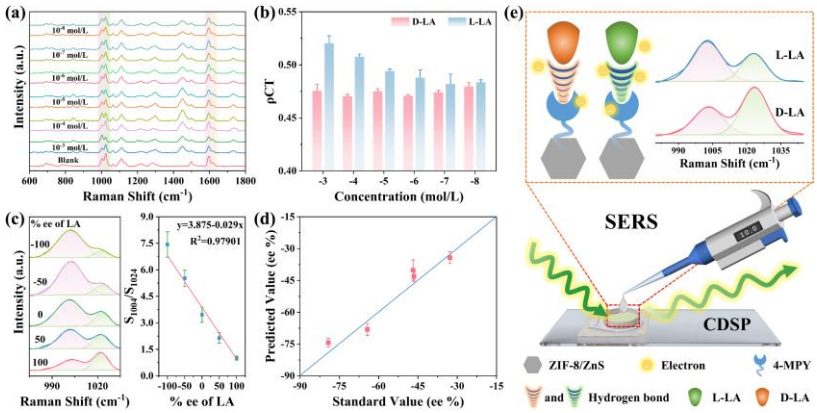


图1：（a）CDSP对不同浓度下D-和L-LA对映体的识别（b）不同LA浓度下的ρCT（c）LA对映体过量与峰面积比之间的关系（d）LA对映体过量标准值与预测值之间的关系（e）手性识别示意图

关键词：SERS；电荷转移；手性识别

参考文献：

[1] Yue Wang.; Zhi Yu.; Wei Ji.; Yoshito Tanaka.; Huimin Sui.; Bing Zhao.; Yukihiro Ozaki. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53(50)*, 13866–13870.

[2] Yue Wang.; Zhi Yu.; Xiaoxia Han.; Hongyang Su.; Wei Ji.; Qian Cong.; Bing Zhao.; Yukihiro Ozaki. *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120(51)*, 29374−29381.

响应型 SERS 叁键拉曼探针的设计合成及对超氧阴离子的检测

任慧芳，廖思杰，周鹏程*，沈爱国*

武汉纺织大学，武汉，430200

*Email: pczhou_17@163.com，agshen@whu.edu.cn

超氧阴离子（O_2^-）的精准捕捉，是破解氧化应激、疾病演进与衰老机制的一把钥匙，也是临床诊断、药效评估与抗衰老策略制定的核心环节。然而，现有检测手段仍难兼顾高选择性、高灵敏度与实时原位监测的多重需求。基于拉曼光谱“零生物背景”的独特优势，我们创制了一种可激活型 SERS 拉曼探针：以生物静默区叁键拉曼信号为内置标尺，利用探针分子在O_2^-触发下由 -C=N- 向 -C-O- 的转化，产生显著且定量的拉曼信号。该策略将检测限压缩至 10^{-10} M 量级，同时实现复杂生命体系中 O_2^- 波动的实时、原位可视化，为氧化还原生物学研究和精准医学干预提供了全新工具。

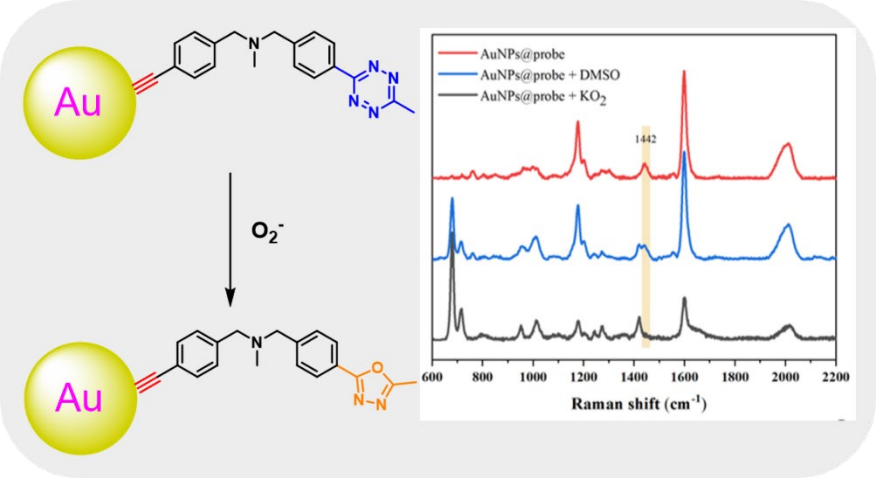


图1：响应型SERS叁键拉曼探针检测O_2^-的机理

关键词：响应型叁键拉曼探针；SERS；超氧阴离子；活性氧

拉曼光谱探究铜离子–磷脂相互作用诱导铜死亡的分子机制

赫英彤，李薇，朱金玉，韩晓霞*

吉林大学化学学院，超分子结构与材料全国重点实验室，吉林 长春，130012

*Email: hanxiaoxia@jlu.edu.cn

铜是线粒体电子传递链中细胞色素 c 氧化酶的关键辅助因子，能够促进细胞呼吸和三磷酸腺苷（ATP）的产生[1]。2022 年 Tsvetkov 等人报道了一种由过量铜离子引起的新型细胞死亡形式，铜死亡[2]。铜死亡通常伴随着铜离子过多、TCA 循环中硫辛酰化蛋白异常聚集、Fe-S 簇蛋白丢失、HSP70 上调以及蛋白毒性和氧化应激等[3]。铜死亡不同于细胞凋亡、铁死亡等程序性细胞死亡形式，其分子作用机制目前仍处于探索阶段。

拉曼光谱能够提供独特的“分子指纹”信息，是研究生物大分子间相互作用的有力工具。本研究利用拉曼光谱探究了 Cu^{2+}与仿生物膜相互作用的分子机制。首先，研究了 Cu^{2+}介导 Fenton 反应从而引起磷脂发生的过氧化反应。图 1 是 633 nm 激发波长下，1,2-二油酰-sn-甘油-3-磷酸胆碱（DOPC）、Cu^{2+}与 H_2O_2 混合后的实时拉曼光谱。在 45 min 的监测时间内，观察到了 DOPC 的烷烃链构象的变化。将 1441 cm^{-1} 处的 CH_2 剪式振动作为参照峰，将不同时间收集的光谱进行归一化处理。位于 1654 cm^{-1} [ν(C=C)]处的峰的相对强度先增强而后减弱，证明 DOPC 的不饱和程度和构象发生了变化。同时因为ν(C=O)伸缩振动也位于此位置，此过程中可能发生碳链的重排并产生中间产物羧酸。随着反应的进行，羧基发生脱水作用，导致其含量下降，从而使该峰的强度降低，说明体系中 Fenton 反应产生的•OH 对 DOPC 的结构造成了破坏。以上结果证明铜离可能通过 Fenton 反应，介导磷脂膜过氧化从而参与铜死亡过程。相关研究的深入开展将为铜死亡的分子机制研究奠定基础。

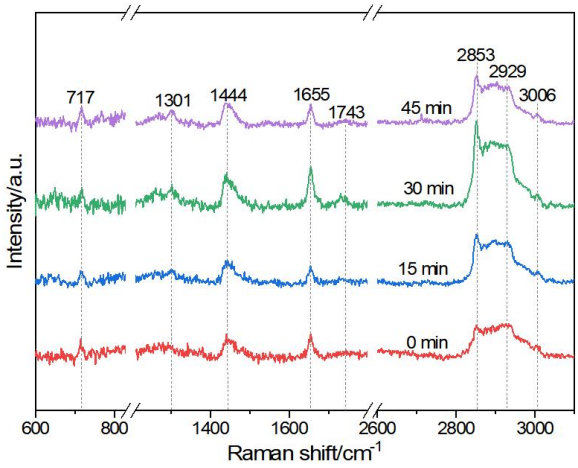


图 1: Cu^{2+}和 H_2O_2 诱导 DOPC 脂质体结构变化的实时拉曼光谱。DOPC、Cu^{2+}和 H_2O_2 的浓度分别为 10 mg/mL、100 μM/L 和 9.79 mM/L。

关键词： 铜离子，拉曼光谱，磷脂过氧化，Fenton反应

参考文献

[1] Steffens, Guy CM, Rosemarie Biewald, and Gerhard Buse. European journal of biochemistry 164.2 (1987): 295-300.

[2] Tsvetkov, Peter, et al. Science 375.6586 (2022): 1254-1261.

[3] Zhang, Ligang, et al. Frontiers in Molecular Biosciences 11 (2024): 1460987.

拉曼光谱结合机器学习对真假新疆蜂蜜分类

熊学洋[1]，张月皎[1,*]，李剑锋[1,2,*]

[1] 中国计量大学，杭州，310018
[2] 厦门大学化学化工学院，厦门，361005

*Email: Li@xmu.edu.cn

拉曼光谱作为一种广泛应用于材料鉴定的技术，在直观和经验上区分与物质相关的成分时存在一定的挑战。区分真假蜂蜜是一个在食品工业中尤为重要的典型案例。本研究提出了一种将拉曼光谱与深度学习算法相结合的方法，以分析真假新疆蜂蜜的特征数据。本文开发了一个基于卷积神经网络（CNN）并融合注意力机制的深度学习模型，并添加随机高斯噪声从而扩充数据集，在对真假新疆蜂蜜的分类中取得了 98.2%的准确率。通过将拉曼光谱数据与深度学习技术结合，本研究为解决类似物质识别问题提供了一种新的有效手段，具有重要的应用前景[1]。

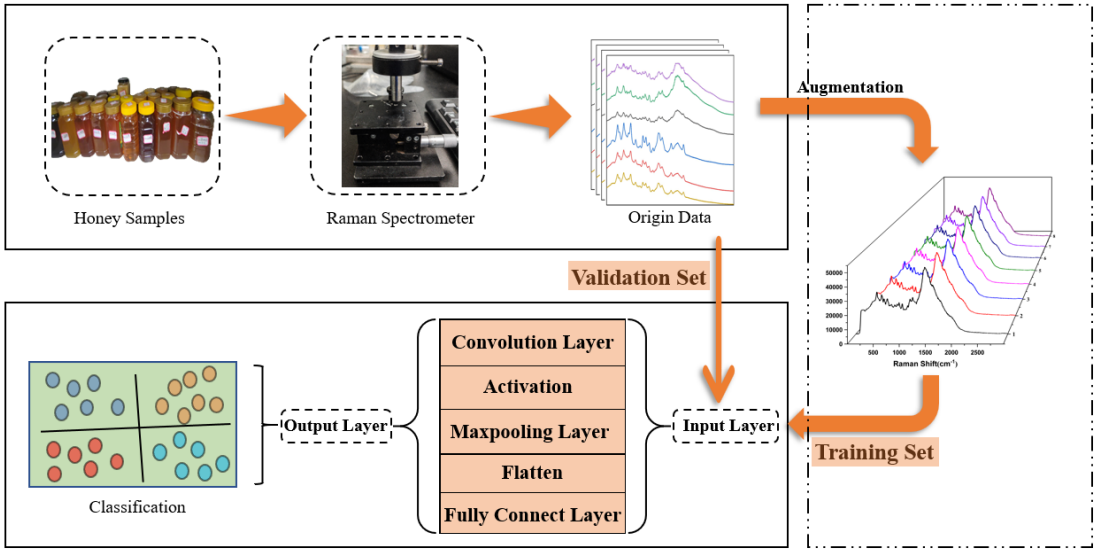


图1：机器学习对真假新疆蜂蜜分类流程图

关键词：拉曼光谱；机器学习；真假新疆蜂蜜；卷积神经网络

参考文献：

[1] OROIAN M, ROPCIUC S. Botanical authentication of honeys based on Raman spectra [J]. Journal of Food Measurement and Characterization, 2018, 12(1): 545-54.

高通量可寻址的单颗粒测量平台

宋嘉凯[1]，刘少创[1]，应佚伦[1]，龙亿涛[1,*]

[1] 南京大学化学化工学院，江苏省南京市栖霞区仙林大道 163 号，210023

*Email: yitaolong@nju.edu.cn

单个纳米颗粒间存在固有异质性，通过测量纳米颗粒的光谱对于了解其形貌、功能，以及纳米颗粒上的化学反应具有很大帮助。为实现快速、准确测量单个纳米颗粒的光学特征，我们设计了一套自动化、高通量、可寻址的单个纳米颗粒光谱测量系统。该系统将暗场照明光源、多波长激光光源、纳米定位平台、光谱仪、高速 CCD 相机、彩色 CCD 相机等多个模块集成于倒置显微镜，并由自主开发的软件系统对其进行控制。该系统通过自动识别暗场图像中的目标纳米颗粒，规划测量路径，并自动采集每个纳米颗粒的光谱，实现单个纳米颗粒的准确定位以及快速光谱测量。基于该系统我们对金纳米球和金纳米棒两种颗粒进行了测量，该系统能够在两分钟内采集上百个颗粒的散射光谱，并且利用 4-硝基苯硫酚作为拉曼探针分子，我们进一步探究了两种颗粒在表面增强拉曼中的功能差异性。该系统为快速、准确的单个纳米颗粒的光谱测量提供了解决方案，为高效的颗粒间异质性分析提供了重要工具。

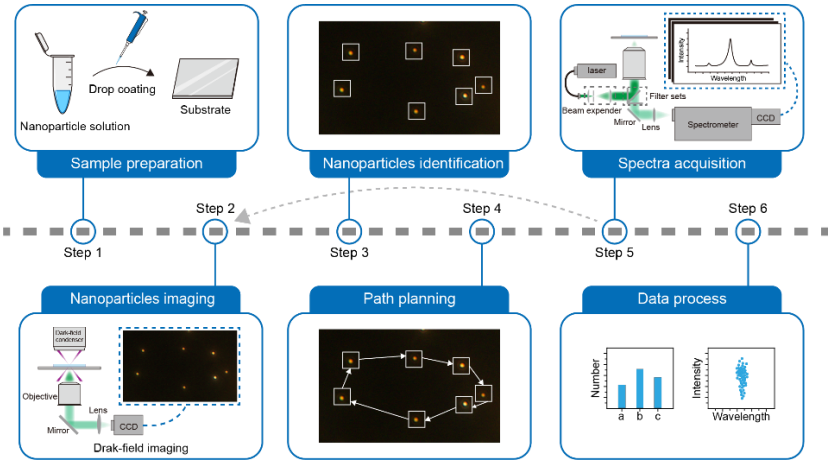


图1 系统工作流程示意图

关键词： 单颗粒；散射光谱；测量系统

参考文献：

[1] Liu, S.-C.; Xie, B.-K.; Zhong, C.-B.; Wang, J.; Ying, Y.-L.; Long, Y.-T. , *Review of Scientific Instruments*, **2021**, 92, 121301.

[2] Liu, S.-C.; Ying, Y.-L; Li, W.-H.; Wan, Y.-J.; Long, Y.-T., *Chemical Science*, **2021**, 2, 3282-3289.

NH_2-MIL-125硅纳米多孔柱阵列的制备及其湿敏性能研究

Lingling Yan [1] , Xinyu Shi[1] , Hongxin Cai[1*] , Yixin Shao [1] , Liang Chen [1] , Qiang Hu [1] , and Lingli Wang [2]

[1] School of Physics and Electronic Information Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo, 454000, PR China

[2] School of Electronics and Information, Zhengzhou University of Light Industry, Zhengzhou, 450002, PR China

E-mail: me2001@hpu.edu.cn. Corresponding Author's address

A Sulfhydryl-β-cyclodextrin (HS-β-CD) modified Ag/porous silicon (HS-β-CD/Ag/PS) substrate was successfully prepared and used for the detection of acetophenone. The amount of HS-β-CD modification could be controlled by its concentration, which had a significant impact on the SERS performance of the substrates. The substrate with the optimal amount of HS-β-CD modification exhibited a strong SERS response to acetophenone molecules. It also displayed good homogeneity with a relative standard deviation (RSD) of 9.56 %, a SERS enhancement factor of up to 2.3×10^{7}, and a detection limit of low to 1×10^{-8} M. The high SERS performance of the substrate can be attributed to the effective enrichment of acetophenone by HS-β-CD, which can form an inclusion complex with acetophenone, trapping it in the cavity. These results suggest that HS-β-CD/Ag/PS substrates hold great potential for SERS analysis of the breast cancer marker acetophenone.

Keywords: Surface-enhanced Raman scattering (SERS); Ag/porous silicon; Acetophenone; Sulfhydryl-β-cyclodextrin (HS-β-CD)

制备用于表面增强拉曼散射检测的 $W_{18}O_{49}$ 纳米线

孟真，左正亮，赵冰*

吉林大学超分子结构与材料全国重点实验室，吉林长春，130012

*Email: zhaob@jlu.edu.cn

氧化钨材料是一种传统半导体材料，因其独特的物理和化学特性而被广泛应用于多种领域。通过还原及形成各类缺陷结构，可获得丰富的亚化学量态组成相（WO_{3-x}），例如$WO_{2.72}$（$W_{18}O_{49}$）、$WO_{2.8}$（W_5O_{14}）和$WO_{2.92}$（$W_{25}O_{73}$）。其中空位最多的氧化物$W_{18}O_{49}$含有混合价态钨离子，是唯一可被分离的氧化物。本研究采用溶剂热法制备$W_{18}O_{49}$纳米线（$W_{18}O_{49}$ nanowires, $W_{18}O_{49}$ NWs），通过简单改变醇解合成比例调控纳米线尺寸，并研究了不同尺寸$W_{18}O_{49}$ NWs的表面增强拉曼散射特性。随着钨源比例的增加，生成的$W_{18}O_{49}$ NWs形态趋近于针状，其晶相更规整，表面增强拉曼散射响应效果更显著。

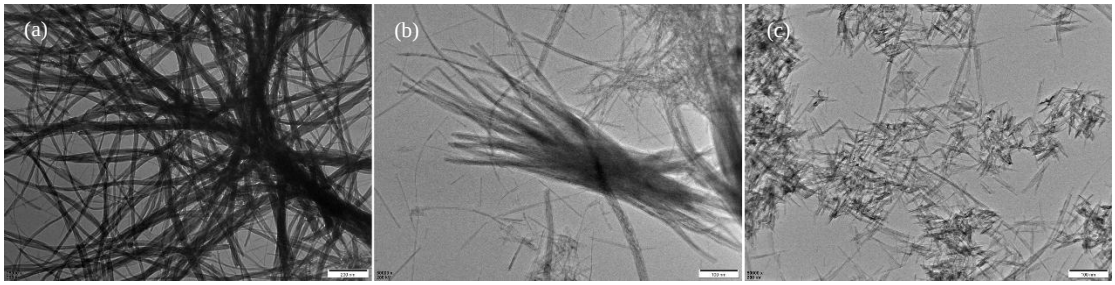


图1. 0.5 wt%（a）、1.0 wt%（b）和2.0 wt% （c）$W_{18}O_{49}$ NWs的透射电子显微镜图像。

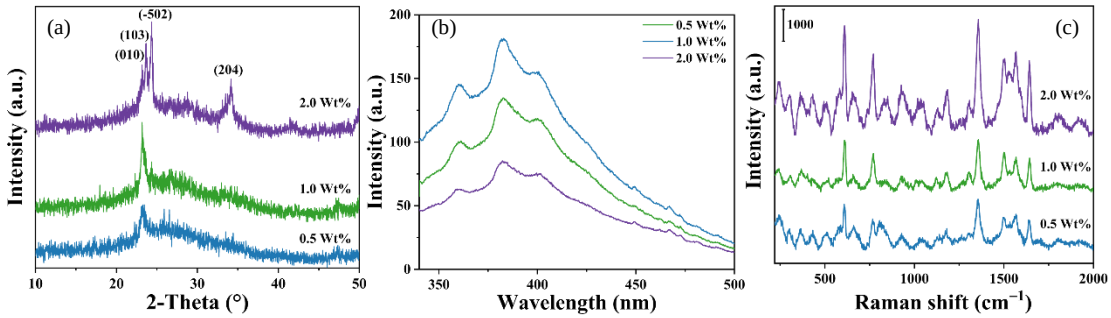


图2. $W_{18}O_{49}$ NWs 的XRD表征（a），$W_{18}O_{49}$ NWs 的发光光谱（b）以及 $W_{18}O_{49}$ NWs 吸附R6G后的表面增强拉曼共振光谱（c）。

关键词： 表面增强拉曼散射；氧化钨

参考文献：

[1] Xie, S.Y.; Chen, D.; Gu, C.J.; Jiang, T.; Zeng, S.W., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2021**, 13, 28, 33345-33353.

[2] Zhu, L.; Meng, Z.; Hu, S.Z.; Zhao, T.C.; Zhao, B., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2023**, 15, 18, 22730–22736.

Ag-Ta 掺杂 TiO2 基底在食品添加剂检测中的应用

左正亮[1]，孟真[1]，赵冰[1,*]

[1] 吉林大学超分子结构与材料全国重点实验室，吉林省长春市前进大街 2699 号，130012

*Email: 15325507918@163.com

丁基羟基茴香醚（BHA）是一种广泛使用的合成酚类抗氧化剂，用于延缓食品氧化变质。然而，过量摄入BHA存在潜在健康风险，因此建立其快速、高灵敏度的检测方法对保障食品安全至关重要。本研究通过合成银纳米颗粒修饰钽元素掺杂的二氧化钛作为高性能SERS活性基底，利用其局域表面等离子体共振效应，显著增强了BHA分子的拉曼信号。对纳米基底的形貌、粒径等条件进行了优化，以获得最佳增强效果。实验结果表明，该方法对BHA的检测具有极高的灵敏度，其检测限（LOD）可低至1×10^{-5} M。

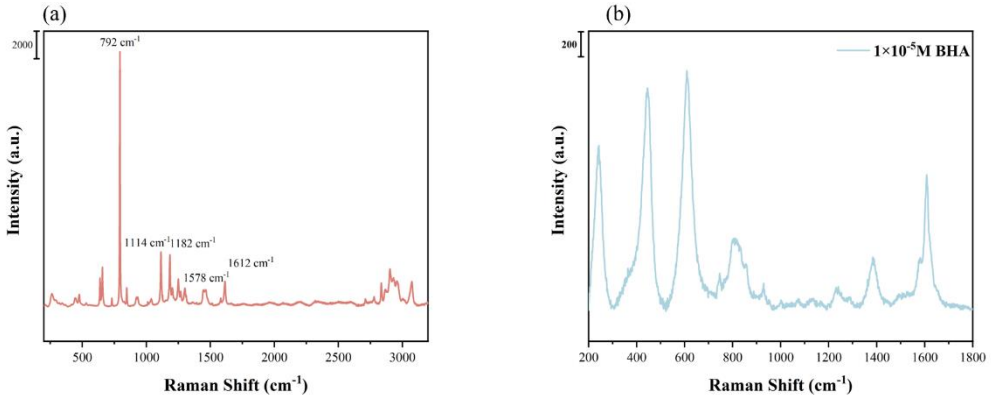


图1：(a) 丁基羟基茴香醚(BHA)的拉曼图谱，(b)1×10^{-5} M BHA吸附在Ag/Ta-TiO_2上的SERS图谱

关键词：表面增强拉曼散射（SERS）；丁基羟基茴香醚（BHA）；食品安全；抗氧化剂；

参考文献：

1. Yao, W.; Sun, Y.; Xie, Y.; Wang, S.; Ji, L.; Wang, H.; Qian, H. *European Food Research and Technology* **2011,** *233* (5), 835-840.

2. Zhang, Q.; Liu, Z. L.; Duan, L. F.; Cao, Z. J.; Wu, B.; Qu, L. L.; Han, C. Q. *APPLIED SURFACE SCIENCE* **2023,** *611*.

氧驱动的 ReS_2-ReO_3 杂化界面为非贵金属 SERS 提供了双重电荷转移途径

王楠[†1]，陈超[†2]，刘洛彤[1]，王琳[1,*]

[1] 中国地质大学(北京)材料科学与技术学院矿物材料国家重点实验室，北京，100080
[2] 中国科学院长春应用化学研究所稀土资源利用国家重点实验室，长春，130022

* wanglin712@cugb.edu.cn

金属1T′相过渡金属二硫化物（TMDs ）由于其高载流子密度和丰富的表面态，是一种很有前途的无贵金属表面增强拉曼光谱（SERS） 基底。然而，它们的性能仍然受限于弱的表面相互作用和低效的界面电荷转移。在这里，我们发展了一种氧驱动的相工程策略，通过对1T′-ReS_2的可控热退火来构建ReS_2-ReO_3杂化界面。理论模拟表明，氧的掺入和局部ReO_3畴的形成诱导了表面电荷的重新分布，丰富了活性结合位点。通过EC-SERS、飞秒瞬态吸收（fs-TA） 和光谱实验，进一步证实了这些杂化界面有利于电荷在ReS_2-ReO_3结构域之间和分子-基底界面之间的转移，从而导致更强的吸附和拉曼信号增强。与原始ReS_2相比，优化后的基底对罗丹明6G（R6G） 检测的增强因子（EF） 提高了38.9倍，实现了10^{-7} M的检测限，同时表现出优异的均匀性和稳定性。这项工作提出了一种通过界面和电子结构工程在TMDs系统中实现无贵金属SERS的通用途径。摘要正文。

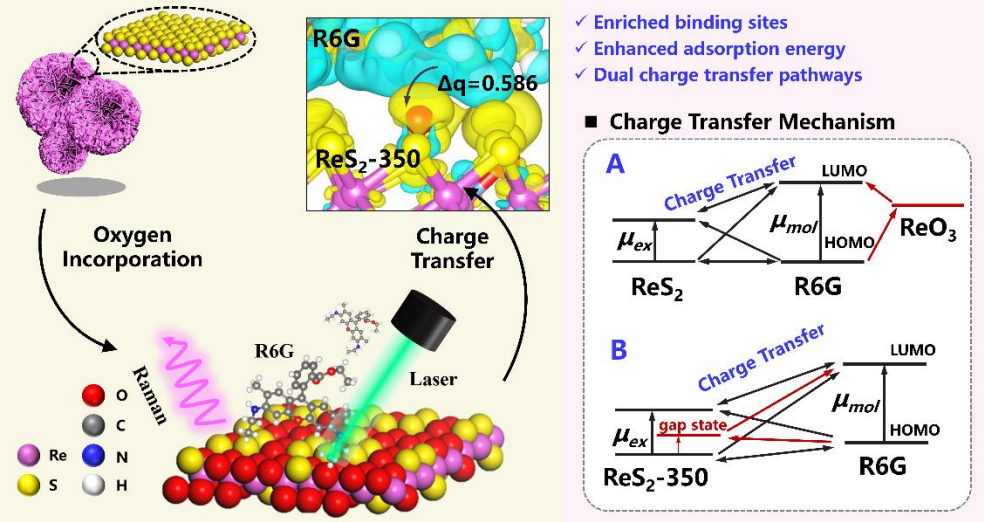


图1：氧驱动的ReS_2-ReO_3杂化界面的形成增加了活性位点，提高了基底与分子间的吸附能以及形成了有效的电荷转移路径

关键词：SERS；ReS_2；电荷转移；氧掺入

Interfacial water regulation enables efficient Zn^{2+} transport and electrode stability

ChongYuan Zhai, Yao-Hui Wang*, Jian-Feng Li*

College of Materials, Xiamen University, Xiamen, China

Aqueous zinc-ion batteries (AZIBs) have emerged as a promising next-generation energy storage technology due to their inherent safety and environmental sustainability.The dynamic evolution of the solvation structure at the electrode/electrolyte interface plays a critical role in AZIBs, influencing complex issues such as the hydrogen evolution reaction (HER) and parasitic side reactions.These challenges are intrinsically linked to perturbations of interfacial water molecules and associated hydrogen-bond network rearrangements during Zn^{2+} solvation/desolvation.We successfully correlated the Zn2+ deposition process with the interfacial water evolution process by using in-situ SERS technology and obtained high-performance AZIBs through interfacial species stabilization strategies

Crystal Plane-dependent Transport of Water Molecules

Rui Ma, Yao-Hui Wang*, Zhaoxiong Xie*, and Jian-Feng Li*

* Xiamen University

Interfacial water molecules at Au single crystal/electrolyte interfaces exhibit facet-dependent transport mechanisms and arrangement structures, which not only govern proton-coupled electron transfer dynamics but also critically modulate electrocatalytic reaction pathways. Precise characterization of crystallographic facet-specific hydration structures and orientation-dependent hydrogen-bonding networks provides atomic-level insights into the structure-activity relationships in Au-based electrocatalytic systems. This serves as a fundamental basis for designing facet-engineered catalysts with optimized interfacial water-mediated reaction kinetics.

基于 AuNRs@ZIF-8/AuNPs 复合结构胞内谷胱甘肽检测及光热治疗研究

王洛林[1,2#]，王焕然[1,2#]，郝凌婉[1,2]，蒋如剑[1,2]，王超[1]，周露[1,2*]

[1]化学与制药工程学院，山东第一医科大学，济南 250117
[2]医学科学创新中心，山东第一医科大学，济南 250117

*Email:luzhou@sdfmu.edu.cn

谷胱甘肽（GSH）是细胞内含量最丰富的非蛋白巯基类抗氧化剂，在氧化还原稳态维持、解毒及免疫调节等核心生命活动中起关键作用。其表达异常与阿尔茨海默病、肝损伤、肿瘤、炎症等疾病密切相关，是重要的早期诊断生物标志物[1]，因此建立高精准GSH检测方法对疾病诊疗意义重大。SERS技术因兼具分子“指纹”识别能力和单分子检测潜力，在生物标志物检测中应用广泛。但GSH拉曼散射截面极低，严重限制其直接SERS检测灵敏度，本文构建AuNRs@ZIF-8/AuNPs复合纳米结构[2]，借助金纳米结构（AuNRs/AuNPs）的类过氧化物酶活性可催化底物显色，而GSH能抑制该反应，实现间接显色与SERS检测；ZIF-8可保护AuNRs避免聚集并富集GSH，最终实现比色-SERS双重高灵敏检测。此外，AuNRs的LSPR效应可通过调控长径比匹配近红外生物窗口，产生强局域电磁场与光热效应：前者增强拉曼信号以提升检测灵敏度，后者可实现光热杀菌与肿瘤消融，使结构具备“检测-治疗”一体化潜力。

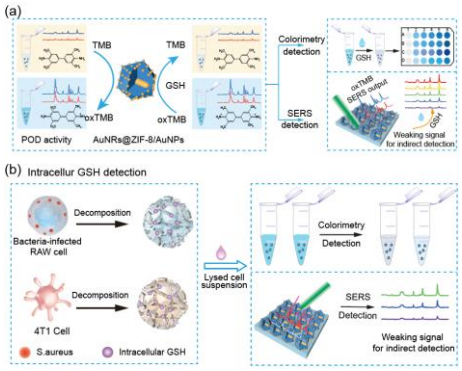


图1：AuNRs@ZIF-8/AuNPs纳米平台的合成和诊断与治疗一体化示意图

关键词：谷胱甘肽；纳米酶；比色检测；SERS检测；光热治疗

参考文献：

[1] Wang B, Zhang Y, Ji Y, et al. GSH-Responsive Semiconducting Polymer as a Nanotheranostic Platform for NIR-II Imaging-Guided Chemo-Photothermal Therapy[J]. Macromolecular Rapid Communications, 2025, 46(10): 2401098.

[2] Yu Y, Zhang J, Huang W, et al. Spatiotemporally controlled AuNPs@ ZIF-8 based nanocarriers for synergistic photothermal/chemodynamic therapy[J]. Acta Biomaterialia, 2024, 175: 317-328.

用于原位动态检测光敏剂亚甲基蓝的氧化石墨烯功能化光纤 SERS 探针

陈琦[1,2,3],杜熙雯[1,2],郑凯[1,2],周俊[1,2],邹秋顺[1,2],戴世勋[1,2],张培晴[1,2*],周露[3*]

[1] 浙江省先进光功能材料与器件重点实验室，宁波大学，宁波 315211
[2] 浙江省先进红外光电材料与器件工程技术研究中心，宁波大学，宁波 315211
[3] 医学科学创新中心，山东第一医科大学，济南 250117

* zhangpeiqing@nbu.edu.cn, luzhou@sdfmu.edu.cn

光动力疗法（PDT）利用光敏剂、特定波长的光和氧之间的相互作用，产生具有细胞毒性的单线态氧，选择性地杀死病变细胞。亚甲基蓝（MB）作为一种光敏剂，因其出色的光化学特性和生物相容性，已被广泛应用于光化学疗法。然而，传统的检测方法往往涉及复杂的取样过程，难以实现对亚甲基蓝动态变化的实时、原位监测。本研究制作了一种氧化石墨烯（GO）功能化光纤 SERS 探针，用于原位动态检测细胞培养基中的亚甲基蓝。该探针由激光诱导银纳米立方体（Ag NCs）和 GO 涂层组装而成，大大提高了探针的稳定性、均匀性和生物相容性。该探针对结晶紫（CV）的检测限低至 1.0×10^{-9} M，SERS 增强因子为 1.89×10^{6}，并在 1.0×10^{-5} 至 1.0×10^{-9} M 的浓度范围内保持线性。同时，该探针具有高灵敏度和良好的稳定性，可实时监测 DMEM 培养液中 MB 的浓度变化，线性检测范围为 1.0×10^{-6} 至 1.0×10^{-3} M。因此，所开发的探针可成功应用于复杂生物环境中的亚甲基蓝检测，显示出巨大的潜力，并有望应用于 PDT 的临床。

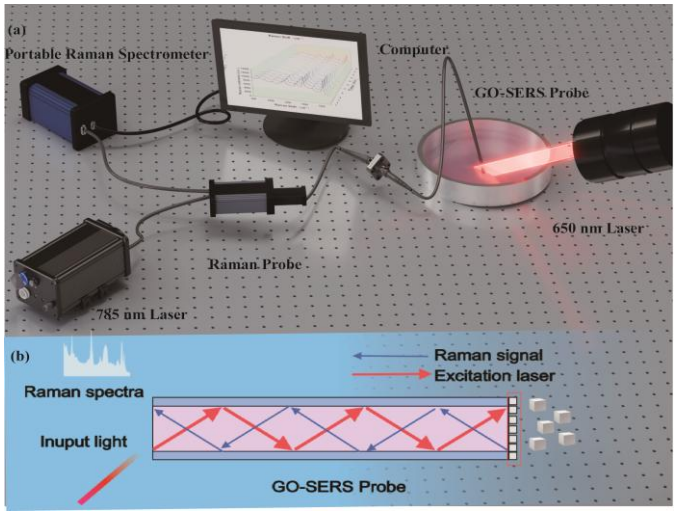


图1：便携式拉曼检测平台示意图

关键词：表面增强拉曼散射，激光诱导自组装，光纤传感器

基于 Au-MOF 纳米酶增强光催化诊疗一体化平台的构建

王焕然[1,2]，王洛林[1,2]，宋妍[1,2]，郝凌婉[1,2*]，蒋如剑[1,2*]，周露[1,2*]

[1]化学与制药工程学院，山东第一医科大学，济南 250117

[2]医学科学创新中心，山东第一医科大学，济南 250117

*Email: luzhou@sdfmu.edu.cn

细菌性角膜炎发展迅速，易致角膜瘢痕与视力丧失[1]；受耐药性上升与角膜屏障所限，传统抗生素在疗效和靶向性上均显不足。基于 Au-MOF 纳米粒子的多功能试剂在细菌性角膜炎的同步成像与治疗方面展现出巨大潜力。然而，要在高精准度、高抗菌效率和生物相容性之间实现平衡，仍是一项挑战。本文，构建了 4-MPBA 修饰的 UiO-66-NH_2@AuNPs 纳米异质结，它能够通过表面增强拉曼散射（SERS）识别细菌，并在可见光照射下，通过多纳米酶级联效应，可高效清除革兰氏阳性菌与革兰氏阴性菌。其中，4-MPBA 分子在拉曼成像引导的细菌治疗中扮演三重功能：细菌靶向结合、SERS 标记，以及抑制有毒金离子的过度释放。UiO-66-NH_2@AuNPs/4-MPBA 既能与细菌表面靶向结合，又可协同发挥纳米酶活性和光催化作用对抗细菌。同时，该结构依托 SERS 技术，可实时监测角膜炎动物模型中残留细菌情况。将此体系制备成眼用滴剂，通过局部给药直接作用于感染病灶，既能提升角膜滞留时间，又能增强治疗精准性。本研究有望为利用便携式光源、可视化靶向清除细菌，提供极具价值的纳米结构策略，为细菌性角膜炎治疗开辟新路径。

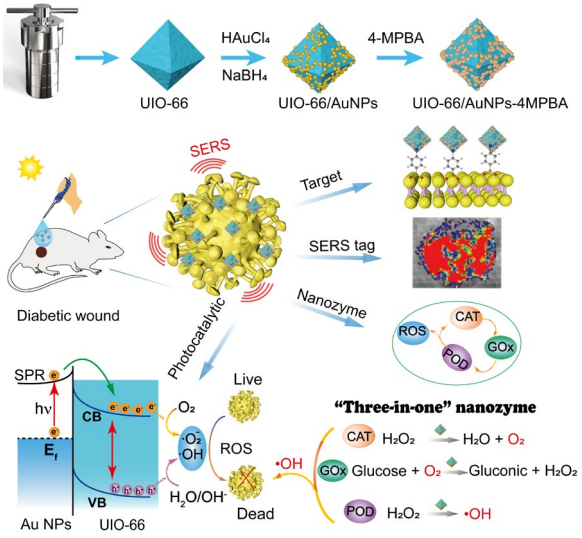


图1：UiO-66-NH_2@AuNPs/4-MPBA可视化抗菌、治疗策略的设计

关键词： SERS成像；细菌性角膜炎；纳米酶；光催化；抗菌

参考文献：

[1] Y. Dai, J. Zhang, S. Zhang, L. Li, C. Qu, Journal of Controlled Release, **2024**, *376*, 382-394.
[2] P. Li, J. Kang, X. Wu, D. Wang, R. Du, M. Wang, A. Dong and Y. Li, Nano Today, **2024**, 57

基于SERS-AI技术的肿瘤相关巨噬细胞组学解析

Tumor-Associated Macrophages Cytomics Resolution Base on SERS-AI Technology

摘要：细胞异质性驱动着癌症研究的进程，与癌症用药、疗效评估等方面密切相关。然而传统研究细胞异质性的所用的流式细胞术等技术，需要对细胞进行冗杂的预处理，操作过程复杂且成本高。本文通过无损的SERS光谱技术，构建了Au@CDs复合基底，该基底在显著增强SERS信号的同时展现出良好的生物相容性。1D CNN 神经网络被用于区分三种不同表型巨噬细胞的SERS光谱，并学习其分类特征，实现准确率达到95%以上。进一步将SERS数据与mRNA-seq转录组学结果相互印证，本研究实现了对特征拉曼峰的生物分子指认，从而揭示了与巨噬细胞极化状态相关的潜在生物标志物。SERS组为巨噬细胞极化分析提供了一种高效、无损分析的研究方法。

关键词：巨噬细胞异质性、SERS光谱、卷积神经网络、组学

Band-Gap-Tunable Carbon Quantum Dots for Surface-Enhanced Raman Scattering

李贞臻[1]，景卓晗[1]，宁梦玲[1]，陈浩琳[2]，刘智明[1,*]

[1] 华南师范大学光电科学与工程学院，广州，510631
[2] 中国人民解放军南部战区总医院麻醉科，广州， 510010

*Email: liuzm021@126.com

摘要正文：Carbon dots (CDs) with photoluminescence properties have been widely recognized, however, their inherent surface-enhanced Raman scattering (SERS) performance is rare reported. Herein, we propose a type of band-gap-tunable carbon quantum dots (CQDs) derived from metal-phenolic network (MPN) that exhibits excellent and controllable SERS performance. MPN-CQDs may be the ideal nonmetallic SERS substrates to accurately elucidate the chemical mechanism (CM) due to their simply controllable bandgap structure. By screening the coordinated metal ions of MPN, MPN-CQDs can realize the optimal SERS effect with the maximum Raman enhancement factor of 5.5×10^4, also exhibit outstanding SERS reproducibility and stability. We then systematically disclose the interfacial photo-induced charge transfer process and corresponding migration pathways between band-gap-tunable MPN-CQDs and analyte. This class of nonmetallic SERS substrates is finally applied for detection of hemoglobin with high sensitivity; further combined with machine learning algorithm, we have successfully achieved precise identification of the heterogeneity of hemoglobin. This is the first evidence for the tunable SERS performance in CQDs, which also offers the facile avenue for in-depth understanding of CM in nonmetallic materials.

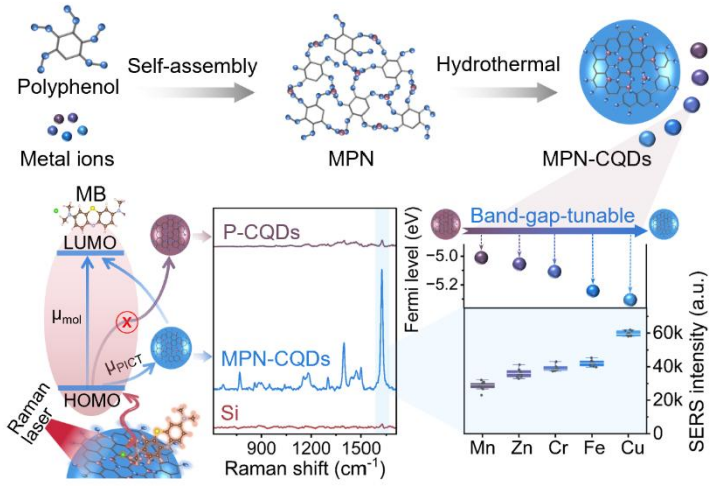


图1： Schematic illustration of the MPN-CQDs-based SERS system

关键词： carbon dots, metal-phenolic network, surface-enhanced raman scattering, chemical enhancement mechanism, band-gap-tunable

深度学习结合拉曼光谱实现 iPSC 无损质量监测

张伟娜，万鉴辉，朱韦乐，钟丽云*

通感融合光子技术教育部重点实验室，广东工业大学，广东 广州，510006

*Email:zhwna@gdut.edu.cn

诱导多能干细胞（iPSC）因其在再生医学领域的独特价值而备受关注。在其多能性维持与定向分化过程中，如何实现快速、无损、精准的质量监测是亟待解决的难题。拉曼光谱技术以非侵入、无标记、高精度的优势，为iPSC状态监测提供了独特契机，然而高维光谱数据的复杂性、细胞多组分信号混叠严重及高分辨拉曼成像耗时漫长等，均阻碍了其在细胞质控与动态监测中的应用。针对此，我们构建了基于深度学习的iPSC拉曼监测平台：首先，通过深度网络对高维拉曼光谱进行智能降噪与特征提取，实现对未分化、分化中及微小异常iPSC的快速分类与定量评估；其次，基于深度学习的光谱解混模型能够有效分离并量化蛋白质、核酸等关键生物分子比例，从分子层面揭示iPSC状态转变机制；最后，结合稀疏采样与光谱-空间先验知识，实现了高保真度、高分辨率拉曼成像的快速重建，将成像时间缩短一个数量级，使iPSC的长时程、动态监测成为可能。多个模型协同应用，构建了自数据采集、噪声抑制、信号分离到状态判读的完整方案，提升了拉曼光谱在iPSC研究与应用中的实用性和效率，不仅可用于再生医学细胞库的质量控制，还可扩展至药物作用机理研究和疾病模型动态监测，为无标记在线监控与智能化生产提供新思路。

关键词：拉曼光谱；诱导多能干细胞；质量监测；深度学习

等离激元纳米颗粒单层膜修饰纳米毛细管助力单细胞氧化还原代谢监测

江蕾[1]，卢巧怡[1]，刘纪伟[1]，李大伟[2,*]，黄又举[1,*]

[1]杭州师范大学，浙江省杭州市余杭区仓前街道余杭塘路2318号，311121
[2]华东理工大学，上海市徐汇区梅陇路130号，20023

*yjhuang@hznu.edu.cn; daweili@ecust.edu.cn

单细胞如何响应氧化还原扰动的机制研究对预测细胞命运抉择至关重要。表面增强拉曼光谱（SERS）活性纳米毛细管虽为单细胞分析提供新途径，然其信号灵敏度与重现性难以兼得。本研究开发了一种等离激元纳米颗粒单层膜修饰的纳米毛细管，作为仿生内窥镜实时监测单细胞氧化还原代谢。其通过金纳米颗粒单层膜共形转移至毛细管尖端，并修饰氧化还原响应探针而实现。单层膜内强近场耦合形成均匀热点，可高灵敏、高重现地追踪氧化还原物种触发的SERS信号变化。该毛细管结合高精度微操技术，能以低侵入性与高空间分辨率原位监测单细胞氧化还原状态。通过光-电同步记录技术解析铁死亡事件，首次在单细胞层面阐明不同铁死亡诱导剂刺激下氧化还原失衡与膜损伤的关联机制。此研究旨在为细胞氧化还原动力学提供可行方案，深化对相关生理病理通路的见解。

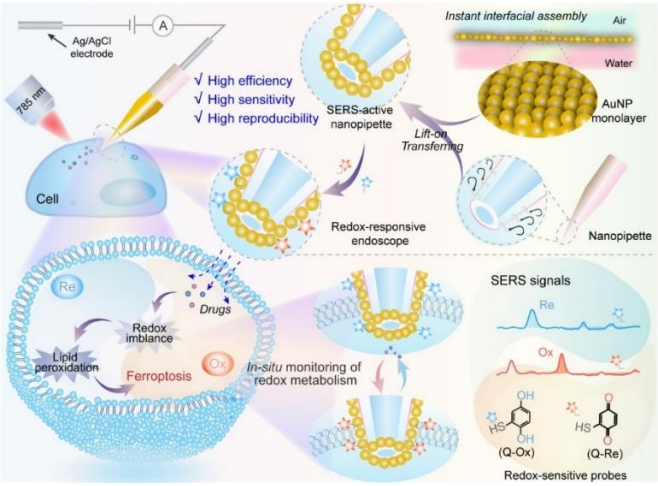


图1：等离激元纳米颗粒单层膜修饰流程和单细胞监测示意图

关键词：单细胞；氧化还原代谢；铁死亡；纳米毛细管；纳米颗粒单层膜

参考文献：

[1] Lei Jiang, Youju Huang*, Dawei Li*, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, e202502129
[2] Song, L. P. Youju Huang*, *et al. Sci. Adv.* **2021**, eabk2852.
[3] Schubert, C. *Nature* **2011**, *480*: 133-137.

代谢振动特征的体内时空获取揭示胃溃疡的发生

程玉琦[1]，赵令今[1]，陈卓[1,*]

[1]湖南大学化学化工学院，化学生物传感全国重点实验室，分子科学与生物医学实验室，湖南大学环境科学与工程学院，湖南，长沙，410082

*Email: zhuochen@hnu.edu.cn

胃液代谢异常通常直接反映胃粘膜的病理变化，胃液成分的有效分析可以为胃部疾病的诊断提供重要依据。胃液含量不是静态的，而是随疾病发展状态或治疗效果动态变化的。因此，精准的原位胃液代谢动力学获取对于了解胃部疾病的发生和发展至关重要，但具有挑战性。

本研究开发了一种集成式磁等离子体系统（Magnetoplasmonic system, MPS），实现了体内长期时空代谢信息分析和胃溃疡评估[1]。通过同轴静电纺丝技术构建的MPS具有独特核壳结构：外壳为多孔海藻酸钙-银等离子体水凝胶，内核由铁钴石墨纳米囊（FeCo@Graphene）磁响应单元构成。该体系通过协同作用（包括分子富集效应、尺寸选择性筛分及磁驱动）显著提升胃液中游离代谢物捕获效率达9.76倍。实验验证表明，该系统在模拟胃液（SGF）及离体胃模型中稳定获取多重代谢物的振动光谱指纹信息。基于时间分辨表面增强拉曼光谱（SERS）技术，该研究实现了大鼠胃内代谢物含量时空变化监测，边缘直方图证实不同阶段代谢物水平正相关。通过使用光谱降维可视化与随机森林分类模型，实现了溃疡与正常大鼠的高精度区分。值得注意的是，溃疡发生后，1602 cm^{-1}和2112 cm^{-1}处的拉曼信号呈强正相关，提示它们可能与溃疡发生有关。该研究首次对胃内的原位代谢信息进行了分析，并探讨了它们在疾病发生过程中的相关性，这有希望揭示胃部相关疾病的发生发展，也为精准医疗时代胃部疾病的分子诊断提供新的见解。

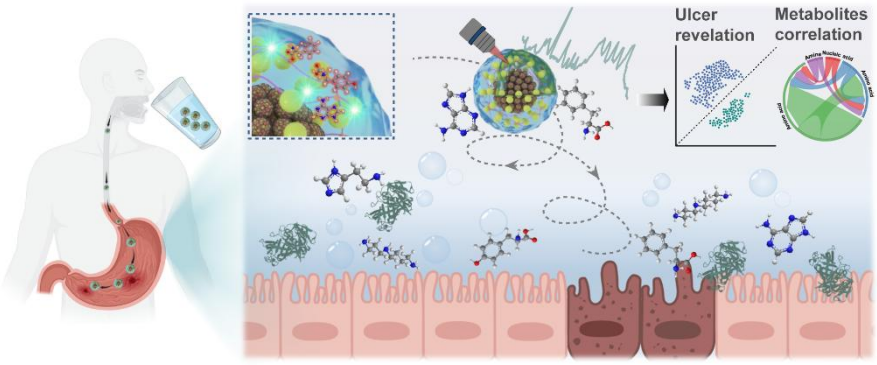


图1：活体胃液代谢信息时空获取与溃疡诊断

关键词：磁等离子体系统；代谢动力学；拉曼光谱；代谢物相关性；胃溃疡

参考文献：

[1] Cheng, Y.Q.; Zhao, L.J.; Wen, Y.J.; Ren, Z.; Zeng, J.Y.; Shi, R.; Cai, X.Q.; Dong, Q.; Chen, L.; Lin, C.W.; Chen, Z. *Biomaterials,* **2025**, *322*, 123383.

偏振拉曼显微光谱对手性布洛芬的定量研究

黄静[1,*]，牛犇[1]，刘峻坤[2]，詹求强[1]

[1] 华南师范大学，广东省广州市番禺区华南师范大学大学城校区理 5 栋，511400
[2] 华南师范大学，广东省广州市番禺区华南师范大学大学城校区理 4 栋，511400

*Email: jing_huang@scnu.edu.cn

手性药物进入人体后，其药理作用主要与体内手性药物与目标分子的手性匹配和分子识别能力有关。对于拥有S-和R-两种对映异构体的手性布洛芬，S-布洛芬是其主要活性成分，通过抑制环氧合酶和减少前列腺素的合成，发挥解热、镇痛和抗炎作用。而 R-布洛芬对环氧合酶的抑制作用相对较弱，几乎没有直接的药理作用。因此，手性药物对映异构体之间疗效的差异引起了研究人员的广泛关注[1-2]。通过测量左右圆偏振光的拉曼信号可以区分手性药物的对映异构体，基于此的拉曼光学活性已成为研究分子手性的主要技术之一[3-4]。

通过实验室自己搭建的偏振拉曼显微光谱系统，测量了S-布洛芬在不同偏振角取向下的偏振拉曼光谱。此外，收集了不同S-布洛芬溶液的0°极化拉曼光谱，S-布洛芬在832 cm^{-1}处的C-C-C化学键强度与其溶液浓度的拟合系数高达 0.99，并利用建好的模型成功对三种商用布洛芬溶液进行了准确的定量检测。本研究的初步结果表明，偏振拉曼光谱在研究手性药物方面具有很大的潜力。

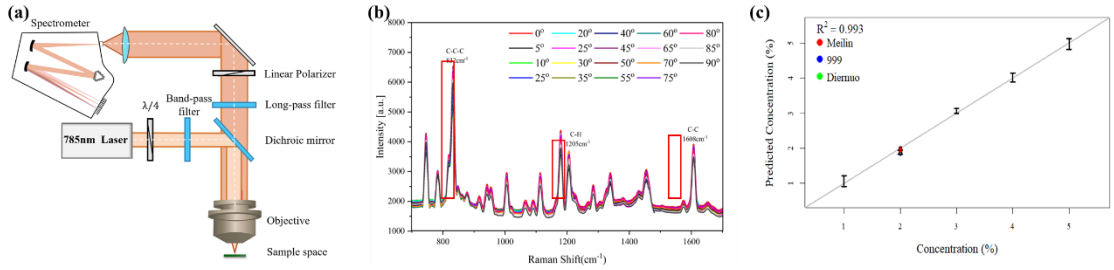


图1：(a)自己搭建的拉曼显微光谱系统，(b) S-布洛芬在不同偏振角度的偏振拉曼光谱，(c) 商用布洛芬溶液的定量检测。

关键词：偏振拉曼光谱、拉曼光学活性、手性、布洛芬、定量

参考文献：

[1] Senkuttuvan,N.: Komarasamy, B.: Krishnamoorthy, R.; et al. *RSC Adv.* **2024**, 14(45), 33429-33448.
[2] Yaoran,L.; Zilong, W.; WD A.; et al. *Nat. Rev. Chem.* **2023**,7(5), 355-373.
[3] Gao, W.; Li, Y.: Zhang, Q.; et al. *Anal. Chem.* **2020**, 92(8), 6136-6144.
[4] Vashistha.K.V: Kumar, T.: Yadav,S.: et al. *Chirality* **2024**, 36(2), e23647.

响应型 SERS 传感器研制及其用于疾病精准诊断

曹俊[1]，沈爱国[1,*]

[1] 武汉纺织大学，生物工程与健康学院，武汉市江夏区阳光大道 1 号，430200

*Email: caojunttxs@126.com

疾病的精准诊断对认知疾病的发生、发展、预后以及针对性、个性化治疗至关重要[1]。表面增强拉曼散射（SERS）技术凭借其单分子水平的超高灵敏度和独特的分子指纹识别能力，为疾病标志物的超灵敏、特异性检测提供了强大工具。通过将具有高SERS活性的贵金属纳米结构与响应性识别元件进行高效集成与功能化，特异性识别目标物并触发响应单元发生构象变化或解离，从而动态调控“热点”形成或拉曼信号分子的信号输出，实现SERS信号的动态激活与放大[2]。这种“信号激活”机制有效降低了背景干扰，大幅提升了检测的灵敏度与特异性。通过系统优化纳米基底的增强性能、探针的响应动力学及信号输出策略，实现复杂临床样本中多种关键疾病标志物的高精度定量检测，从而为癌症早期筛查与分型、心力衰竭快速诊断及神经退行性疾病监测等临床场景提供实用性工具。本研究为发展下一代高灵敏、高特异、智能化的即时诊断（POCT）平台奠定了技术基础，有力推动精准医学的发展。

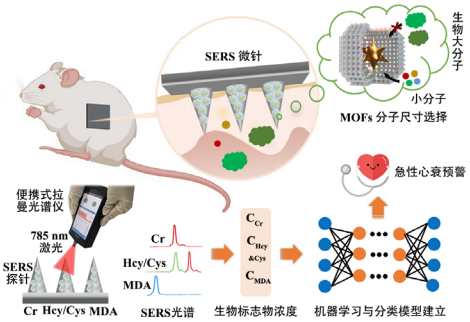


图1：多参数响应的可穿戴SERS微针构筑及用于急性心衰预警研究的示意图。

关键词：响应性SERS；特异性检测；疾病精准诊断

参考文献：

[1] Liao, S.; Cao, J.; Zhu, W.; Li, W.; Hu, J.; Shen, A., *Trac-Trend Anal. Chem.*, **2023**, *169*, 117357.

[2] Zhang, B.; Cao, J.; Liao, S.; Cheng, P.; Ting, Z.; Yu, S.; W.; Li, Shen, A., *Anal. Chem.*, **2024**, 96, 5331-5339.

等离子体超构表面增强电化学发光的机制与传感应用研究

梁子慧[1]，王培琳[2]，李文延[2]，李贞润[2]，马强[2,*]

[1] 吉林师范大学，吉林省长春市高新区卓越大街 399 号，130103
[2] 吉林大学，吉林省长春市前进大街 2699 号，130012

Email: liangzihuixo@163.com *qma@jlu.edu.cn

电化学发光（ECL）是一种由电化学反应产生的高能物种通过电子转移反应引发的发光过程，具有背景信号低、时空控制性好等优点，在临床诊断中得到了广泛的应用[1]。随着对痕量生物标志物检测灵敏度要求的不断提高，开发ECL信号放大策略已成为该领域的重要研究方向。超构表面是一种二维人工结构，通过亚波长尺度的结构设计可以对光波进行灵活调控，突破了自然材料的电磁特性限制[2]。基于纳米贵金属的等离子体超构表面调控ECL的策略具有多机制协同作用、高度空间局域性及适配不同发光体系等特点[3]。本研究基于不同材料的结构设计、共振特性和光场调控理论，通过优化亚波长结构单元，并施加外磁场激励，开发了双层超构表面、磁等离子体超构表面、磁镜-杂化超构表面等多种超构表面-ECL体系，实现了对光信号强度和偏振态的调控，显著提升了ECL分析灵敏度和信号分辨率。进一步将超构表面-ECL体系与多种传感策略相结合，构建了高性能传感器用于miRNA、细胞外囊泡等生物标志物的检测。

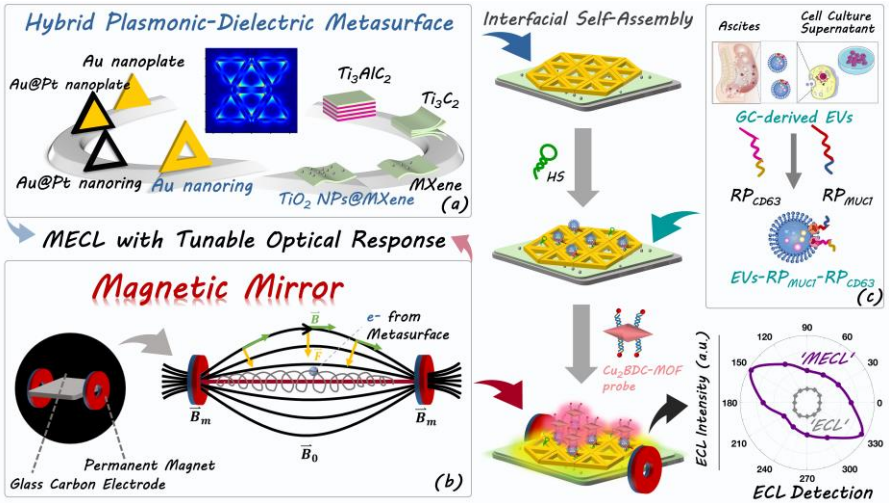


图1：磁镜-杂化超构表面调控ECL策略及MUC1/CD63阳性细胞外囊泡分析的示意图。

关键词： 电化学发光，等离子体超构表面，等离激元，信号调控，生物传感

参考文献：

[1] Fang Y.; Yang H.; Hou Y. et al. *Nat. Commun.* **2024**, 15: 3597.
[2] Smith D. R.; Pendry J. B.; Wiltshire M. C. K. *Science*, **2004**, 305(5685): 788-792.
[3] Dorrah A. H.; Capasso F. *Science*, **2022**, 376: eabi6860.

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

面向零样本学习的拉曼光谱信号预处理方法研究

曾英杰[1]，江本赤[1]，范贤光[2]，王昕[2,*]

[1]安徽工程大学 人工智能学院，安徽省芜湖市北京中路，241000
[2]厦门大学 航空航天学院，福建省厦门市翔安区翔安南路，361102

*Email: zengyingjie1@ahpu.edu.cn

精确提取拉曼光谱中的分子指纹信息是化学分析与生物检测领域的核心任务。然而，原始测量光谱中普遍存在随机噪声以及由荧光效应引起的基线漂移，这两种干扰成分相互叠加，严重影响了后续的定性与半定量分析。为应对这一挑战并实现光谱信号的高保真度恢复，本研究提出了一个基于零样本学习的端到端自动化处理框架。首先，为解决高质量无噪光谱样本稀缺的问题，框架采用一种基于可解释物理先验的自监督学习策略，通过深度序列学习网络发掘单条光谱自身的统计特性作为监督信息，实现对随机噪声的分离；在此基础上，为解决传统基线校正算法依赖人工调参的局限性，框架将一个经典的迭代多项式拟合模型重构为可微模块，通过梯度下降自动优化其关键内部参数，实现对背景基线的动态自适应扣除，且输出的优化参数为模型的自适应策略提供了直接的物理解释。本研究工作旨在提供一个完全自动化的拉曼光谱预处理技术方法，为从复杂背景干扰中可靠地提取光谱特征提供了一种无需样本依赖的高效途径。

关键词： 拉曼光谱；零样本学习；自监督学习；可解释性；信号预处理

湍流云滴的光镊-高时间分辨受激弹性散射光谱测量

孙久义 [1]，张韫宏 [1,*]

[1] 北京理工大学化学与化工学院物理化学研究所，北京 100081

*Email: yhz@bit.edu.cn

云层湍流是大气科学中影响云形成、降水过程和气候模拟的关键因素，其中云滴的动态行为扮演着核心角色。本文利用高时间分辨的受激弹性散射光谱与光镊技术结合，对云层湍流中的云滴进行实时分析。该技术通过光镊精确捕获和操控单个云滴，同时运用受激弹性散射光谱实现高时间分辨谱学测量，揭示湍流条件下云滴尺寸、形状和成分的瞬态变化，探讨了云滴在湍流态的凝聚和挥发机制。研究结果表明湍流条件影响的云滴粒径显著波动，导致云滴间碰撞概率增强以及较大粒径的云滴增大了挥发速率，该结果填补了传统云滴观测方法在动态高时间分辨率上的空白，为理解云微物理过程提供了新视角。本工作不仅提升了大气湍流研究的实验精度，拟为改进数值天气预报和气候模型提供了数据支撑，具有较为重要的科学和应用价值。

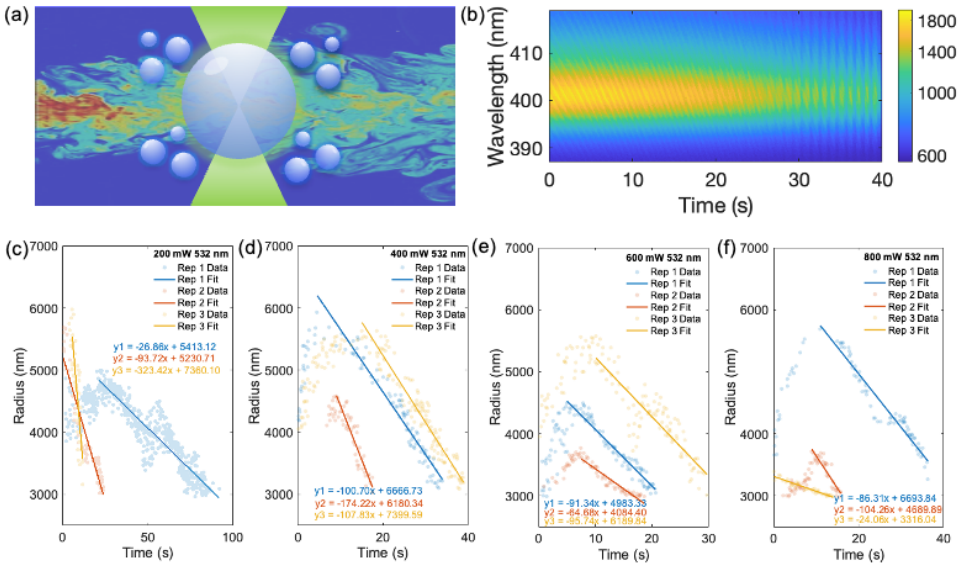


图1：(a)光镊在湍流状态下捕获云滴的示意图; (b)云滴在挥发过程中受激弹性散射特征峰位移的动态测量; (c-f) 532 nm激光通过调节光功率捕获不同粒径云滴所计算的挥发速率。

关键词：受激弹性散射光谱；光镊；云滴的动态测量

参考文献：

[1] Lv, G.; Tu, Y., Zhang, J.; and Chen, G. *PNAS*. **2024**, *121*, e2320844121.

[2] Guo, Y.; Zhao, X., Zhao, F.; Jiao, Z; Zhou, X; Yu, G. *Energy Environ. Sci*. **2020**, *13*, 2087-2095.

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

基于模板法制备的等离子体纳米孔道应用于纳米孔道光电化学检测

谢保康[1]，刘少创[1*]，应佚伦[12]，龙亿涛[1*]

1. 南京大学化学化工学院，分子传感与成像中心，南京，210023；

2. 南京大学化学和生物医药创新研究院，南京，210023

shaochuangliu@nju.edu.cn，yitaolong@nju.edu.cn

纳米孔道电化学-拉曼光谱联用技术因其能够提供待测物的电化学信息和分子指纹信息而备受关注。在纳米孔道中采集拉曼信号的关键在于构建具有高局域表面等离子体共振效应（LSPR）的等离子体纳米孔道。然而，快速、稳定地制备高LSPR活性的等离子体纳米孔道仍然是纳米孔道电化学-拉曼光谱联用进一步发展的主要阻碍。在本文中，我们提出了一种模板法制备等离子体纳米孔道的策略。以多孔贵金属材料——金纳米笼（Au NC）为拉曼增强的模板，采用高速离心法将金纳米笼精准锚定在石英纳米孔道的孔口，实现高性能等离子体纳米孔道的快速高效制备。金纳米笼的多孔结构同时具备拉曼增强热点和待测分子通道的功能，从而实现λ-DNA纳米孔道电化学信息与拉曼光谱信息的同步检测。这种方法为等离子体纳米孔道的构建提供了新的思路，将促进纳米孔道电化学-拉曼光谱联用技术的进一步发展。

关键词：等离子体纳米孔道；纳米孔道电化学；表面增强拉曼光谱；光电联用

制备 SERS 微球探针用于肿瘤细胞球微环境的动态监测

安春妍[1]，孙竟航[1]，王嘉嘉[1]，李子树[1]，张裕英[1,*]

[1] 南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*Email: yuyingzhang@nankai.edu.cn

在肿瘤生长及恶化的过程中，常伴随着微环境内pH降低、乏氧、活性氧（Reactive oxygen species, ROS）水平增加等特点。监测肿瘤微环境（Tumor microenvironment, TME）内pH、乏氧状态、ROS水平的动态变化是预测肿瘤进展和判断药物治疗效果的可行方法。现有的TME检测手段，如电化学、化学发光、免疫荧光染色等方法，测量过程繁琐耗时，且难以对TME进行原位实时监测。表面增强拉曼散射（Surface-enhanced Raman spectroscopy，SERS）是一种获取分子指纹信息的快速分析技术，能够原位、实时、无损地揭示痕量水平的成分变化。目前，SERS已较多地应用于二维培养细胞微环境或代谢物的监测。本研究以更接近体内真实肿瘤特性的三维培养乳腺癌细胞球为模型，针对TME弱酸性、乏氧、H_2O_2过表达的特性，制备了三种响应型SERS微球探针（Agarose-MBA、 Agarose-NTP、 Agarose-MPBA）。该探针能够稳定存在于细胞球的细胞外微环境中，利用SERS成像能够动态监测肿瘤细胞球生长过程及药物处理后TME的变化情况（图1）。通过对TME时空分布信息的解析，有望为揭示肿瘤进展机制、评估临床治疗效果提供新思路。

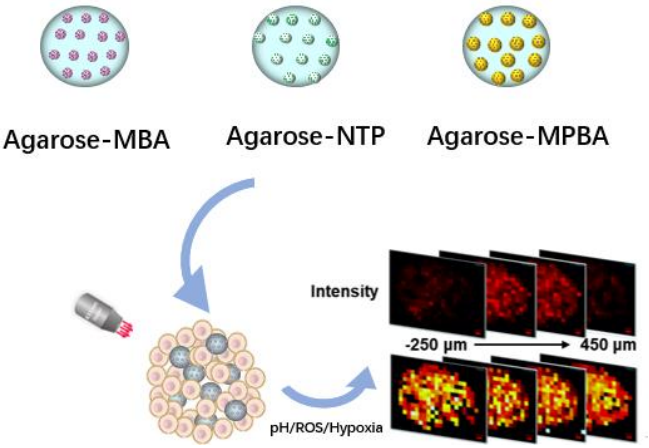


图1：三维肿瘤细胞球微环境内pH/ROS/Hypoxia状态的SERS动态监测示意图

关键词：表面增强拉曼光谱；肿瘤微环境；弱酸性；乏氧；活性氧

参考文献：

[1] Z. Zhang, C. An, J. Dong, et al. Small. 2025, e06809.
[2] Liyun Zhong, Wendai Cheng, et al. Talanta. 2020, 214, 120863.
[3] Fan-Gang Tseng, Koyel Dey, et al. Sensors and Actuators B: Chemical. 2024, 404, 135243.

几种细胞膜包覆仿生纳米粒子对乳腺癌靶向能力的 SERS 多元定量分析

张旭宇，董建国，安春妍，张裕英*

[1] 南开大学医学院，天津，300071

*Email: yuyingzhang@nankai.edu.cn

提高药物对肿瘤的靶向效率是增强疗效、降低毒副作用的关键。纳米载体被动靶向效率较低，主动靶向修饰易受血液蛋白冠阻碍；而细胞膜仿生纳米粒子可减少单核巨噬系统吞噬，提升靶向效率。表面增强拉曼散射（SERS）技术因谱峰窄、灵敏度高，为评估多组分仿生纳米粒子提供理想平台。在本研究中，我们构建了SERS编码的不同细胞膜包覆仿生纳米粒子：二氧化硅（SiO_2，对照组），SiO_2表面分别包覆乳腺癌细胞膜（4T1）、巨噬细胞膜（Raw 264.7）、红细胞膜（RBC），以及掺杂适配体AS1411的红细胞膜（RBC+AS1411）。将5种纳米粒子以等剂量混合后分别与肿瘤细胞、巨噬细胞共培养或通过尾静脉注射入荷瘤小鼠体内。对体外培养细胞和小鼠肿瘤组织切片进行SERS多元定量分析的数据显示：4T1细胞对5种纳米粒子的摄取能力排序为：4T1＞RBC+AS1411＞SiO_2＞Raw≈RBC，Raw 264.7对粒子的摄取能力排序为 4T1＞SiO_2＞Raw＞RBC≈RBC+AS1411；在小鼠乳腺癌实体瘤中，5种纳米粒子的积聚量排序为：4T1＞RBC+AS1411＞SiO_2＞Raw≈RBC。体内外结果表明，4T1细胞膜包覆纳米粒子被肿瘤摄入量最高，红细胞膜包覆纳米粒子被肿瘤摄入量最低。本研究建立的这种 SERS编码多元定量分析体系能够在同一细胞或组织中直接对比不同纳米载体的靶向能力差异，为构建高效靶向纳米药物提供准确的评价体系和指导。

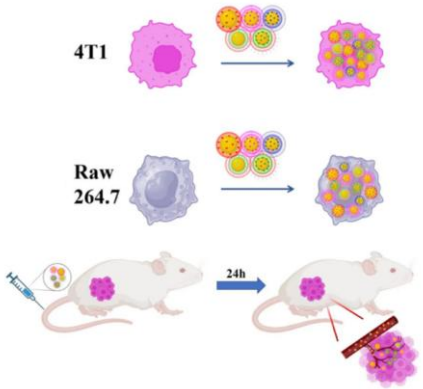


图 1：不同细胞膜包覆 SERS 编码纳米粒子靶向肿瘤细胞和组织 SERS 检测示意图

关键词：表面增强拉曼光谱；仿生纳米粒子；多元检测；肿瘤靶向

参考文献：

[1]Liu C, Dong J, An C, Wang D, Mi X, Yue S, et al. Anal Chem 2025;97:15586-96.

[2]LI Q, HUO H, WU Y, et al. [J]. Adv Sci (Weinh), 2023, 10(8): e2202051.

嵌合发夹集成的 CRISPR/Cas12a 系统用于无背景滚环扩增及其 SERS 生物检测

郭贤明[1]，张月皎[1*]，林嘉盛[1*]，李剑锋[1,2*]

[1] 厦门大学化学化工学院，思明区思明南路 422 号，361005
[2] 嘉庚创新实验室，翔安区翔安南路 5666 号，361102

*Email:li@xmu.edu.cn

滚动环扩增技术（RCA）由于其等温简单性而使核酸检测发生了革命性的变化。然而，二十多年来由于脱靶扩增和与双链DNA （dsDNA）不相容，阻碍了其临床应用。本工作利用双链DNA靶向CRISPR/Cas12a特异性地切割DNA/RNA嵌合发夹前引物，从而释放ssRNA启动RCA （SCOPE-RCA），用于非洲猪瘟病毒（ASFV）的核酸鉴定。利用CRISPR/Cas12a反式切割能力，SCOPE-RCA系统在20分钟内实现99%的ssDNA切割，从而在很大程度上抑制非特异性放大。最后，用催化发夹组件（CHA）级联耦合表面增强拉曼散射（SERS）信号放大后，SCOPE-RCA系统可以在低至59拷贝/mL的模拟感染样本中检测到ASFV。它的易用性和超灵敏的检测能力，在核酸研究和临床应用中具有重要的潜力

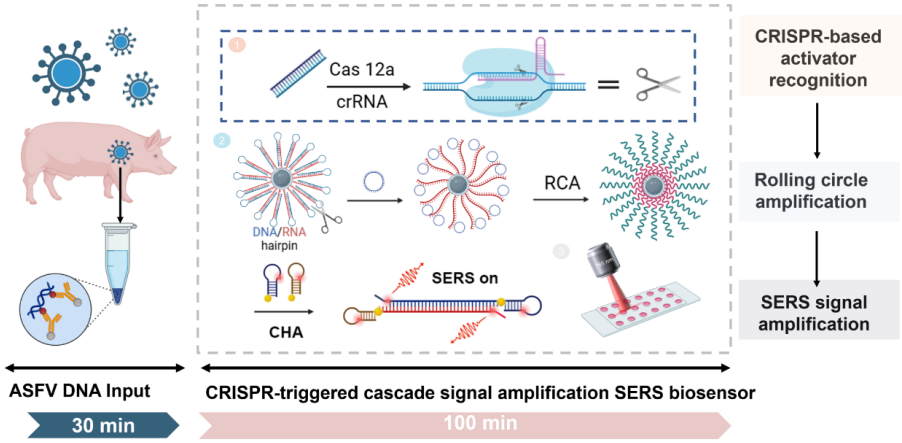


图1：SCOPE-RCA策略原理示意图。

关键词： ASFV， CRISPR，滚圈扩增，SERS

参考文献：

[1] Broughton, J. P.; Deng, X.; Granados, A.; Sotomayor-Gonzalez, A. CRISPR-Cas12-based Detection of SARS-CoV-2. Nat. Biotech. 2020, 38, 870-874.

[2] Hu, M.; Liu, R.; Jiang, Y.; Zhou, X. Light-Start CRISPR-Cas12a Reaction with Caged crRNA Enables Rapid and Sensitive Nucleic Acid Detection. Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202300663.

混合噪声环境下基于自监督学习的拉曼去噪算法及其在单个纳米药物表征中的应用

万谋群[1]，陈建锋[1]，陈笑笑[1]，刘润泽[1]，施喜龙[1]，戴一川[1,2*]

[1] 南昌大学先进制造学院，江西省南昌市红谷滩区学府大道 999 号，330031
[2] 中国科学技术大学精密机械与仪器系，安徽省合肥市黄山路 443 号，230027

*Email: daiyc@ncu.edu.cn

拉曼显微技术凭借其光稳定性和多组分检测等优势，在生物医药表征领域前景广阔。但由于纳米药物载体等样品的拉曼信号极其微弱而导致其应用受限。即便采用SERS技术，当目标分子在“热点”区域分布不足（如囊泡内室成分检测）时问题依然突出，因此亟需开发先进的去噪算法。相比于依赖“干净-噪声”配对数据的监督式学习去噪算法，自监督学习算法如Noise2Void[1]、Neighbor2Neighbor[2]等仅利用含噪训练数据实现了拉曼光谱中多种随机噪声去噪。然而除高斯随机噪声外，纳米光谱中还包含非独立性噪声（如闪烁噪声）等多源噪声，当前自监督去噪算法还难以对混合噪声进行有效去噪。本研究通过向含噪光谱注入特异性噪声构建含噪数据训练对，提出基于噪声对合成的拉曼去噪算法(NS-RSDA)。模拟与实验验证表明，NS-RSDA可同步抑制独立高斯噪声与非独立闪烁噪声，这是传统N2N方法所不具备的。实验表明本算法将单个纳米药物的光谱SNR由4.7±2.2dB提升至12.3±1.8dB，显著优于N2N、N2V等先进算法。最后，本算法应用于包载疏水性紫杉醇与亲水性盐酸阿霉素纳米药物的个体尺度载药量快速分析。去噪辅助的载药量分析较原始光谱偏差降低了71.8%，载药量分析结果符合核载/膜载纳米载体模型的理论预期。综上，本算法不仅实现了高斯-闪烁混合噪声的去噪难题，未来还可利用仪器噪声特异性实现算法对设备兼容性，拓展至外泌体、及SERS基底集成检测等应用场景。

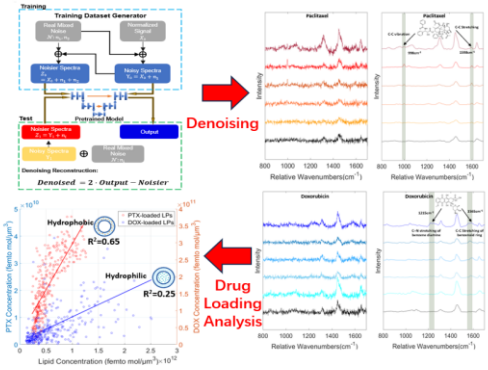


图1：NS-RSDA算法的去噪流程以及用于包裹紫杉醇和盐酸阿霉素单个纳米脂质体光谱去噪和载药量分析。

关键词：纳米载药脂质体；无监督拉曼光谱去噪；Noise2Noise；Noisier2Noise

参考文献：

[1] A. Krull, T. Buchholz and F. Jug. **2019, IEEE CVPR,** 2124-2132.
[2] T. Huang, S. Li, X. Jia, H. Lu and J. Liu. **2021, IEEE CVPR**, 14776-14785.

高信背比拉曼多色成像的肝癌组织病理学诊断研究

徐文静[1]，朱伟[1]，沈爱国[1*]

[1]武汉纺织大学，湖北省武汉市江夏区阳光大道 1 号，430200

*Email: agshen@whu.edu.com

肝癌因其早期症状隐匿、恶性程度高且预后不良，在临床上确诊时通常已处于晚期，因此被医学界称为“沉默的杀手”[1]。为了提高患者的生存率，精确诊断肝癌、探究其病因并评估疾病的恶化程度，对于临床医生制定个性化治疗方案至关重要。尽管组织病理学检查仍然是肝癌诊断的金标准，但常规的组织病理学步骤繁琐且耗时，且单一的诊断结果往往依赖病理医生的主观判断，容易导致误诊或漏诊。为应对这一挑战，本文提出三键标签实现高信背比拉曼多色成像用于肝癌组织病理学诊断方案。其拉曼谱带位于1800-2800 cm^{-1}的生物静默区，且谱带较窄（<2 nm），赋予三键类拉曼信号分子高灵敏度和高光谱分辨率[2, 3]。通过一系列含有乙烯基和三键特征基团的单体，采用自由基聚合策略，成功制备出兼具高强度、高稳定性和优异拉曼活性的聚合物。进一步地，对这些三键聚合物进行活化和靶向功能化修饰后，能够同时检测与乙肝病毒诱导肝癌相关的五种新生病因蛋白，以及肝癌发展过程中微环境中的多种蛋白。具体而言，这五种肝癌相关蛋白包括：甲胎蛋白（AFP）、谷氨酰胺合成酶（GS）、磷脂酰肌醇蛋白聚糖3（GPC3）、肝脏易感性病毒蛋白（HBX）以及高度糖基化的I型跨膜糖蛋白（CD34）。这些蛋白与原发性肝癌的病毒感染情况、恶性程度及转移进展密切相关。通过同步检测这些关键蛋白，可以有效实现肝癌病因的鉴别诊断，并评估其恶性程度和进展。本研究创新性地实现了对肝癌病因及其恶化程度的关键蛋白进行“一步标记、多重显色”的检测，相较于传统免疫组化检测，具有显著的精度和效率优势，且实验结果完全符合临床检测需求。

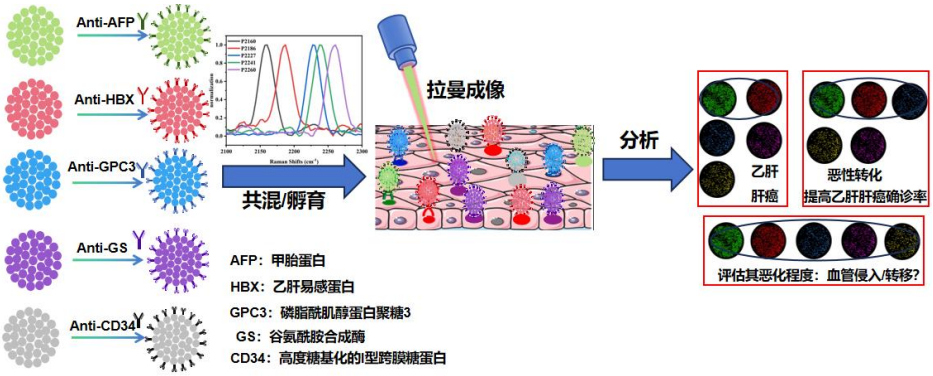


图1：高信背比拉曼探针用于肝癌组织病理学诊断的示意图。

关键词：三键；高信背比；多色成像；肝癌

参考文献：

[1] Sung, H.; Ferlay, J.; Siegel, R.; Laversanne, M. *CA. Cancer J. Clin.* **2021**, *71*, 209-249.

[2] Zhu, W.; Cai, E.; Li, H.; Wang, P. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 21846-21852.

[3] Zhu, W.; Tang, Y.; Hu, S.; Xu, W. *ACS Materials Lett.* **2025**, *7*, 2343−2351.

拉曼光谱结合 OvRNet-迁移学习实现病原菌鉴定从实验室到临床的转化

徐菲[1,2]，朱龙吉[1,*]，罗思恒[3,*]，崔丽[1,*]

[1] 中国科学院城市环境研究所，福建省流域生态重点实验室，福建省 厦门，361021
[2] 中国科学院大学，北京，100049
[3] 福建师范大学海峡柔性电子 (未来科技)学院 (研究院)，福建省 福州，350117

*Email: lcui@iue.ac.cn

细菌感染仍然是全球健康的一项重大挑战。快速准确地鉴定临床样本（如血液、尿液和脓液）中的病原菌，对于感染控制具有重要意义。拉曼光谱技术结合机器学习为实现无需培养的病原体鉴定提供了新途径，然而传统算法存在两个主要局限性：（1）无法有效识别预定义数据库之外的未知病原菌；（2）在从实验室标准菌株迁移至真实临床样本时，因细菌生长环境差异引起的光谱变化，以及临床有标签数据的稀缺性，共同导致模型识别性能显著下降。

针对上述问题，本研究提出了一种OvRNet-TL (One-vs-Rest Network-Transfer Learning)识别框架。首先，我们构建了一个包含8种常见医院感染病原菌（如大肠杆菌、金黄色葡萄球菌和肺炎克雷伯菌等）的拉曼光谱数据库，共涵盖99个临床患者分离株。比较分析显示，传统多分类CNN模型对已知物种的识别准确率达92%，但对未知物种的识别准确率仅为4%。通过引入二分类OvRNet模型，我们在未知物种上实现了98%的识别准确率，同时对已知病原菌仍保持优异性能（准确率95%，优于CNN）。

为克服实验室与临床场景间的差异，我们进一步引入迁移学习策略，对志愿者加标尿液样本中的病原菌进行识别。经迁移学习调优后，加标尿液样本（含大肠杆菌和铜绿假单胞菌）的识别准确率从初始约50%显著提升至80%–96%。进一步在多种类型临床样本（如尿液、胸骨拭子、胸腹水及心脏外周组织）中进行的验证表明，该模型表现出稳健的性能（准确率76%–98%），即使对于数据库未知菌种及新感染部位（如胸腹水中的金黄色葡萄球菌、心脏外周组织中的白色念珠菌）同样具有良好识别能力。

此外，基于临床样本的直接迁移学习仅使用5%的标记数据即可达到90%以上的识别准确率，有效缓解了临床有标签数据稀缺性的限制。整体识别流程可在30分钟内完成。本研究提出的OvRNet与迁移学习融合模型突破了当前临床病原菌检测中的两大瓶颈：（1）通过OvRNet实现未知病原体的可靠识别；（2）通过迁移学习适配临床样本的光谱变化。该研究推动了拉曼诊断技术向真实临床病原菌识别场景的迈进，为感染控制提供了一种快速（＜30分钟）、准确的病原菌鉴定解决方案。

关键词： 拉曼；迁移学习；临床病原体鉴定；ESKAPE病原体；机器学习

Imaging Metabolic Flow of Water in Plants with Isotope-Traced Stimulated Raman Scattering Microscopy

毕思敏
复旦大学

Water plays a vital role in the life cycle of plants, participating in various critical biochemical reactions during both non-photosynthetic and photosynthetic processes. Direct visualization of the metabolic activities of water in plants with high spatiotemporal resolution is essential to reveal the functional utilization of water. Here, we applied stimulated Raman scattering (SRS) microscopy to monitor the metabolic processes of deuterated water (D2O) in model plant Arabidopsis thaliana (A. thaliana). Our work shows that in plants uptaking D2O/ water solution, proton-transfer from water to organic metabolites results in the formation of C-D bonds in newly synthesized biomolecules (lipid, protein, and polysaccharides, etc.) that allow high-resolution detection with SRS. Reversible metabolic pathways of oil-starch conversion between seed germination and seed development processes are verified. Spatial heterogeneity of metabolic activities along the vertical axis of plants (root, stem and tip meristem), as well as the radial distributions of secondary growth on the horizontal cross-sections are quantified. Furthermore, metabolic flow of protons from plants to animals is visualized in aphids feeding on A. thaliana. Collectively, SRS microscopy has potential to trace a broad range of matter flows in plants, such as carbon storage and nutrition metabolism.

基于多循环连接促进的指数重组酶聚合酶扩增方法同时监测癌症生物标志物 Fpg 和 FEN1

郭方玉[1]，赵宁宁[2]，张春阳[1,*]

[1] 山东师范大学化学化工与材料科学学院，山东济南，250200
[2] 山东师范大学化学化工与材料科学学院，山东济南，250200

*Email: zhangcy@seu.edu.cn

8-氧代鸟嘌呤DNA糖基酶（Fpg）[1]与Flap 核酸内切酶 1（FEN1）[2,3] 维持基因组稳定性的关键修复酶，其活性异常与多种疾病及癌症密切相关。本方法提出了一种基于多重循环连接介导的指数级重组酶聚合酶扩增（RPA）[4]反应，用于同步、灵敏检测Fpg与FEN1活性。该方法采用含8-oxoG和5′ flap结构的特异性底物探针，经酶切连接形成双链DNA模板，进行RPA扩增，生成带Cy3/Cy5荧光标记及生物素的产物。通过链霉亲和素磁珠捕获与热解离检测荧光信号。该方法特异性高，可区分UDG、hAAG等酶；灵敏度显著，对Fpg和FEN1的检测限分别达1.12×10^{-10} U/μL和1.66×10^{-9} U/μL，适用于酶动力学分析、抑制剂筛选及临床样本检测，并具备拓展用于其他DNA修复蛋白的潜力。

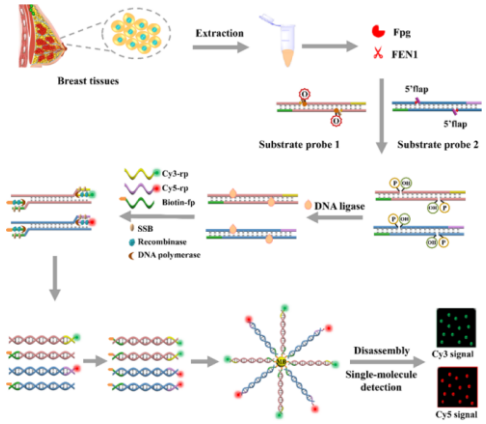


图1：多重循环连接促进的指数RPA方法用于灵敏同时检测癌症生物标志物Fpg和FEN1的示意图

关键词：单分子检测；荧光光谱； 荧光成像

参考文献：

[1] Lee, A. J.; Wallace, S. S. *Free Radic. Biol. Med.* **2017**, 107, 170−178.
[2] Tsutakawa, S. E.; Classen, S.; Chapados, B. R.; Arvai, A. S.; Finger, L. D.; Guenther, G.; Tomlinson, C. G.; Thompson, P.; Sarker, A. H.; Shen, B.; Cooper, P. K.; Grasby, J. A.; Tainer, J. A. *Cell*, **2011**, 145, 198−211.
[3] Balakrishnan, L.; Bambara, R. A. *Annu. Rev. Biochem.* **2013**, 82, 119−138.
[4] Zhao, N. N.; Li, F. Z.; Zhang, X.; Liu, M.; Cao, H.; Zhang, C. Y. *Anal. Chem.* **2023**, 95, 8728−8734.

微球透镜组局域增强高空间分辨拉曼光谱技术

罗昊[1]，金子建[1]，王晓朵[1]，张开锋[1,*]，于海波[1]

[1]机器人与智能系统全国重点实验室，沈阳自动化研究所，中国科学院，沈阳 110016

*Email: kaifeng.zhang.xg@sia.cn

拉曼光谱分析在化学、生物医学、材料及环境科学等领域有广泛应用，已经成为一种不可或缺的分析手段[1-2]。然而，由于拉曼散射原理的制约，拉曼信号微弱，并且受光学衍射极限制约，常规激光共聚焦拉曼光谱的空间分辨率通常为500 nm[3]。针对这些问题开发的表面增强拉曼光谱和针尖增强拉曼光谱，解决了信号增强和空间分辨率的需求，并且极大的推动了高分辨拉曼领域的发展[4]。本研究提出了一种基于微球透镜组技术的高通量原位无损检测分析方法(图1(a))，能够显著增强拉曼信号和空间分辨率，保持原有系统扫描速度的基础上，信号强度提升了5.1倍，空间分辨率提高了2倍(图1(b)-(c)))。此外能够在同一条件，检测到在常规拉曼光谱成像中检测不到的WSe_2的二阶散射峰E_2g^1(175 cm^{-1})、A_{1g}(277 cm^{-1})、LA(M)(360 cm^{-1})(图1(d))。微球透镜组对拉曼图谱空间分辨率的提高使得拉曼光谱分析技术能够获得纳米级高空间分辨率；同时，提高了信噪比，使原本的弱峰更容易被检测。这些进步，为拉曼光谱技术的应用发展提供了新的路径和手段。

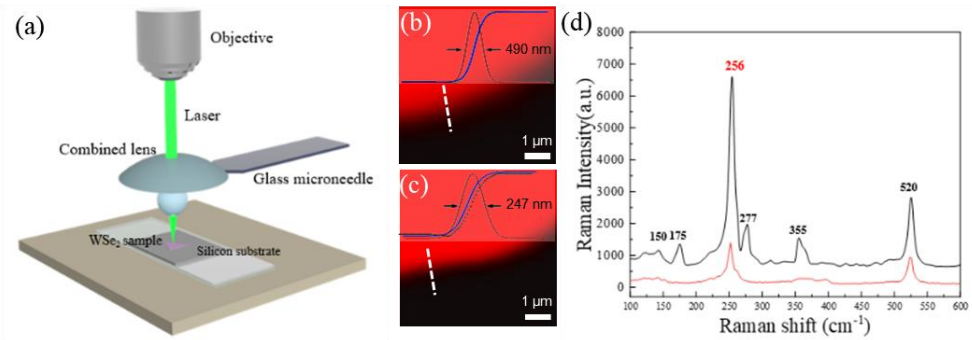


图1：(a)微球透镜组成像示意图。常规(b)和微球透镜组辅助(c)的分辨率表征。(d) WSe_2的激光共聚焦拉曼光谱（红色）和透镜组辅助共聚焦拉曼（黑色）。

关键词： 微球超透镜；共聚焦拉曼；光谱显微成像；超分辨率

参考文献：

[1] Cialla-May D, Krafft C, Rosch P, et al. Raman spectroscopy and imaging in bioanalytic[J]. Analytical chemistry, **2021**, 94(1): 86-119.

[2] Huang Y, Zhang Y, Huo F, et al. A new strategy: distinguishable multi-substance detection, multiple pathway tracing based on a new site constructed by the reaction process and its tumor targeting[J]. Journal of the American Chemical Society, **2020**, 142(43): 18706-18714.

[3] Zheludev N I, Yuan G. Optical super oscillation technologies beyond the diffraction limit[J]. Nature Reviews Physics, **2022**, 4(1): 16-32.

[4] Bao Y, Zhu M, Zhao X, Chen H, Wang X, and Ren B, Nanoscale chemical characterization of materials and interfaces by tip-enhanced Raman spectroscopy[J]. Chemical Society Reviews, **2024**, 53(20):10044–10079

Atomically Precise Semiconductor Design for Surface-Enhanced Raman Scattering

曾琛[1]，刘名旺[2,*]，沈爱国[2,*]

[1] 武汉纺织大学纺织新材料与先进加工全国重点实验室，中国武汉，430200
[2] 武汉纺织大学生物工程与健康学院，中国武汉，430200

*Email: 2512958935@qq.com

Surface-enhanced Raman scattering (SERS) traditionally relies on plasmonic metal nanostructures to achieve high sensitivity, but recent advances in semiconductor-based SERS substrates offer new opportunities for cost-effective and tunable platforms. Building on our established expertise in atomic-scale semiconductor band structure engineering, we propose to develop a new generation of SERS substrates through precise atomic-level material design. This future research will systematically investigate atomic-scale modifications in semiconductor-based SERS systems. Specifically, we will examine how controlled doping, defect engineering, and interfacial structure control can synergistically enhance both charge-transfer and local field effects. Specifically, our research will focus on three key objectives: (1) developing novel atomic-precision fabrication techniques to engineer semiconductor substrates with precisely tuned band alignment for optimal molecule-substrate charge transfer; (2) creating atomic-scale "hot spots" by strategically introducing dopants and vacancies to amplify local electromagnetic fields; and (3) constructing precisely controlled semiconductor heterostructures with atomically defined interfaces to achieve synergistic enhancement effects. This comprehensive approach will enable unprecedented control over both chemical and electromagnetic enhancement mechanisms in semiconductor-based SERS systems.

关键词： SERS；Heterojunction Interface Engineering；Atomic-Level Doping

参考文献：

[1] Liu M.W., Hu L.Y.,* Zhu C.Z.,* et al., *Sci. China Chem*. **2023**, 66, 1228-1236
[2] Liu M.W., Zhu C.Z.,* et al., *Natl. Sci. Rev*. **2025**, 12, nwae465
[3] Liu M.W., Hu L.Y.,* Zhu C.Z.,* et al., *Nano Lett*. **2023**, 23, 5358-5366
[4] Liu M.W., Hu L.Y.,* Zhu C.Z.,* et al., *Angew. Chem*. Int. Ed. **2024**, 63, e202407481

由喹喔啉衍生物和三苯胺基团组成的 D-π-A 结构的共轭分子的光物理性能的研究

Jingdan Chen[1], Jiping Sui[2], Jiawang Liu[2], Bing Zhao[1,*], Yinghui Wang[1,*]

[1] 吉林大学，吉林省长春市高新技术开发区前进大街 2699 号，130012

*Email: 710792314@qq.com

Abstract：In this thesis, characterized several organic materials using steady-state and transient spectroscopic techniques, investigating the photophysical properties of quinoxaline derivatives. To enhance charge transfer capability, the D-π-A molecular architecture is commonly employed, which improves the electronic properties of conjugated molecules with electron donors and acceptors.We examined two D-π-A structured organic molecular materials: (E)-N,N- dimethyl-4-(2-(3-methylquinoxalin-2-yl)vinyl)aniline and (E)-10-ethyl-3-(2-(3- methylquinoxalin- 2- yl) vinyl)-10H-phenothiazine, studying their photophysical characteristics in various systems. Through steady-state absorption and emission measurements, we identified the presence of charge transfer states in QDMA1 and QPT, along with solute-solvent interaction characteristics. Pump - probe experiments with global fitting analysis revealed that the charge transfer in QDMA1 remains stable in low-polarity solvents but varies with solvent polarity changes. These findings demonstrate that donor-acceptor organic optoelectronic materials with high charge transfer capacity can be developed as novel high-performance materials.

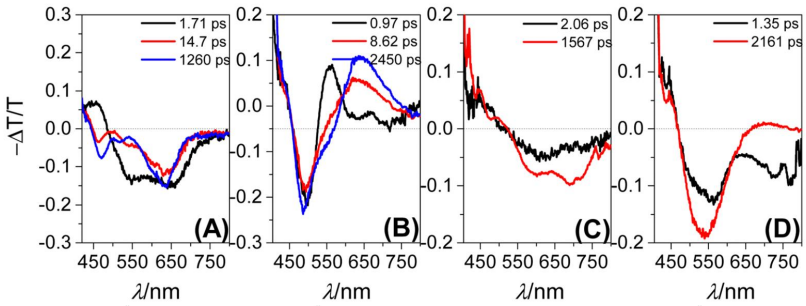


Fig. 1 Global fitting results of QDMA1 in TOL , DMF and QPT under the same pump fluence in TOL and DMF.

Key words: ultrafast spectroscopy, charge transfer, solvent effect, photoluminescence mechanism

参考文献：

[1] Zhao, J.; Sun, J.; Simalou, O.; Wang, H.; Peng, J.; Zhai, L.; Xue, P.; Lu, R., Multi - Stimuli-Responsive Fluorescent Aminostyrylquinoxalines: Synthesis, Solvatochromism, Mechanofluorochromism and Acidochromism [J]. Dyes and Pigments, 2018, 151: 296-302.

[2] D. Di Carlo Rasi and R. A. J. Janssen, Advances in solution processed multijunction organic solar cells, Adv. Mater.,2019, 31, e1806499.

氢氧根离子促进 Au@CdS 表面电子富集绿色高效合成亚胺

张琦，谢微*

南开大学，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*2120221083@mail.nankai. edu. cn

醇实现胺的N-烷基化是有效生产亚胺的前景途径，但在化学合成技术中仍然是一个挑战。在这项研究中，我们通过调控Au@CdS催化剂外壳厚度去评估物理化学性质如何影响它们在这些反应中的性能。其中中等外壳厚度的Au@CdS-2（23nm左右）其在光照下具有最小阻抗和最大电流密度，实现了最高的转化率和选择性（>99%和97.095%）。稳态和瞬态光致发光光谱的定量分析表明，除了光催化剂结构对载流子动力学的影响外，碱性水溶液可以有效地消耗光生空穴以产生活性物种OH·，确保光生电子在表面的富集。进而推动硝基苯的N-烷基化向高电子要求的产物席夫碱方向发展。此外，发现OH-和OH·的存在加速了苯甲醇的氧化过程，从而最大限度地提高了苯甲醛浓度，确保快速捕获苯胺形成关键中间体N-亚苄基苯胺N-氧化物。我们的发现说明了催化剂和溶剂之间的合理设计在协同调控载流子的动力学行为控制产物选择性方面具有重要的意义。

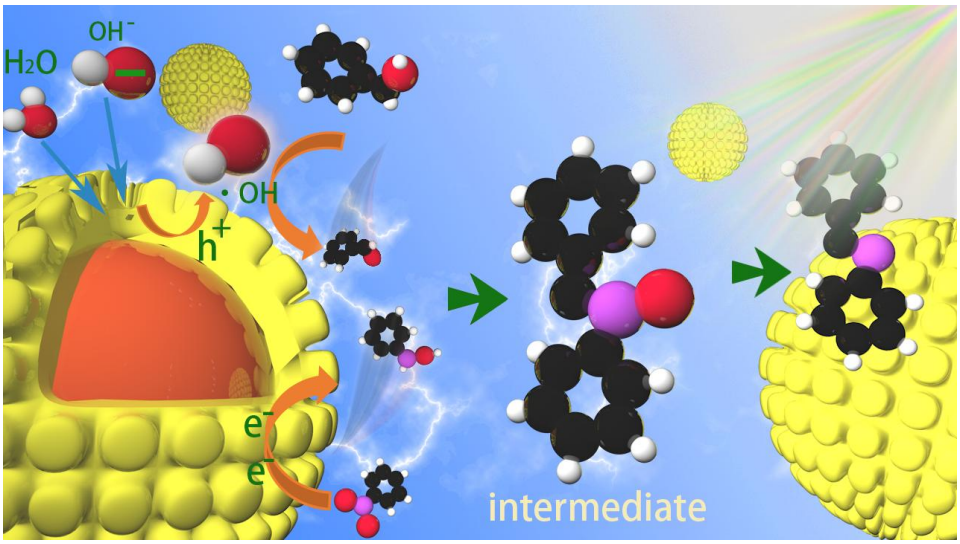


图1：Au@CdS在碱性水溶液中可见光催化硝基苯与苯甲醇偶联选择性生成亚胺示意图

关键词：可见光催化；碱性水溶液；等离激元金属/半导体异质结；载流子动力学调控

参考文献：

[1] zhang, Q.; Wang, J.; Ye, X.; Hui, Z. *ACS Appl Mater Interfaces*. **2019,** *11(50),* 46735-46745.
[2] Yuan, Z.; Han, B.; Liu, B.; Sun, J. *Nat Commun.* **2025**, *16 (1),* 2963.

Ni_3S_2-$Ni(OH)_2$ 异质结构的动态表面重构驱动高效稳定的氨氧化反应

薛玉洁[1]，毛越[1]，耿昊飞[2]，赵洋[3]，杨玲[1]，谢微[1,*]

[1]南开大学化学学院，天津 300071；
[2]厦门大学化学化工学院，厦门，361005；
[3]秦皇岛市疾病预防控制中心，河北秦皇岛，066000；

*Email: 2120231205@mail.nankai.edu.cn

本研究设计了具有Ni_3S_2-$Ni(OH)_2$异质结构的纳米片用于电催化氨氧化反应。原位拉曼光谱显示，异质界面处的电荷转移可诱导其发生多步表面重构过程（Ni_3S_2-$Ni(OH)_2$→β-NiOOH→γ-NiOOH）；相较于$Ni(OH)_2$直接生成γ-NiOOH，该分步反应降低了活性物种γ-NiOOH的生成能垒，促使其大量产生，从而赋予催化剂优异的氨氧化反应催化活性。

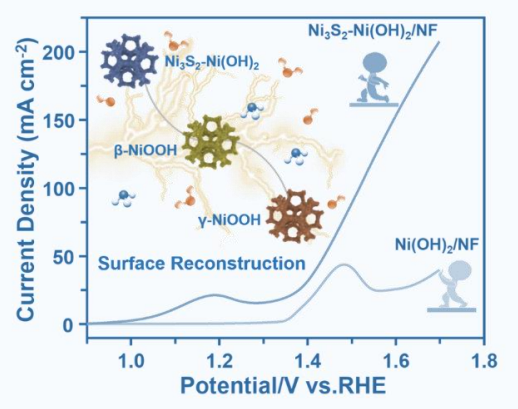


图1： Ni_3S_2-$Ni(OH)_2$异质结构催化剂用于电催化氨氧化反应

关键词： Ni_3S_2-NiOOH；原位拉曼光谱；表面重构；氨氧化反应

参考文献：

[1] Zhang, N.; Feng, X.; Rao, D.; Deng, X.; Cai, L.; Qiu, B.; Long, R.; Xiong, Y.; Lu, Y.; Chai, Y. *Nat. commun.* **2020**, *11*, 4066.

[2] Cai, M.; Zhu, Q.; Wang, X.; Shao, Z.; Yao, L.; Zeng, H.; Wu, X.; Chen, J.; Huang, K.; Feng, S. *Adv. Mater.* **2023,** *35*, 2209338.

[3] Bai, Y.; Wu, Y.; Zhou, X.; Ye, Y.; Nie, K.; Wang, J.; Xie, M.; Zhang, Z.; Liu, Z.; Cheng, T. *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 6094

低共熔溶剂中氧还原反应研究

李晓东#1，刘帅#1，郑安妮 1，吴杰督 1，范宇腾 1，吴德印 1，田景华 *1,2，颜佳伟*1

[1] 表界面化学全国重点实验室，厦门大学化学化工学院，中国厦门，361005
[2] 嘉庚创新实验室，厦门大学化学化工学院，中国厦门，361005
作者具有同等贡献

*Email: jwyan@xmu.edu.cn jhtian@xmu.edu.cn

氧还原反应是燃料电池、金属－空气电池、过氧化氢合成及气体传感等体系的关键反应，但其缓慢动力学与较大过电位阻碍了其更广泛的应用。除催化剂设计外，电极－电解液界面环境亦会影响氧还原反应的活性与选择性。传统的水系电解液受制于电化学窗口窄和副反应较多，对界面的调控能力有限，而超浓电解液凭借宽电化学窗口与高稳定性而为学者所关注。其中，离子液体在促进氧还原反应方面表现出优异性能，但高成本与毒性问题限制了其应用；与离子液体相似的低共熔溶剂则兼具低成本、绿色环保、易合成及优良电化学性质，展现出更大应用潜力。

本工作中，我们系统比较了离子液体与低共熔溶剂中的氧还原行为。我们发现，低共熔溶剂中的氧还原电位更为提前，具有更低的热力学能垒；但其电荷转移速率却仅为离子液体中的1/20，表明氧还原反应在低共熔溶剂中的动力学受限。红外光谱与理论计算表明，氧气分子的引入会重构低共熔溶剂的氢键网络，降低氧-氧键键能，活化氧分子。原位拉曼光谱进一步证实，氧饱和低共熔溶剂中的氢键态羟基随电位负移而显著增强，从而促进氧分子整体活化。

关键词： 氧还原；超浓电解液；电催化

参考文献：

[1] Luo, F.; Roy, A.; Silvioli, L.; Cullen, D. A. *Nature Materials*,**2020**, 19, 1215.
[2] Smith, E. L.; Abbott, A. P.; Ryder, K. S. *Chemical Reviews* **2014**, 114, 11060.
[3] Yang, L.; Zhang, Y.; Huang, Y.; Deng, L.; Luo, Q. *ChemSusChem* **2023**, 16 (16).
[4] Wang, T.; Zhang, Y.; Huang, B.; Cai, B. *Nature Catalysis* **2021,** 4, 753-762.

电子电镀铜中整平剂碱性红 2 的作用机制及其与 Cl^-协同效应的原位 STM 研究

郑安妮[1]，詹东平[1]，杨防祖[1]，毛秉伟[1]，颜佳伟[1,*]

[1] 表界面化学全国重点实验室，厦门大学化学化工学院，中国厦门，361005

*Email: jwyan@xmu.edu.cn

碱性红2具有良好的整平性能，在电子电镀铜中表现为一种高效的电镀添加剂。而碱性红2（SAF^+）表现出的整平作用及其与Cl^-之间的协同效应尚未在分子尺度上得到充分理解。本研究旨在从分子层面揭示在电镀铜中，碱性红分子的作用机制及其与氯离子的相互作用机制并将其可视化。通过采用具有高空间、原子级分辨率的扫描隧道显微术（STM）以及电化学表面增强拉曼光谱（EC-SERS）研究Cl^-和SAF^+之间的微观相互作用机制[1, 2]。循环伏安实验结果表明，SAF^+会发生两段还原过程，即SAF^+会优先还原为$SAF^{+\cdot}$再还原为SAF^0[1]。STM实验结果表明，在-200 mV时，仅当Cl^-和SAF^+分子共同作用时，表面呈现高覆盖度、致密排列的双条纹结构，原子间距为2.2 nm，表明分子以平躺的方式吸附在Au(111)电极表面。这是在Cl^-或SAF^+分子单独存在时所观察不到的，表明两者之间存在强烈的协同相互作用。随着电位负移，第一个还原过程表现为形成间距为0.37 nm、竖直排列的$SAF^{+\cdot}$分子有序吸附层，第二个还原过程表现为无序、致密的颗粒状吸附层（SAF^0）。拉曼光谱实验数据表明，有序结构向无序结构的相转变与Cl^-的脱附有关。形成的致密吸附层可能是抑制Cu^{2+}向电极表面转移，从而抑制其还原，形成致密平整铜镀层的主要原因。本文从微观层面揭示了碱性红分子的作用机制及其与氯离子的相互作用机制，为开发高效的电镀添加剂体系提供了理论依据和实验支持。

关键词： 碱性红2；协同相互作用；分子层面；可视化研究

参考文献：

[1] Hai, N.T.M.; Huynha, T.M.T.; Fluegel A.; Mayer, D. *Electrochimica Acta.* 2011, 56(21), 7361-7370.

[2] Guo,L.F.; Li, S.P.; He, Z.B.; Fu, Y. M. *Acs Omega.* 2024, 9(19), 20637-20647.

N–Co–S 单原子电子桥构建 Z 型异质结实现氨分解高效光催化产氢

赵宁[1]，谢微[1,*]

[1] 南开大学化学学院，天津市南开区卫津路 94 号，300071

*wei.xie@nankai.edu.cn

氨分解制氢因原料丰富、储存便捷且碳排放极低，被视为一种极具前景的可持续能源转化途径。然而，传统氨分解通常依赖于钌基贵金属催化剂，并需在超过400 °C的高温下进行，不仅成本高昂，还限制了其工业化应用。为此，开发能够在温和条件下实现高效氨分解、且具有成本优势的新型催化剂，已成为当前研究的重点。

在本研究中，我们提出了一种新型的Z型光催化剂—Co-CdS QDs/NH_2-MIL-53(Al)（Co-CdS QDs/MIL），并在其中引入了N–Co–S单原子电子桥（Co-SAEB）。通过精确调控光生载流子的分离与迁移路径，我们实现了光催化氨分解性能的显著提升。该催化剂展现出高达18 μmol g^{-1} s^{-1}的产氢速率，远超目前已报道的光催化体系。值得注意的是，这一性能接近于在类似反应条件下光热驱动氨分解的产氢速率。

综合表征与理论分计算结果表明，Co-SAEB结构在Z型机制中起着关键作用，能够实现定向电子转移并显著抑制载流子复合，从而显著增强催化剂的氧化还原活性与光催化稳定性。本研究不仅加深了对Z型电子转移机制的理解，也为设计兼具高效能、优异稳定性和广泛适用性的光催化剂提供了新思路。

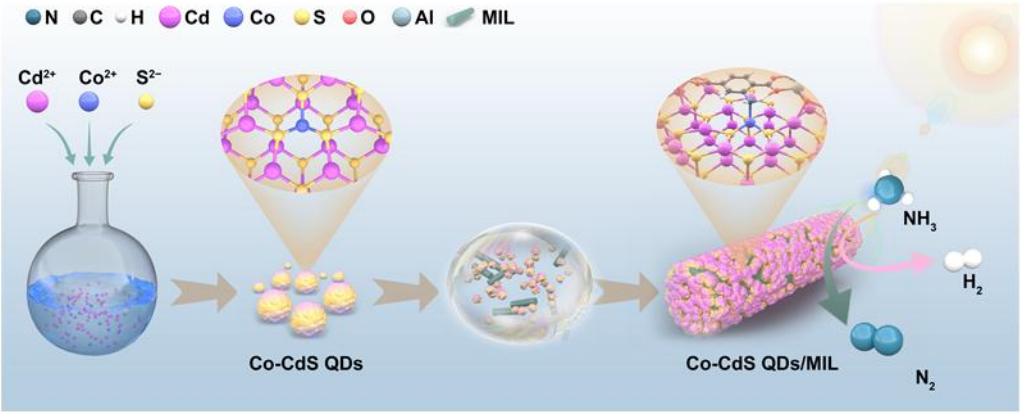


图1：Co-CdS QDs/MIL光催化剂制备过程示意图

关键词：光催化；氨分解；

参考文献：

[1] Chen, C.; Wu, K.; Ren, H.; Zhou, C.; Luo, Y.; Lin, L.; Au, C.; Jiang, L. *Energy Fuels* **2021**, 35 (15), 11693–11706.

[2] Terlouw, T.; Rosa, L.; Bauer, C.; McKenna, R. *Nat. Commun.* **2024**, 15 (1), 7043.

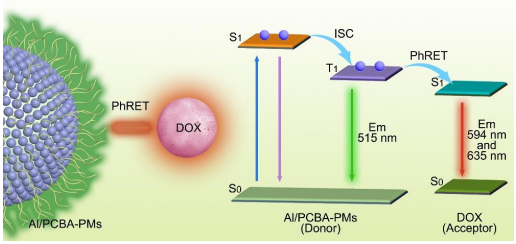
A water-stable phosphorescent probe for doxorubicin detection by phosphorescence resonance energy transfer

吴大军，梁丽雅，高雅婷，李大伟*，陈斌斌*

华东理工大学化学与分子工程学院物质生物学与动态化学前沿科学中心，上海市先进材料重点实验室，上海市徐汇区梅陇路 130 号，200237

*Email: daweili@ecust.edu.cn (D.W. Li), binbinchen@ecust.edu.cn (B.B. Chen)

Phosphorescent sensing probes have attracted considerable attention due to their ability to eliminate auto fluorescence interference in biological samples. However, constructing water-stable phosphorescent materials remains a significant challenge because of water-quenched phosphorescence (phos.) property. Herein, a facile one-step thermal polymerization is proposed to synthesize aluminium/4-chlorobenzoicacid phosphorescent materials (Al/PCBA-PMs). The obtained Al/PCBA-PMs have two phos. emissions at 438 nm and 515 nm, respectively, with a lifetime of 83.67 ms. Importantly, the Al/PCBA-PMs show good water-stable phosphorescent property, and the introduction of water can cause a change in phosphorescent color of Al/PCBA PMs from blue to green, but which has only a small impact on phosphorescent intensity and lifetime. Furthermore, a system of phos. resonance energy transfer (PhRET) can be constructed where Al/PCBA-PMs act as phosphorescent donors and doxorubicin (DOX) serves as fluorescent acceptors. This PhRET system has a high efficiency of 44.25 %, which can achieve the direct and precise determination of DOX in biological samples with strong auto fluorescence, with a linear range of 0 100 μM. This work proposes a powerful strategy for constructing water- stable phosphorescent probes and develops a new type of PhRET system to achieve precise phosphorescent detection in biological samples.



Scheme 1. Schematic illustration of the PhRET system between Al/PCBA-PMs (phosphorescent donors) and DOX (fluorescent acceptors).

Keywords: Water-stable phosphorescent probes; metal-organic coordination; phosphorescence resonance energy transfer; doxorubicin detection

参考文献：

[1] L.Y. Liang, B.B. Chen, Y.T. Gao, J. Lv, M.L. Liu, D.W. Li, Aqueous solution enhanced room temperature phosphorescence through coordination-induced structural rigidity, Adv. Mater. 36 (2024) 2308180.

[2] L.Y. Liang, Y.T. Gao, S. Chang, J. Lv, L. Wang, M.L. Liu, D.J. Wu, M.J. Ye, B.B. Chen, D.W. Li, Coordination-induced structural rigidity for achieving ultralong-lived aqueous room temperature phosphorescence, Adv. Optical Mater. 12 (2024) 2401642.

单颗粒碰撞过程的拉曼散射光谱测量

王浩炜，刘少创，龙亿涛*

南京大学化学化工学院，江苏 南京，210023

*Email: yitaolong@nju.edu.cn

等离子体纳米颗粒因其尺寸小、易功能化修饰、良好的生物相容性及低毒性等特性，在生物传感与催化分析等领域获得广泛应用[1]。尽管现有合成方法已能够实现对纳米颗粒整体形貌、表面配体、尺寸及材料组成的有效调控，但在单颗粒水平上，纳米材料之间仍存在不可避免的异质性。因此，开展单颗粒水平的测量对深入理解材料性质、优化合成策略具有重要意义。

单颗粒碰撞电化学方法借助电化学限域条件下的超微/纳米电极，实时、原位监测单个纳米颗粒在电子隧穿区域内发生的电化学反应，从而揭示非均相体系中单个颗粒的尺寸分布[2]、催化活性[3]及电子能带结构[4]等统计行为。然而，该方法仍难以实现对纳米颗粒表面配体分布及碰撞过程中电化学界面反应物种变化的直接监测。

针对该挑战，本研究开发了一种光学-电化学联用的单颗粒碰撞测量系统。当贵金属纳米颗粒与等离子共振基底发生碰撞时，可形成纳米间隙结构，产生具有显著电磁场增强效应的“热点”，从而大幅增强碰撞过程中界面分子的拉曼信号。通过分析该“热点”区域内拉曼信号的强度与峰位变化，可解析纳米颗粒表面配体的分布状态及其在电化学碰撞过程中发生的界面化学反应动态信息。

关键词： 单颗粒碰撞；拉曼；光电联用

参考文献：

[1] Jing, C.; Gu, Z.; Ying, Y.-L.; Li, D.-W.; Zhang, L.; Long, Y.-T. *Anal. Chem.* **2012**, *84*, 4284–4291.

[2] Ma, H; Chen, J.-F.; Wang, H.-F.; Hu, P.-J.; Ma, W.; Long, Y.-T. *Nat. Commun.* **2020**, *11*, 2307.

[3] Lu, S.-M.; Chen, M.; Wen, H.; Wang, H.-W.; Yu, Z.; Long, Y.-T. *Chin. J. Catal.* **2022**, *43*, 2815–2819.

[4] Hesari, M.; Ma, H.; Ding, Z. *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 14540-14545.

基于自监督网络的多仪器拉曼光谱对齐方法

方世言[1]，陈舟[1]，林俐[1]，叶坚[1,2*]

[1] 上海交通大学生物医学工程学院，上海，200030

[2] 上海交通大学医学院附属仁济医院妇科肿瘤上海重点实验室，上海，200127

*Email: yejian78@sjtu.edu.cn

拉曼光谱具有高特异性、非破坏性和实时检测等优势，在肿瘤诊断等临床场景中得到广泛应用。然而，不同型号不同用途的仪器在相同实验条件下测得的拉曼光谱在峰位、半峰宽和谱峰相对强度等方面出现系统偏差，严重阻碍了多中心数据共享、标准化数据库构建和联合建模。现有化学计量学数据对齐方法依赖标准光谱、参数优化困难且效果不佳。深度学习在医学图像对齐领域已被广泛应用，但针对拉曼光谱数据对齐的研究仍极为有限，且这些研究受制于配对数据训练假设，无法覆盖肿瘤异质性带来的真实数据分布。针对上述挑战，本文提出了一种自监督学习网络，用于多仪器光谱数据双向转换。该网络采用U-Net架构，引入Wassertein距离约束，可实现非配对数据的训练。利用仿真光谱和两台仪器采集的同一样品光谱，验证了该网络在峰位校正和半峰宽/峰强保持等方面表现优异，目标光谱与对齐后光谱的峰位差小于2cm^{-1}，谱峰相对强度保持一致，光谱余弦相似度超过90%。随后，收集多家医院各自采集的食管和乳腺肿瘤光谱数据进行验证。结果显示，目标光谱与对齐后光谱的相似度超过85%，其聚类重叠度高，Silhouette得分约为0.1，表明目标光谱与对齐后光谱呈现良好的同分布特性。结合肿瘤诊断模型，目标光谱与对齐后光谱的诊断准确率与灵敏度之差小于1.5%，进一步验证了光谱同分布特性以及对齐有效性。与其他方法相比，该网络具有优越的对齐性能。本研究实现了多仪器拉曼光谱的高质量双向对齐，为多中心生物医学研究中的标准化应用提供了重要技术支撑。

关键词： 拉曼光谱；数据对齐；自监督学习；肿瘤诊断

参考文献：

[1] Wang, T.; Yang, Y.; Lu, H. et al. Functional regression for SERS spectrum transformation across diverse instruments. *Analyst*. **2025**, *150*, 460.

[2] Wang, Z.; Yang, Z.; Song, X. et al. Raman spectrum model transfer method based on Cycle-GAN. *Spectrochim. Acta A*. **2024**, *304*, 123416.

[3] Liu, Z.; Chen, L.; Cheng, H. et al. Virtual formalin-fixed and paraffin-embedded staining of fresh brain tissue via stimulated Raman CycleGAN model. *Sci. Adv*. **2024**, *10*, eadn3426.

过氧化氢对二氧化硫气溶胶液相氧化的共聚焦拉曼研究

刘畅[1]，刘湃[1,*]

[1] 北京理工大学化学与化工学院物理化学研究所，北京 100081

*Email: pliu@bit.edu.cn

在大气云雾滴的液相环境中，过氧化氢(H_2O_2)是驱动二氧化硫(SO_2)从S(IV)氧化为硫酸盐(S(VI))的关键氧化剂，是大气中硫酸盐生成的重要机制[1]。然而，由于H_2O_2与SO_2的反应非常迅速，导致二者在真实的云雾环境中难以稳定共存[2]，这为直接、实时地研究该反应过程带来了巨大挑战。该氧化过程的机理主要包括以下步骤 ：

$$HSO_3^- + H_2O_2 \rightleftharpoons SO_2OOH^- + H_2O \quad (1.1)$$

$$SO_2OOH^- + H^+ \rightarrow H_2SO_4 \quad (1.2)$$

为攻克这一观测难题，本研究采用共聚焦拉曼光谱技术，实现了对以H_2O_2为种子液滴与SO_2气体多相反应的原位、实时观测。实验在80-90%的相对湿度下进行，通过实时追踪不同尺寸液滴中反应物（H_2O_2）与产物（硫酸盐）的拉曼特征峰强度变化，对反应动力学过程进行了定量分析。这项工作从分子层面揭示了微液滴环境中硫酸盐的快速生成机制，为理解大气硫酸盐的形成提供了直接光谱证据，其发现对完善大气化学模型、准确预测雾霾形成具有重要科学意义。

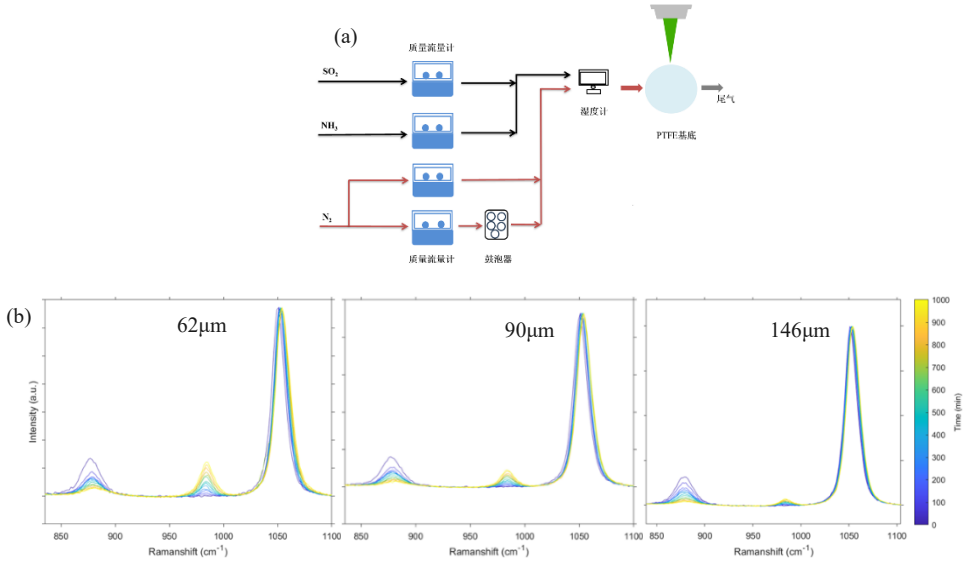


图1： (a)气路示意图：(b)88.6%RH，23.4℃，H_2O_2氧化S(IV)过程中，不同尺寸液滴的拉曼光谱

关键词： 共聚焦拉曼光谱；微液滴；SO_2液相氧化

参考文献：

[1] Liu, T.; Clegg, SL.; Abbatt, JP. **2020**. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 117, 1354-1359.

[2] Zhang, R.; Wang, G.; Guo, S. Chem Rev, **2015**, 115, 3803-3855.

Cu_2O 电催化二氧化碳还原过程的动态表面重构成像

赵芹芹[1]，张清兰[1]，黄腾翔[1,*]，方宁[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院，厦门，361005

*Email: qqzhao@stu.xmu.edu.cn

干涉散射显微镜（iSCAT）是利用反射项和散射项的共程干涉来实现对纳米粒子的灵敏检测。由于iSCAT信号受介电常数的影响，能够以高时空分辨率对纳米粒子进行无标记灵敏成像。很多研究表明，氧化亚铜（Cu_2O）电催化二氧化碳还原过程中Cu^+到Cu^0的动态表面重构过程和Cu的配位度影响C_2产物的生成量。在这里，我们利用iSCAT原位成像Cu_2O电催化二氧化碳还原过程的动态表面重构，分析三种配位结构的Cu_2O重构路径和重构动力学，同时我们利用原位拉曼辅助表征证明Cu_2O表面重构过程是Cu^+到Cu^0还原过程。受配位数的影响，不同配位结构的Cu_2O呈现不同的表面重构路径。Cu_2O八面体（*o*-Cu_2O）遵循从角-边-面心的表面重构路径，Cu_2O四面体（*c*-Cu_2O）遵循从边-面心的重构路径。Cu_2O截面体（*t*-Cu_2O）由于具备晶面（111）和（100）晶面导致功函数下降，电子转移增多，表面重构时间处于*c*-Cu_2O和*o*-Cu_2O之间。明晰在电催化二氧化碳还原过程中不同配位结构的Cu_2O的动态表面重构路径和动力学，有望指导电催化二氧化碳还原反应的催化剂设计。

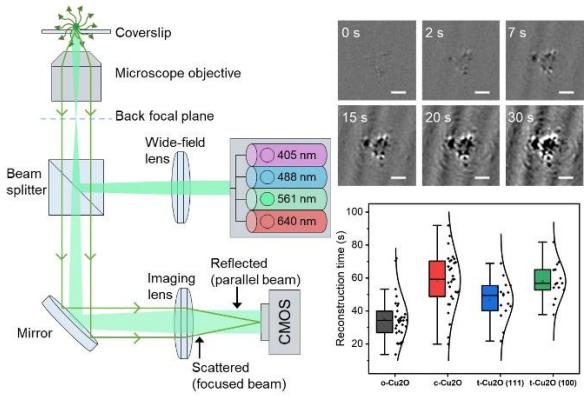


图1：Cu_2O电催化二氧化碳还原过程的动态表面重构成像图

关键词：干涉散射显微镜；二氧化碳还原；氧化亚铜；动态表面重构

参考文献：

[1] Yang, Y.; Louisia, S.; Yu, S.; *Nature* **2023**, *614*, 262-269.

[2] Zhang, Y.; Chen, Y.; Wang, X.; *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 5172.

[3] Zhang, C.; Gu, Y.; Qu, J.; *Nano-Micro Lett.* **2025**, *17*, 66.

从教学走向高端应用：模块化、一体化电化学拉曼光谱系统的研制与验证

裴昕迪[1,2]，黄声超[2,3]，刘川[1,2,3]，周鹤[2,3]，任斌[1,2*]

[1] 厦门大学化学化工学院，福建省厦门市思明区思明南路 422 号，361005
[2] 嘉庚创新实验室，福建省厦门市翔安区翔安南路 4221 号，361100
[3] 鹭翔嘉仪（厦门）科技有限公司，福建省厦门市湖里区安岭二路 106 号创业大厦 A 栋 3 楼嘉庚创新实验室科创产业湖里加速器，361000

*Email: bren@xmu.edu.cn

光谱教学与原位表征之间长期缺少一条可迁移的路径：课堂教学侧重演示原理和常规检测，难以支撑复杂化学环境下的原位表征；原位研究则需要光谱与电信号在同一时间轴上连续对应，却常因设备分散、记录方式不同而难以对齐。为打通这条路径，我们研制了一体化、模块化的电化学拉曼光谱系统：以教学型多功能拉曼为基础，在熟悉的操作范式下建立“看谱分析”的基本认知；通过与自研恒电位仪在同一界面联用，实现光谱与电位程序的同步操作与记录；进一步集成为一体式电化学拉曼（EC-Raman），在通信与时序统一的前提下开展时间连续采集。

以耐尔蓝为示范，在教学型多功能拉曼的 SERS/EC-SERS 演示基础上，我们实现了循环伏安与拉曼的连续同步采集，清晰观察到特征谱带随电位的快速且可重复变化。该系统提供了一条切实可行的教学模式与操作流程：同一界面、同一数据时间轴与可扩展的模块化单元，使“从教学走向原位联用”成为可落地、可复核的实践路径，并为后续扩展与复杂体系研究奠定基础。进一步，该系统可作为电化学暂态过程的一体式电化学拉曼显微镜的实现形态，用于关键过程的连续追踪与判读。

关键词：拉曼光谱；电化学拉曼；教学科研一体化

参考文献：

[1] Yoo, R. M. S.; Yesudoss, D.; Johnson, D.; Djire, A. *ACS Catal.* **2023**, *13*, 10570–10601.
[2] Lyu, D.; Xu, J.; Wang, Z. *Front. Chem.* **2023**, *11*, 1231886.
[3] Moldovan, R.; Vereshchagina, E.; Milenko, K. B.; Iacob, B.-C.; Bodoki, A. E.; Falamas, A.; Tosa, N.; Muntean, C. M.; Farcău, C.; Bodoki, E. *Anal. Chim. Acta* **2022**, *1209*, 339250.
[4] Zong, C.; Chen, C.-J.; Zhang, M.; Wu, D.-Y.; Ren, B. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 11768–11774.
[5] Wilson, A. J.; Molina, N. Y.; Willets, K. A. *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 21091–21098.

巯基乙酸在 Cu(111)表面的吸附结构和拉曼光谱理论研究

陈来科[1]，吴德印[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院，福建 厦门，361005

*Email: dywu@xmu.edu.cn

铜具有良好的导电性和导热性，广泛地应用在日常生活和工业生产中。但由于其本身性质较为活泼，容易在空气中发生氧化，会限制铜的实际应用。为此，人们发展了很多方法阻止或减缓铜的氧化和腐蚀，这包括使用石墨烯涂覆在铜表面，或使用铜合金，但这些都在一定程度上会损坏铜本身性质的发挥。相比于上述方法，目前有机分子可以在铜表面产生钝化层，阻止其发生氧化，这些分子包括苯并三唑、含氮类的杂环分子和含巯基有机分子等。最近有研究报道，一端含羧基的烷基硫醇分子处理金属铜后形成自组装层结构，能使其能产生更好的抗氧化保护效果，但具体的微观作用结构和形成机理仍不够清晰。

在本工作中，我们利用密度泛函理论计算了巯基乙酸(TGA)分子在铜表面的吸附结构和相关的拉曼谱图。TGA是一个既具有巯基，又具有羧基的小分子，我们对TGA在铜表面的不同吸附构型分别进行优化，获得了五种相对更加稳定的结构；然后对相关结构的拉曼光谱进行理论计算，并对相关振动基频进行了简正坐标分析和拉曼谱峰归属（图1）。计算结果表明，TGA分子以巯基和羧基双端吸附在铜表面的结构最稳定，并通过与实验报道拉曼谱峰进行了对比分析。这一理论研究，有助于人们对铜的抗氧化性能有更深入认识。

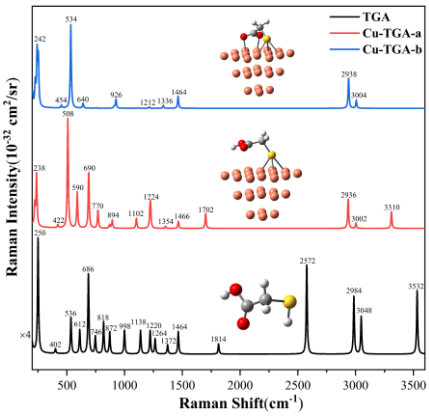


图1：TGA及其在铜上吸附的拉曼谱图

关键词：拉曼谱图；TGA；吸附结构；密度泛函理论

参考文献：

[1] Chen, L. K.; Xiao, Y. H.; Lin, J. D.; Sajid, Z.; Zhou, J. Z.; Wu, D. Y.; Tian, Z. Q., *ChemPhysChem* **2024,** *25*, e202400330.

高性能自监督降噪算法 Fast2Peak 助力拉曼实时成像

张楠楠[1,2]，罗思恒[1]，马昊[1,2*]，刘国坤[3*]，任斌[1,2*]

[1] 厦门大学化学化工学院，福建省厦门市思明区思明南路 422 号，361005
[2] 嘉庚创新实验室，福建省厦门市翔安区翔安南路 4221 号，361100
[3] 厦门大学环境与生态学院，福建省厦门市翔安区翔安南路 4221 号，361102

*Email: oaham@xmu.edu.cn, guokunliu@xmu.edu.cn, bren@xmu.edu.cn

拉曼光谱是物质分析的关键工具，但在高时空分辨的原位/活体等前沿应用中，微弱信号常被噪声淹没。深度学习算法已经广泛用于拉曼降噪算法当中，并展现了优于传统算法的性能。然而，现有深度学习降噪算法普遍面临着信号保真度、计算效率和模型通用性之间的“三难”困境：即监督学习方法通用性差，自监督学习方法效率低下或牺牲保真度。为突破此瓶颈，我们提出了一种名为 Fast2Peak（F2P）的新型自监督学习降噪算法。F2P 创新地采用掩码自监督学习策略，结合强大的 Transformer 架构，能够从无标签数据中学习光谱的内在结构。更重要的是，与以往需要为每张光谱单独训练的自监督方法不同，F2P 作为一个预训练模型，能够对新的目标光谱进行快速推理，从而根本性地解决了效率与保真度的权衡问题。

我们在模拟光谱、真实实验光谱数据上进行了系统性评估。结果表明，F2P 在保真度、效率和通用性方面均超越了当前代表性的降噪算法。基于 F2P 的高性能表现，我们将其集成至自搭建仪器中，实现了拉曼实时降噪成像，展示了其在原位/实时生命体系表征任务中的强大潜力。F2P 为极端噪声场景下拉曼光谱信号的提取提供了一个强大、通用且高效的解决方案，现已可在 https://ramancloud.xmu.edu.cn 上在线使用。

关键词： 降噪；自监督学习；拉曼光谱；实时成像

参考文献：

[1] Kallepitis, C.; Bergholt, M.-S.; Mazo, M.-M.; Leonardo, V.; Skaalure, S.-C.; Maynard, S.-A.; Stevens, M.-M. *Nat. Commun.* **2017**, *8 (1)*, 14843.

[2] Fang, S.; Wu, S.; Chen, Z.; He, C.; Lin, L.; Ye, J. *TrAC Trends Anal. Chem.* **2024**, *172*, 117578.

[3] He, H.; Cao, M.; Gao, Y.; Zheng, P.; Yan, S.; Zhong, J.-H.; Wang, L.; Jin, D.; Ren, B. *Nat. Commun.* **2024**, *15 (1)*, 754.

[4] Luo, S.-H.; Pan, S.-Q.; Chen, G.-Y.; Xie, Y.; Ren, B.; Liu, G.-K.; Tian, Z.-Q. *Anal. Chem.* **2024**, *96 (10)*, 4086–4092.

北票惠宁寺壁画制作材料与工艺的多技术科学分析

张子谦[1]，王云峰[2*]
1 北京联合大学应用文理学院，北京 100191;
2 中国文化遗产研究院，北京 100029

惠宁寺是辽宁省现存规模最大、保存最完整的藏传佛教寺院，位于辽宁省北票市东南 15 公里的下府村，始建于乾隆三年（1738 年），2002 年因原址修建白石水库，后移 1000 米整体迁建到现址。现存建筑 16 座共 170 余间，共有壁画 26 幅分别位于大雄宝殿、藏经阁及关公殿三处。近年来，受搬迁扰动、自然环境侵扰、制作材料老化等多重因素影响，壁画本体发生了起甲、褪色、酥碱，空鼓，粉化，霉变，脱落等多类型且不同程度的病害，严重威胁其历史信息的完整性，亟需通过科学手段开展修复和保护。



本文工作采用显微拉曼光谱、傅里叶变换红外光谱、X 射线衍射、偏光显微镜和扫描电镜能谱分析技术及数字化勘察手段，对惠宁寺壁画的颜料、地仗层、支撑体等进行了综合分析，结果表明：壁画使用颜料大多属于古代彩绘中常用的无机矿物颜料，其中红色颜料包括铁红（Fe_2O_3）、朱砂（HgS）和铅丹（Pb_3O_4）；黄色颜料除了雌黄（As_2S_3）之外，还使用了少见的铬黄（$PbCrO_4$）；绿色颜料为石绿（$Cu_2(OH)_2CO_3$）；蓝色颜料为群青（$Na_3CaAl_3O_{12}S$）；白色颜料以铅白（$Pb_3(OH)_4CO_3$）为主，少量石膏（$CaSO_4$）；黑色颜料为碳黑（C）。在大雄宝殿壁画中，有两处使用了现代合成的颜料红 112（$C_{24}H_{16}C_{l3}N_3O_2$），在藏经阁和关公殿壁画中都发现有使用现代合成的颜料绿 8（$C_{30}H_{18}FeN_3NaO_6$），在藏经阁壁画中发现有使用铬黄与 C.I.碱性蓝 140（$C_{17}H_{21}N_3$）混合作为绿色使

用的，推测这些是在搬迁后修复重绘使用的。

使用偏光显微镜观察，结合扫描电镜能谱和红外光谱对壁画地仗层的分析表明，大雄宝殿一层走廊壁画地仗层为白灰层，主要成分为石灰（$CaCO_3$）；其余壁画地仗层有两层，大雄宝殿和关公殿壁画第一层为白灰细砂麻刀修补过渡地仗层，上面一层为原始含麻白灰地仗层。藏经阁壁画第一层为熟土麻刀泥修补过渡地仗层，上面一层为原始含麻细泥地仗层。原始地仗层厚约 3~13 mm，修补过渡地仗层厚约 10~15 mm。修复新增地仗层的主要成分为白云母（$KAl_2(AlSi_3O_{10})(F,OH)_2$）、钠长石（$Na_2O{\cdot}Al_2O_3{\cdot}6SiO_2$）和二氧化硅（$SiO_2$）等，原始地仗中掺入麻纤维以增强强度防止开裂。

可见，在壁画搬迁揭取分块时所造成的锯口和较大残缺处，修复时采用了细泥细砂掺适量棉花调制成泥的传统工艺进行底部填补；上面再用水胶和滑石粉找平，同时将画面小残缺也进行找平；补平材料干燥后，当时使用了现代合成有机颜料进行补线填色和做旧。通过这些无损或微损的分析，我们能够对壁画的材料和工艺进行全面表征。不仅丰富了壁画的历史资料，同时为后期壁画保护修复材料和工艺研究提供直观、科学的依据。

原位拉曼研究丙烯在钒基催化剂上的氧化反应机理

肖高飞[1]，卢侠[2,*]

[1] 中山大学分析测试中心，深圳，518107
[2] 中山大学材料学院，深圳，518107

*Email: luxia3@mail.sysu.edu.cn

焦炭、工业锅炉以及火力发电厂等燃煤过程是目前大气污染的重要来源染的主要行业。NO_x和SO_2污染作为煤烟型污染的主要污染物，已在现有空气污染控制系统中基本得到有效控制。然而，燃煤过程也排放大量VOCs，控制措施还相对匮乏。VOCs会导致光化学污染、雾霾等，也是臭氧和PM2.5的关键前驱体，对人类健康和生态环境造成严重危害。目前，控制VOCs的主流技术之一的催化氧化法被广泛应用。考虑到投资成本和场地空间，火力发电厂、焦炭和工业锅炉等对于技术升级空间有限而环保标准不断提高的行业，利用现有设备实现包括VOCs在内的多种污染物同时消除更具有成本效益。

NO_x和VOCs的同时去除取决于复杂烟气存在下具有优异活性和稳定性的催化剂的开发，对催化剂的研究和对VOCs基本氧化机理的了解是开发新型催化剂的关键。为了研究钒基催化剂上的催化氧化反应机理，分别在不同的条件下进行了原位拉曼研究。结果表明，催化剂在高温下吸附和活化丙烯后，拉曼振动强度随着时间的增加而逐渐减小，表明晶格氧的结合强度减弱，此时氧的溢流和晶格氧的迁移率在逐渐增加。同时，升温和加入氧气之后，提高了晶格氧的迁移和表面氧的活化速率，催化剂与丙烯的反应活性增加，系列振动峰强度降低到最低。晶格氧迁移后产生活性氧，并与丙烯发生催化氧化反应，反应后缺氧的环境气态氧得不到补充，催化剂处于还原态。氧气加入后快速补充，拉曼振动强度恢复,表面晶格氧的迁移处于动态平衡。

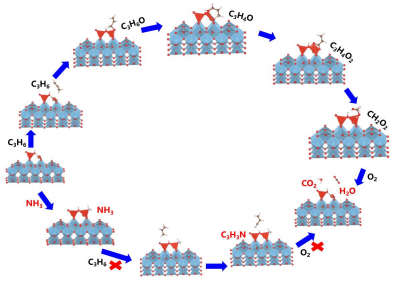


图1：丙烯氧化反应机理

关键词：反应机理；催化氧化；挥发性有机物（VOCs）

参考文献

[1] Environmental Science & Technology, 2023, 57(36), 13270-13291.
[2] Solid State Ionics, 2022, 375, 115852
[3] Applied Catalysis B: Environment and Energy, 2025, 366（5）, 125022。

金纳米结构电极上等离激元介导葡萄糖光电催化氧化反应

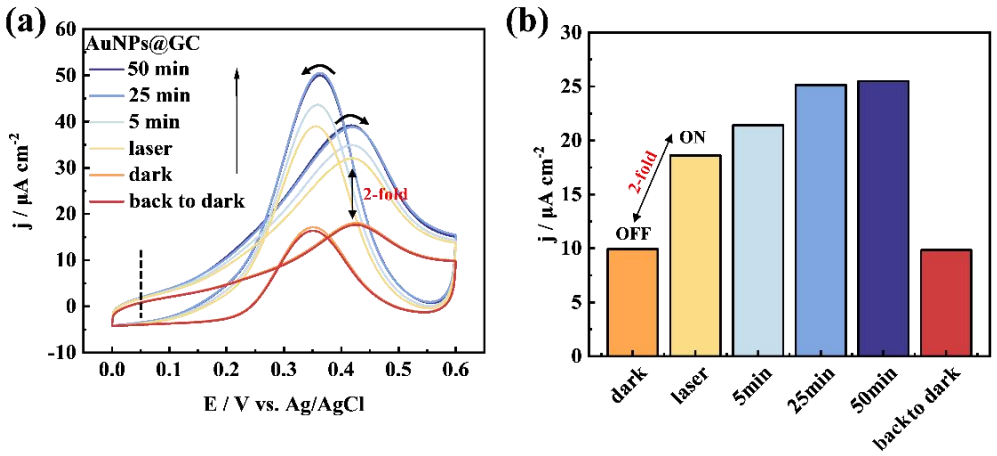
袁啸天[1]，吴泰锐[1]，王家正[2]，周剑章[1]，吴德印[1,*]

[1] 固体表面物理化学国家重点实验室，厦门大学化学化工学院化学系，厦门 36100

[2] 山东石油化工学院，东营 25706

*Email: dywu@xmu.edu.cn

近年来，葡萄糖分子在ⅠB族金属电极上的电氧化已经受到广泛地关注。基于等离激元介导光电催化反应（Plasmon-Mediated Photoelectrochemical Reactions）已经成为一种很有前景的电化学研究方法[1]。其中近场电磁场增强、激发态载流子以及热效应三种主要的作用形式均有助于光电化学反应速率增强[2]。为了理解三种不同作用机制对等离激元介导葡萄糖分子光催化反应的影响，亟需更好地发展在金纳米粒子膜结构电极上进行葡萄糖光电氧化的定量分析检测方法。本工作首先通过制备了具有等离激元共振效应的金纳米粒子膜金电极，然后系统地表征了在金纳米粒子膜电极上葡萄糖的电氧化反应和光电化学实验定性表征，探讨了等离激元介导下引起的光电催化响应。最后，结合数值模拟和机理分析，对等离激元介导葡萄糖光电氧化进行了定量实验测量及分析。



图a：葡萄糖光电催化氧化循环伏安图；**图b：** 葡萄糖光电催化氧化电流随时间变化图

关键词：等离激元光电催化；葡萄糖；AuNPs@GC；

参考文献：

[1] Zhan, C.; Chen, X.-J.; Huang, Y.-F.; Wu, D.-Y.; Tian, Z.-Q. Acc. Chem. Res. **2019**, 52 (10), 2784–2792.

[2] Devasenathipathy, R.; Rani, K. K.; Liu, J.; Wu, D.-Y.; Tian, Z.-Q. Electrochimica Acta **2021**, 367, 137485.

表面红外反射吸收谱研究 SURMOFs 界面生长机制

庄金亮[1,*]，张俊杰[1]，Andreas Terfort[2]

[1] 贵州师范大学，贵阳，550002

[2] Frankfurt University，Frankfurt，300350

*Email: jlzhuang@xmu.edu.cn

金属-有机框架（MOFs）是研究功能性晶体材料可控自组装的理想平台。然而，常规溶剂热难以原位研究金属离子（团簇）与有机配体配位组装。我们提出以表面自组装单分子层（SAMs）作为导向基团，利用液相外延分步生长技术（LPE），实现了MOFs薄膜（SURMOFs）界面可控自组装。以Cu_2桨轮型[M_2L_2P]为模型，利用表面红外反射吸收谱（IRRAS）单分子层灵敏度，系统研究生长温度、表面化学及混合配体酸度对SURMOFs晶体取向的调控机制。实验发现，Cu_2簇的取向缺陷会随外延层逐级放大形成孪晶，降低SURMOFs单一晶体取向有序度。将IRRAS峰位-强度与XRD、SEM关联，建立了SURMOF“首层有序度-温度-晶体取向”相图。该工作展示了IRRAS在揭示SURMOF界面成核、配体交换及缺陷演化机制中的独特优势，为可控制备高性能取向MOF薄膜提供了普适判据。

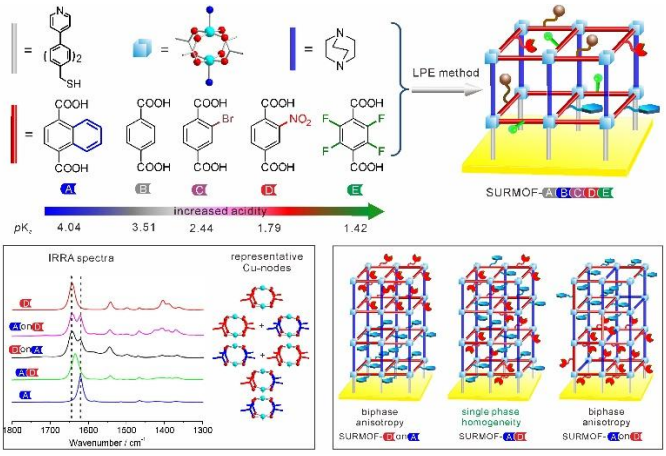


图1：IRRAS研究混合配体SURMOFs均相和异相自组装机制

关键词：金属-有机框架薄膜；IRRAS；自组装单分子层；取向自组装

参考文献：

[1] J. L. Zhuang, M. Kind, C. M. Grytz, F. Farr, M. Diefenbach, S. Tussupbayev, M. C. Holthausen, A. Terfort, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 8237-8243.

[2] X. J. Yu, Y. M. Xian, C. Wang, H. L. Mao, M. Kind, T. Abu-Husein, Z. Chen, S. B. Zhu, B. Ren, A. Terfort, J. L. Zhuang, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 18984-18993.

[3] Chong, Y.-L.; Zhao, D.-D.; Yan, M.; Zhou, X.-Y.; Zhang, J.-J.; Wang, B.; Chen, Z.; Zhuang, J.-L., *J. Catal.* **2024**, 431, 115395.

Deep learning enhanced label-free cervical screening via stimulated Raman cytology

Yingjie He[1#], Mingming Zhao[2#], Hao Zhang[3], Chao Wang[2*], Minbiao Ji[1*]

[1]State Key Laboratory of Surface Physics and Department of Physics, Fudan University, Shanghai, 200433, China.

[2]Department of Gynecology, Obstetrics and Gynecology Hospital, Fudan University, China.

[3]Department of Pathology, Obstetrics and Gynecology Hospital, Fudan University, China.

*Email: 22110190017@m.fudan.edu.cn

Cervical cancer screening remains pivotal for early detection and effective disease management, yet conventional cytopathological methods relying on stained cell-smear analysis face critical limitations in diagnostic throughput and sensitivity. We present a stain-free Visual-Aided Diagnosis via Stimulated Raman Cytology (VAD-SRC) platform that enables rapid cervical cell screening through simultaneous chemical and morphological profiling. By capturing intrinsic biomolecular contrast via stimulated Raman scattering (SRS) microscopy, our platform establishes malignancy-associated cellular fingerprints through quantitative analysis. Integrated with a deep convolutional neural network architecture, VAD-SRC achieves superb diagnostic performance (98.5% accuracy, 100% sensitivity) on an independent test set for binary classification of benign versus malignant cases. Moreover, its high-resolution segmentation function automates the identification of individual cancer cells within a mixture of five cell types: normal cells, leucocytes, low-grade squamous intraepithelial lesion (LSIL), high-grade squamous intraepithelial lesion (HSIL), and squamous cervical cancer (SCC) cells. This advancement offers promising potential for cervical cancer screening and visual assessments within cytopathology workflows, enhancing diagnostic efficiency and precision.

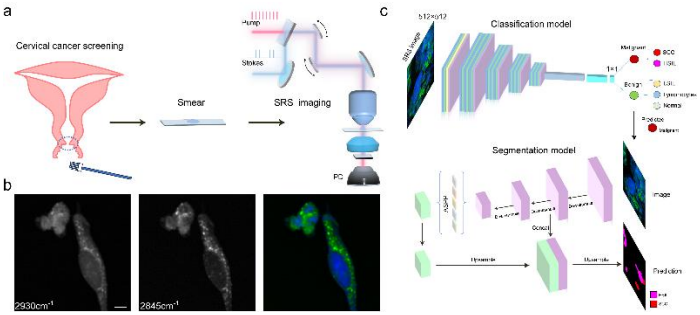


图1： Workflow of VAD-SRC

关键词： stimulated Raman scattering；cervical cancer screening；deep learning

A miniaturized femtosecond coherent Raman imaging system for rapid intraoperative diagnosis

Jiaying li[1#], Minbiao Ji[1*]

1. Academy for Engineering and Technology, State Key Laboratory of Surface Physics and Department of Physics, college of biomedical engineering fudan university, Yiwu Research Institute, Human Phenome Institute, Key Laboratory of Micro and Nano Photonic Structures(Ministry of Education), Fudan University, Shanghai 200433,

*Email: 23110860038@m.fudan.edu.cn

Cancer poses a major threat to public health in China, and early diagnosis with high precision is critical for improving clinical outcomes. Conventional histopathology is slow and labor-intensive, failing to meet the demand for rapid intraoperative decision-making. Coherent Raman scattering (CRS) microscopy offers label-free molecular contrast and high spatial resolution, making it a promising tool for fast pathological imaging.Here, we present a miniaturized broadband femtosecond fiber-synchronized laser source for CRS imaging, featuring a compact volume of 0.03025 m^3 and a Raman shift coverage of 2840–3000 cm^{-1}, encompassing the lipid (CH_2, 2845 cm^{-1}) and protein (CH_3, 2930 cm^{-1}) vibrational bands. By combining this light source with a U-Net–based deep-learning framework, single-frame femtosecond CARS images were rapidly transformed into dual-channel picosecond SRS images with molecular specificity, achieving image quality comparable to conventional SRS under a simplified CARS architecture.We further employed a Cycle-GAN model to translate SRS images into virtual H&E-stained counterparts interpretable by pathologists. Using a self-built compact scanning microscope, we validated the system on mouse brain and ear tissues. This miniaturized CRS platform enables real-time, label-free histological imaging and opens a new avenue toward the clinical translation of CRS microscopy for intraoperative diagnostics.

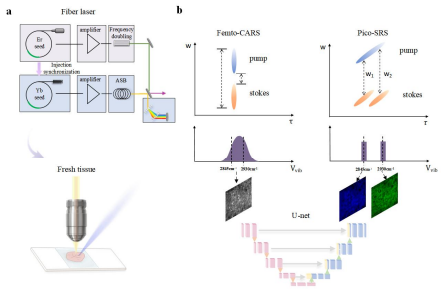


图 1 Experimental design and workflow

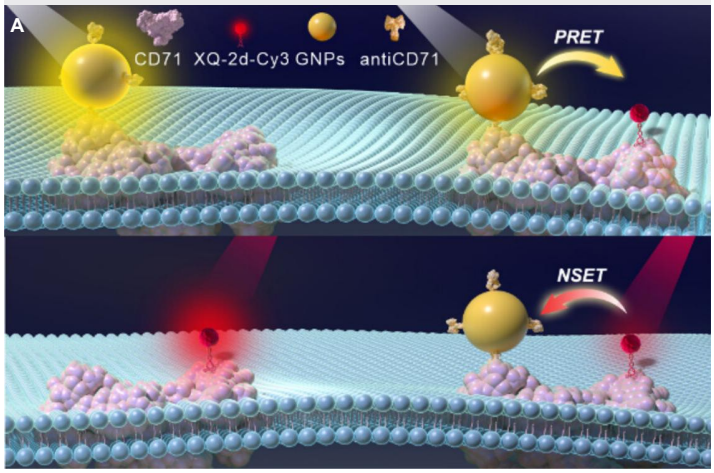
关键词:fiber laser； coherent Raman scattering microscopy； deep learning

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

等离子体能量转移效应测量单细胞水平受体二聚化和细胞凋亡

张玉，李琪，方兴如，张晓彤，曹栩蕊，汪雪妮，刘洪林*
合肥工业大学食品与生物工程学院，安徽合肥，230601
* liuhonglin@hfut.edu.cn

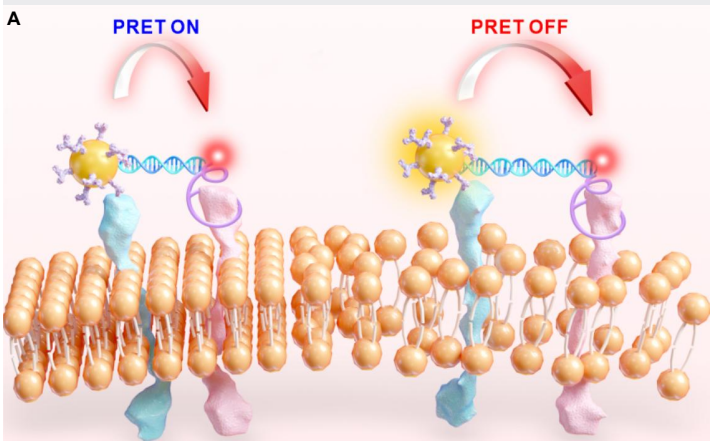
活细胞膜上单颗粒-单分子间等离子体能量转移效应



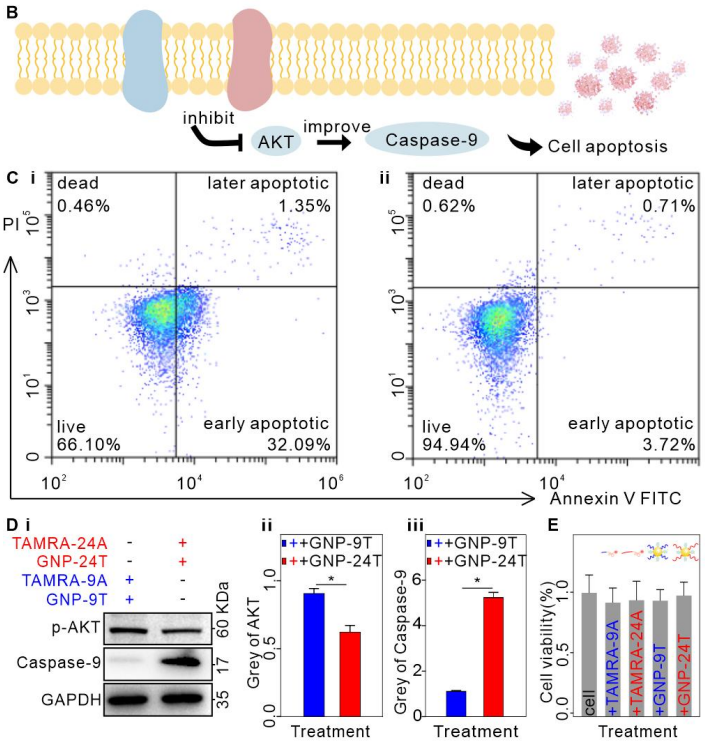
首次报道了单个纳米金颗粒和单个分子偶极之间的等离子体能量转移过程（PRET）。两种无竞争性结合的配体（适体XQ-2d-Cy3和抗体antiCD71）识别活细胞膜上同一受体蛋白不同位点；适体携带小分子荧光标签作为能量受体，抗体携带单粒径的金颗粒作为供体，观察到了能量供体与受体间无任何“系绳”连接的PRET现象，构筑了灵活的PRET光学纳米尺，实现了活细胞表面分子距离和蛋白互作的测量。

Nano Lett. **2025**, 25, 13365–13373;
Nano Lett. **2023**, 23, 7750–7757 (Highlighted Cover).

单细胞水平上测量受体二聚化和细胞凋亡过程



目前，PRET在实现精确的分子尺度距离控制以及在单个活细胞环境中进行非干扰性测量方面面临着严峻挑战：无法在单个分子偶极子层面动态调整供体-受体之间的距离（*r*）。为了克服这一障碍，我们设计了一种非遗传、非荧光的 PRET 纳米器件，其由一个单金纳米颗粒供体、一个单分子偶极子受体以及一个可编程的核酸间隔物nTA组成。



间隔物nTA能够在单个活细胞膜上实现距离的精确控制。 *r* =2.7 nm，异二聚体形成，抑制细胞凋亡(PRET-ON)； *r* =7.2 nm，受体解离，抑制 AKT 信号通路，激活Caspase-9 介导的细胞凋亡(PRET-OFF)。

超碳量子点作为智能表面增强拉曼散射材料用于肿瘤监测

苏雨[1]，陈浩琳[2]，郭周义[1]，刘智明[1,*]

[1] 华南师范大学光电科学与工程学院生物光子学研究院，广东广州，510631
[2] 中国人民解放军南部战区总医院麻醉科，广东广州，510010

*Email: liuzm021@126.com

超碳点(supra-CDs)从根本上拓展了碳点体系的光学性能，而不仅仅是光致发光。在这里，我们首次报道了在超碳点中表面增强拉曼散射(SERS)现象的证据，该现象是由多酚碳点与金属离子(CML)配位形成的片层纳米组装体中发现的。金属配位显著地改变了费米能级，使CML和分析物之间实现了有效的电荷转移，实现了1.15 × 10^4的最大拉曼增强因子。CML还保留了多酚结构优异的粘附和还原能力，这使得CML @ Au纳米复合材料可以在医用针头上原位形成，从而制备SERS针。该纳米复合材料集成了电磁和化学增强机制，使光学针具有耦合SERS效应。然后，利用该SERS针作为微创探针，通过标记和非标记模式实现了实时的体内肿瘤SERS监测。在无标记模式下，通过深度学习算法辅助从肿瘤SERSome中提取代谢标志物，便于精确评估肿瘤发生中的分子成分。最后，用DTNB功能化针头作为谷胱甘肽响应SERS探针，实现了对肿瘤微环境动态的实时监测。

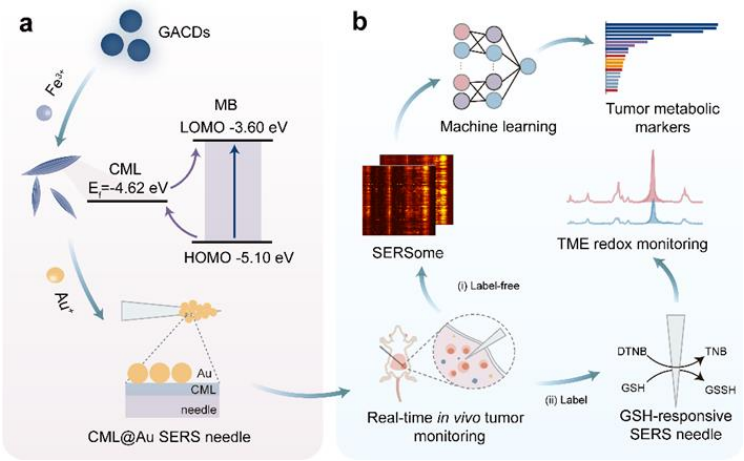


Figure 1. Schematic illustration of the minimally invasive SERS needle based on supra-CDs for in vivo tumor monitoring.

关键词： 超碳量子点，SERS材料，实时监测，体内肿瘤监测

参考文献：

[1] Zhang, X.; Li, L.; Wang, B.; Cai, B.; et al.. Angew. Chem. Int. Ed. **2024**, 63, 49, e202410522.
[2] Bi, X.; Qian, X.; Xue, B; Zhang, M.; et al.. Chem, **2025**, 11, 9, 102528.
[3] Zhang, Y.; Zhang, L.; Wang, L.; Shao, S.; et al.. Nat Metab, **2025**, 7, 2, 421-433.

葡糖酸盐/硫酸铵混合气溶胶非常规相变的拉曼研究

石梦云[1]，庞树峰[1,*]

[1]北京理工大学化学与化工学院物理化学研究所，北京 100081

*Email: sfpang@bit.edu.cn

有机气溶胶（Organic Aerosol, OA）是大气的重要组成部分，其通过散射/吸收辐射和充当云凝结核（CCN）深刻影响着地球的辐射平衡与气候[1]。近期研究表明，OA在湿度变化下会出现“升湿风化”和“有限降湿风化”等非典型相变，甚至形成离子-分子复合凝胶网络。然而这些复杂相行为的微观机制尚不明晰，这制约了大气化学模型的准确性[2]。

为应对这一挑战，本研究利用共聚焦显微拉曼光谱技术，对葡糖酸钾/硫酸铵和葡糖酸钠/硫酸铵两种混合体系在降湿-升湿循环过程中进行了原位实时表征。图1(a)显示，葡糖酸钾/硫酸铵体系在降湿至31.0%RH时发生风化，拉曼光谱中SO_4^{2-}由液态(980cm^{-1})移动到固态(975cm^{-1})，表明硫酸铵发生结晶。在40.7%RH时体系发生再风化，结晶仍为硫酸铵。相比之下，图1(b)中葡糖酸钠/硫酸铵体系在降湿过程中没有发生风化，拉曼光谱显示SO_4^{2-}为液态，升湿至40.1%RH时，观测到硫酸铵结晶，直到82.3%RH结晶溶解。

这项工作深入探讨了葡糖酸盐与无机盐混合体系的特殊相行为及其内在机理，为理解有机气溶胶的吸湿性、相态演变及其气候效应提供了关键的实验数据和新的见解。

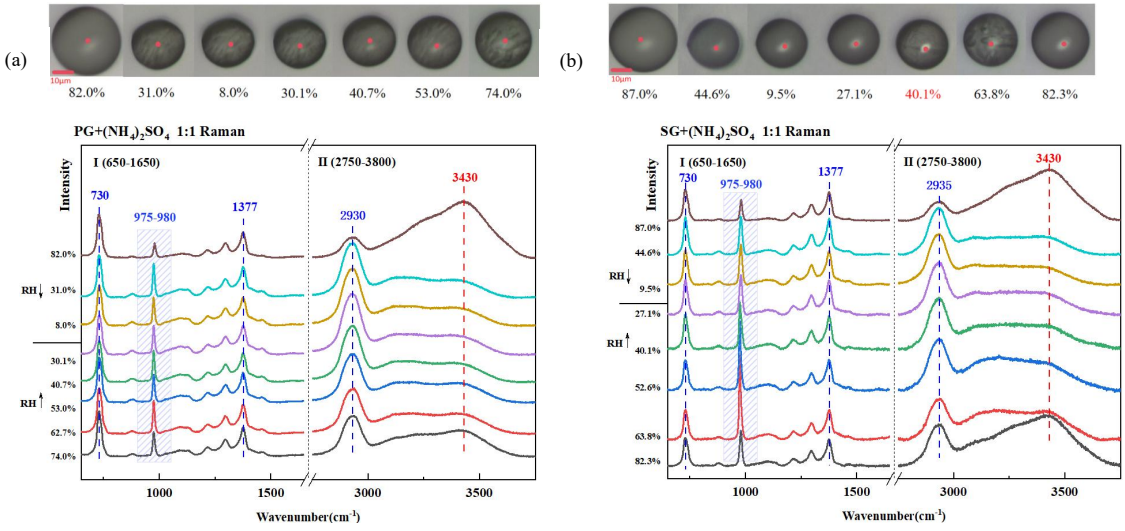


图1：(a)葡糖酸钾/硫酸铵湿度循环的相变及拉曼光谱；(b)葡糖酸钠/硫酸铵湿度循环的相变及拉曼光谱

关键词：共聚焦显微拉曼；葡糖酸盐；相变

参考文献：

[1] Huang R-J, Zhang Y, Bozzetti C, et al. High secondary aerosol contribution to particulate pollution during haze events in China [J]. Nature, 2014, 514(7521): 218–222.

[2] Freedman M A, Huang Q, Pitta K R. Phase transitions in organic and organic/inorganic aerosol particles [J]. Annual Review of Physical Chemistry, 2024, 75.

碳纳米管基一维范德华异质结的高压调控与制备研究

吴秉泽[1]，姚明光[1,*]

[1] 吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室，吉林省长春市前进大街2699，130012

*Email: yaomg@jlu.edu.cn

在碳纳米管空腔内通过范德华作用限域组装一维结构，可构建多种一维范德华异质结。该类材料具有量子限域效应和低维特性，在电子、光学与热电等领域应用前景广阔。然而，其主客体作用机制复杂、难以表征，许多新现象缺乏理论解释，制约了物性研究与器件开发。此外，一维结构本征不稳定性强，现有自下而上方法难以实现定向调控，限制了可控制备。高压可诱导碳纳米管形变，改变其内部限域环境，从而调控主客体作用与客体构型，甚至诱导新结构。本研究采用高压与原位拉曼散射技术，结合理论计算，对一维范德华异质结开展研究，获得以下结果：首先，系统研究了石墨烯纳米带（GNR）与碳纳米管的相互作用。通过高压原位拉曼与理论计算，首次发现金属性碳管中的低能激子可与GNR呼吸模发生强电声耦合，其机制为形变势散射主导，显著提升了GNR的热导率。其次，设计并理论预测了三类终端钝化的sp^3碳链（CO/CS/CSe），实验上通过高压处理碳/硫复合前驱体，实现了螺旋sp^3 CS链的限域制备。本研究发展的高压限域制备与调控策略，为构筑新型一维异质结与功能器件提供了新途径。

关键词： 拉曼光谱；一维范德华异质结；高压

参考文献：

[1] Bingze Wu,, Lei Shi,* and Mingguang Yao,*et al. Significant electron-phonon coupling in nanographene confined in single-walled carbon nanotubes due to the large amplitude of radial breathinglike vibrations. Physical Review B, 2024, 109(19): 195413.

[2] Bingze Wu, Xianhong Fan,* and Mingguang Yao,* et al. Anharmonic suppression of ultra-narrow graphene nanoribbons confined in carbon nanotubes through host – guest interactions. Applied Physics Letters, 2025, 126(20): 203101.

六方金刚石的高压合成

陈德斯[1]，董家君[1]，刘冰冰[1]，姚明光[1*]

[1]吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室，长春市前进大街2699号，130012

*Email: yaomg@jlu.edu.cn

高压作为一种极端条件，能够有效缩小原子间距离，调控原子间的相互作用，甚至成键方式，从而创制出常规条件难以获得的新材料，为原子级制造开辟了重要途径。本报告将介绍研究团队近期在高压人工合成六方金刚石方面的最新进展。半个世纪前，一种共生于陨石中的“超级钻石”被发现，这种珍稀的、具有六方晶系结构的“陨石钻石”因其比通常的立方金刚石硬度更高而备受关注。然而，由于六方金刚石的形成能垒高于立方金刚石，因此高温高压产物往往以立方金刚石为主，六方金刚石能否独立存在一直存在争议，人工合成纯相六方金刚石也成为长期未能攻破的科学难题。本研究团队最近发现了高压合成近纯相六方金刚石的有效途径：利用金刚石对顶砧高压高温原位实验，发现了石墨经由高压“后石墨相”加热形成六方金刚石的全新路径，这是一种不仅适用于单晶石墨、也可用纳米石墨作为前驱体的通用方法，同时依靠团队自主研发的超高压高温大腔体材料制备技术，通过在高压组装体中引入热导率不同的高硬度材料，在高压下产生温度梯度"首次"合成出高质量六方金刚石块材。所制备的六方金刚石块材具有超过天然立方金刚石 40%以上的硬度以及优异的热稳定性。这些成果不仅提供了纯相六方金刚石原子级制造的有效途径，也为超硬材料和新型碳材料添加了性能更为优异的新成员，为突破立方金刚石的应用局限提供了可能；对深入了解陨石中钻石的具体来源和重大地质事件也有着重要意义。

PC-01

关键词： 高压；六方金刚石；超硬材料；后石墨相

参考文献：

[1] Chen, D.; Chen, G.; Lv, L.; Dong, J.; Shang, Y.; Hou , X.; Wang, Y.; Shang, J.; Wang, S.; Yin, Y.; Liu, R.; Zhang, W.; Jiang, Z.; He, Y.; He, B.; Mao, C.; Zhu, S.; Sundqvist, B.; Liu, B.; Yao, M.; Nature Materials, **2025,** DOI.org/10.1038/s41563-025-02126-9

[2] Dong, J.; Yao, Z.; Yao, M.*; Li, R.; Hu, K.; Zhu, L.; Wang Y.; Sun,H.; Sundqvist, B.; Yang, K.; Liu, B.; Physical Review Letters, **2020**, DOI.org/10.1103/PhysRevLett.124.065701

金纳米双锥与单层二硒化钨的强相互作用散射光谱研究

朱美欣[1]，尤卿章[2]，薄文静[3]，米笑晨[4]，王培杰[1,*]

[1]首都师范大学物理系，北京市西三环北路105号，10048

*Email: pjwang@cnu.edu

近年来，光与物质强相互作用因其在量子光学和非线性光子学等领域的潜在应用而备受关注。基于表面等离激元共振(SPR)的贵金属纳米结构能够突破衍射极限，实现深亚波长光场局域化和显著的近场增强，为强耦合体系的构建提供了理想平台[1]。金纳米双锥（Au NBPs）因其独特的双尖端几何结构，可实现高度局域化的“热点”效应和具备极小的模式体积[2]，同时，单层过渡金属硫族化合物（如 WSe_2）因其较大的激子结合能和稳定的激子发射特性，成为强耦合研究的理想半导体材料。本研究通过种子介导法精确调控 Au NBPs 的长径比(图1B)，使其等离激元共振峰(730 – 850 nm)完全覆盖单层 WSe_2的 A 激子峰(750 nm)，从而实现模式匹配(图 1C)。在此基础上，构建了单个 Au NBP−单层 WSe_2杂化体系(图 1A)，并通过暗场散射光谱观测到显著的拉比劈裂(Rabi splitting)现象(图 1D)。同时散射光谱在 750 nm 附近分裂为两个新的杂化模式，分别对应于上极化激元分支(upper polariton band, UPB)和下极化激元分支(lower polariton band, LPB)。通过调控 Au NBPs 的等离激元共振波长，观测到典型的反交叉行为（anti-crossing），进一步证实了强耦合的产生(图 1E)。基于双振子耦合模型，拟合得到拉比劈裂能为 81 meV，满足强耦合判据$\Omega_R > (\gamma_{pl} + \gamma_{ex})/4$=38.75 meV（$\gamma_{pl}$≈115 meV, γ_{ex}≈40 meV）。本研究在室温环境下实现了基于单个 Au NBP 在近红外（NIR）波段的强耦合，为近红外波段的光子集成电路、量子信息处理和超快光开关等应用开辟了新途径。

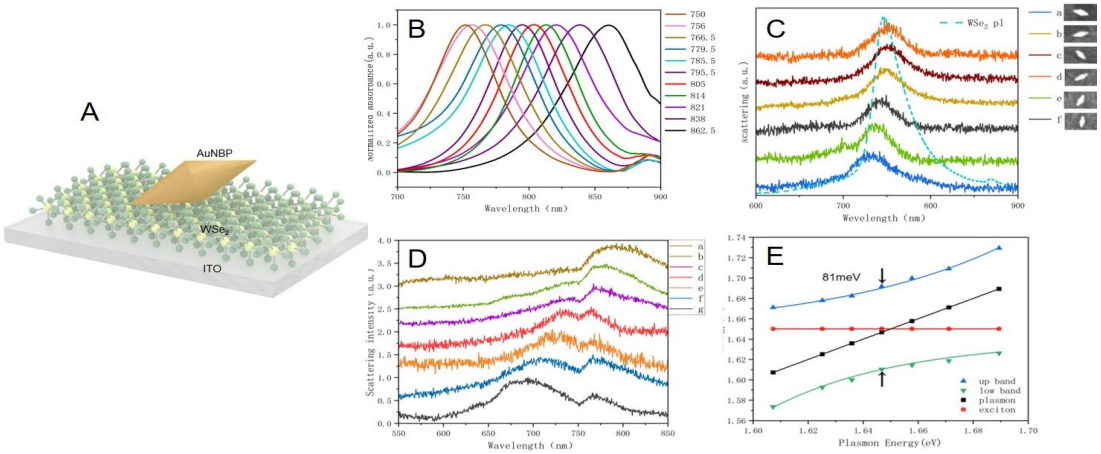


图 1：A：单个金纳米双锥与单层 WSe_2 复合结构示意图；B：金纳米双锥溶液的紫外吸收光谱归一化图；C：单个金纳米双锥暗场散射光谱（右插图为每条谱线对应的金纳米双锥 SEM 图像，比例尺为 50 nm）；D：复合体系的散射光谱图；E：提取 D 图中的峰位能量绘制出复合体系的反交叉曲线。

关键词：表面等离激元；激子；光与物质强耦合；拉比劈裂

参考文献：

[1] Baumberg, J.J.; Aizpurua, J.; Mikkelsen, M.H.et al. Nature Mater. 2019, 18(7), 668-678.

[2] Lawless, J. et al. ACS Applied Materials & Interfaces. 2020, 12(41), 46406-46415.

CNCLS 23rd | 第二十三届全国光散射学术会议
中国·厦门 | 2025年11月25日-28日 The 23rd Chinese National Conference on Light Scattering

手性金纳米颗粒及其组装依赖光学活性响应调控

李佩如[1]，乔心荀[1]，王雪华[1]，方吉祥[1,*]，张玲玲[1,*]

[1]西安交通大学生命科学与技术学院，中国陕西省西安市咸宁西路28号，710049

*Email: jxfang@mail.xjtu.edu.cn, linglingzhang@xjtu.edu.cn

手性金纳米颗粒（NPs）因其独特的局域表面等离子共振效应，能够将入射光场高度局域在纳米尺度范围内，从而显著增强光与物质之间的手性相互作用。这一特性使得手性等离激元纳米结构在手性光学传感、不对称催化等领域备受关注。现有研究已通过系统调控纳米颗粒的螺旋度、扭曲度等几何参数揭示了合成的手性纳米颗粒的光学活性规律。然而对于等离激元纳米颗粒的组装体，由于等离激元耦合效应的介入，其集体光学活性行为往往呈现出更为复杂的非线性特征，这一机制尚未得到系统阐释。本文揭示了组装手性等离激元纳米颗粒与其光学活性响应之间的关联：各向异性手性金纳米棒组装体的不对称因子（*g*-factor）发生反转且部分减弱；而各向同性手性金纳米立方体组装体仅表现出手性信号衰减，无反转现象。我们进一步通过数值模拟分析了手性纳米颗粒光学响应信号的变化机制。该研究为调控等离激元纳米结构的手性响应信号提供了重要理论依据。

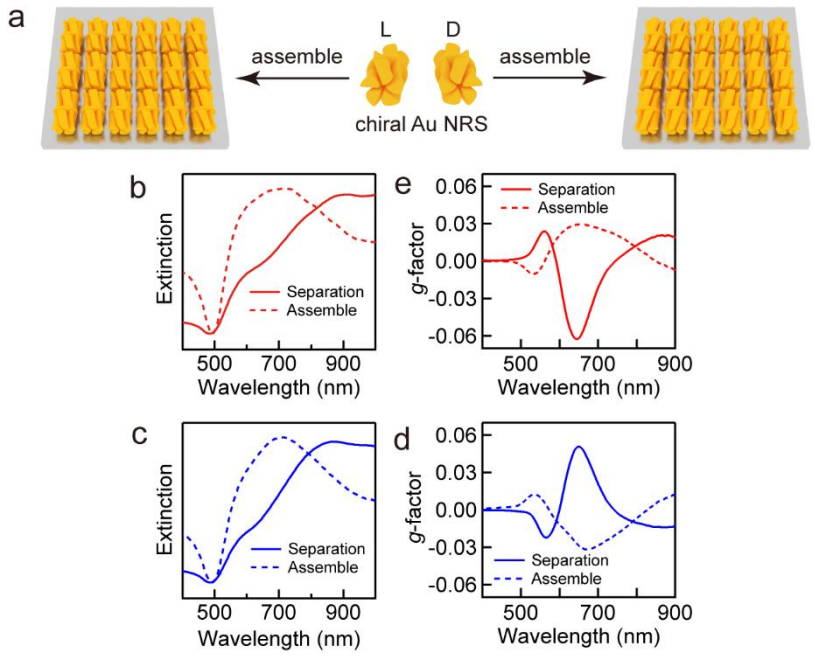


图1：手性金纳米棒组装体及其手性光学响应

关键词：手性光学响应；手性等离激元纳米颗粒；纳米颗粒组装体

银纳米立方体与激子的强耦合研究

宋莹洁[1]，李京[2]，尤卿章[3]，薄文静[4]，米笑晨[5]，王培杰[1,*]

首都师范大学物理系，北京纳米光电子重点实验室，北京市西三环北路 105 号，100048

Email: pjwang@cnu.edu

光与物质在量子尺度下的强相互作用机制是当前凝聚态物理与量子光学交叉研究的核心前沿。基于腔量子电动力学（QED）框架，半导体激子与等离激元纳米腔的强耦合系统为室温量子器件的实现提供了新范式，在单光子源、全光量子开关及拓扑量子计算等领域具有重要应用价值[1]。本研究通过精密调控银纳米立方体（Ag nanocube）在单层 WS_2上的尺寸和排布，实现了等离激元-激子强耦合体系的构筑与调控。 在理论设计层面，银纳米立方体因其独特的几何诱导电磁场增强效应，可产生亚波长尺度的局域场束缚模体积和显著的热点增强（$|E/E_0|^2>10^3$）[2]，满足强耦合所需的 Purcell 效应增强条件。单层 WS_2凭借其强激子束缚能和室温稳定的 A 激子发射，成为二维材料中实现强耦合的理想载体。通过精确调控纳米立方体边长（60-100 nm），我们实现了等离激元共振峰的调谐范围（575-664 nm）对 WS_2激子峰（615 nm）的全光谱覆盖（图 1A）。实验表征中，借助暗场散射光谱技术观测到显著的拉比劈裂现象：在激子-等离激元杂化体系中出现双峰结构（617 nm 附近），其能量随纳米立方体尺寸变化呈现典型的反交叉行为（图 1B）。并获得 180.6 meV 的拉比分裂能（图 1C），满足强耦合判据 $g > (\gamma_{pl} + \gamma_{ex})/4=(360meV+30meV)/4=97.5meV$。本研究提出基于几何可调纳米谐振器的强耦合调控策略，实现了强耦合体系下的亚波长尺度光场局域能力、室温稳定的量子相干特性、制备工艺稳定等优势。这些特性为开发新型光子器件提供了实验参考。

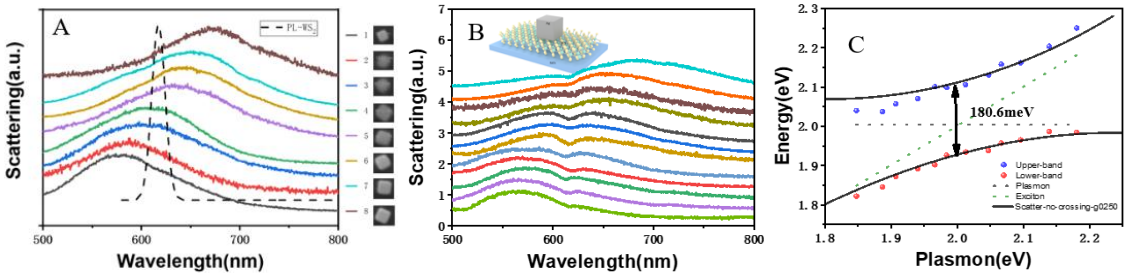


图 1：A: 谱线 1-8 为单个不同 AgNCs 的暗场散射光谱（右图分别表示 1-8 所对应 SEM 图像），黑色虚线为单层 WS_2的本征荧光光谱；B: 复合结构的暗场散射光谱（插图为 AgNCs 置于单层 WS_2上的复合结构示意图）；C: 复合体系的反交叉曲线。

关键词： 银纳米立方体；激子；光与物质强耦合；拉比分裂

参考文献:

[1] Santhosh K, Bitton O, Chuntonov L, et al. Nature communications, 2016, 7(1): ncomms11823.
[2]A. Femius Koenderink. ACS Photonics. 2017, *4* (4), 710-722.

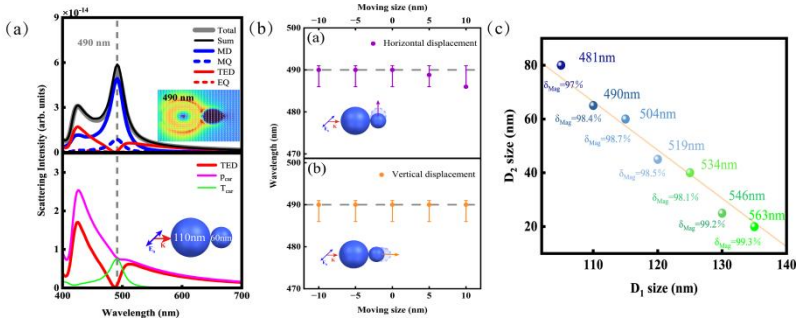
硅基纳米二聚体中理想磁共振散射的调控机制

刘智慧[1]，李泽[1,*]

内蒙古大学物理科学与技术学院，内蒙古自治区呼和浩特市赛罕区大学西街 235 号，010021

*Email: 1930773719@qq.com

在纳米光子学领域，物质与光的磁成分相互作用通常可忽略不计，因此实现有效的光学磁性对设计可见光范围功能性超材料至关重要。硅基材料因高折射率、低光学损耗及与现代光刻技术的兼容性，成为构建高性能纳米光学器件的理想选择。本研究通过数值模拟探究了非磁性硅纳米球二聚体与纳米盘二聚体在平面波照射下的光学响应特性：当硅纳米二聚体中磁偶极共振与电环形偶极模式、磁四极模式光谱重叠时，笛卡尔电偶极与电环形偶极的破坏性干涉形成非辐射（Anapole）模式，能抑制球极电偶极响应，使远场散射以磁偶极与磁四极叠加为主。通过引入对称破缺并精细调节小结构参数，可实现 Anapole 模式与磁共振的精准匹配，实现理想磁偶极散射（图 a）。磁模式纯度因子(δ_{Mag})高达 0.99 以上，且对两球中心的水平和竖直微小结构偏差具有鲁棒性（图 b）。两种体系的磁共振波长可通过调节大结构参数在可见光范围内调控（图 c）。该研究明确了磁偶极 - 四极叠加与电偶极抑制的协同机制，为非磁性纳米结构中磁共振散射的精准调控提供了理论依据，在量子纳米光子学领域可用于构建高效单光子发射源，通过增强磁偶极跃迁提高单光子发射效率和纯度。



(a) 上图展示了模拟散射截面和球形多极展开，不对称纳米球二聚体（D1=110 纳米，D2=60 纳米，间隙大小为 0 纳米）。图中的垂直虚线表示 MD 和 MQ 的共振波长。下图展示了笛卡尔电偶极矩（p_{Car}）和环形电偶极矩（T_{Car}）对均匀介质总散射的贡献。(b)二聚体系统中，当两个纳米球的中心位置在水平方向（上图）和垂直方向（下图）改变时，理想磁共振散射的稳定性。图中的紫色和橙色点分别表示笛卡尔电偶极子和电环形偶极子的交点位置。条形图的长度代表总电偶极子（TED）响应消失的波长范围，而虚线则指示磁共振峰的位置。(c)不同颜色的点分别代表具有不同波长的磁共振散射体，其中δ_{Mag}表示磁模式纯度因子。

关键词： 磁共振散射；硅纳米二聚体；Anapole 模式；

参考文献：

[1] T. Feng, Y. Xu, W. Zhang, and A.E. Miroshnichenko, Ideal Magnetic Dipole Scattering, Phys. Rev. Lett 118, 173901 (2017).

Magnetic Purcell Enhancement by Plasmon-Induced Magnetic Anapole Mode in the Gap of Oblate Nano-Ellipsoid on Metal Mirror Structure

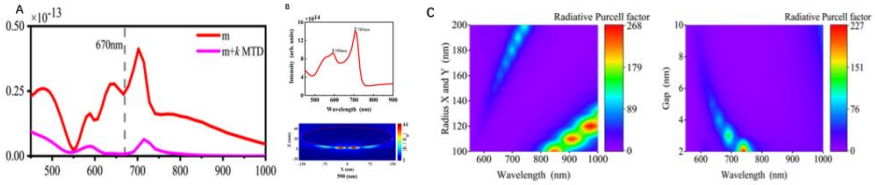
金属镜结构上扁椭球形纳米颗粒间隙中等离激元诱导磁 Anapole 模式产生的磁 Purcell 增强

李佳倪[1]，李泽[1,*]

内蒙古大学物理科学与技术学院，内蒙古自治区呼和浩特市赛罕区大学西街 235 号，010021

*Email: *Email: 1875204112@qq.com

实现磁 Purcell 增强对增强纳米级的光-物质相互作用至关重要。本研究证实，金镜上扁椭纳米椭球（ONEOM）结构间隙中存在磁 anapole 态，其由磁偶极矩与磁环矩相消干涉产生，可抑制散射增强近场。与电偶极子 Purcell 效应类似，磁偶极子跃迁受光学局域态密度（LDOS）调控，而低 LDOS 限制了磁发射体的增强。因此在 NPOM 结构中磁 anapole 模式激发的磁“热点”可有效提升磁 Purcell 增强。在这项工作中，将虚拟磁偶极子引入间隙区域研究磁 Purcell 共振条件下的磁 Purcell 增强。分析表明，磁 Purcell 因子对间隙尺寸和结构参数存在依赖性。该研究凸显了 ONEOM 结构在需要高效磁偶极子发射的应用中的潜力。



关键词：磁 Purcell 增强；相消干涉；磁 “热点”

参考文献：

[1]Russell, K.J.; Yeung, K.Y.M.; Hu, E. Measuring the Mode Volume of Plasmonic Nanocavities Using Coupled Optical Emitters. Phys. Rev. B **2012**, 85, 245445.

[2]Purcell, E.M. Spontaneous Emission Probabilities at Radio Frequencies. Phys. Rev. **1946**, 69, 681.

Strong coupling between an ideal magnetic Resonance scatterer and molecular excitons

成双龙[1]，李泽[1,*]

内蒙古大学物理科学与技术学院，内蒙古自治区呼和浩特市赛罕区大学西街 235 号，010021

*Email: 1005002551@qq.com

本研究提出了一种基于金核@硅壳（Au core-Si shell）复合纳米结构的新型磁光强耦合方案。该设计利用硅壳的高折射率（n≈3.5）激发强局域磁偶极（MD）共振，同时耦合金核的局域表面等离激元模式诱导出 1280 nm 波长处的电场抑制型 anapole 态[1]。通过相位匹配与模式调控，实现了电偶极（ED）散射的完全抑制（散射截面降至背景噪声水平），同时保留了强烈的纯磁偶极远场响应。理论模拟表明，当该结构与二维分子激子耦合时，形成
能量分裂达 64 meV 的杂化态，其吸收光谱中的对称分裂特征满足强耦合判据[2]。该基于磁共振的杂化系统不仅继承了介质纳米粒子的低损耗优势，还通过选择性抑制电偶极响应，建立了理想磁偶极散射与强耦合之间的直接关联。此设计为开发室温、低阈值磁光量子器件（如量子信息处理和片上光电器件）提供了新视角。

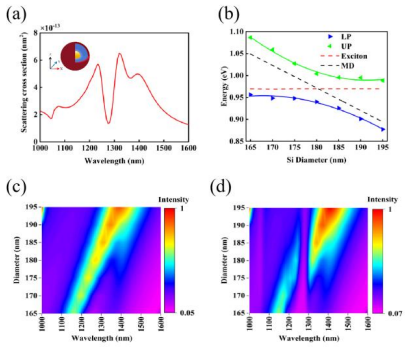


图 1. (a) 包裹 3 nm 分子激子层的金核/硅壳纳米结构的散射光谱。(b) 反交叉行为：上分支（UP，绿色三角形）和下分支（LP，蓝色三角形）随失谐度的变化，未耦合的磁偶极共振（红色虚线）和激子跃迁（黑色虚线）。(c, d) 归一化散射光谱映射图：(c) 原始金核/硅壳结构；(d) 失谐条件下的激子包覆混合体系。

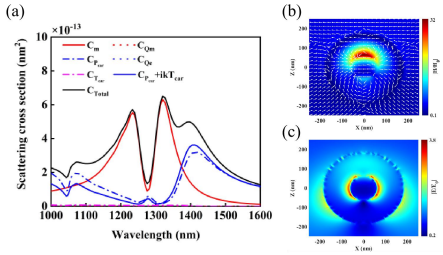


图 2. (a) 强耦合条件下异质结构散射的多极分解光谱。(b, c) 1280 nm 波长处 xz 平面的电磁场分布：(b) 磁场强度分布，(c) 电场强度分布。

关键词： 强耦合；理想磁偶极；anapole 态

参考文献：

[1] T. Feng, Y. Xu, W. Zhang, and A. E. Miroshnichenko, "Ideal Magnetic Dipole Scattering," Physical Review Letters, vol. 118, no. 17, p. 173901, 04/25/ 2017.

[2] Y. Wang, Q. You, Z. Li, L. Zhang, D. Zhang, and P. Wang, "Strong Coupling of Plasmonic Nanorods with a MoSe2 Monolayer in the Near-Infrared Shortwave Region," The Journal of Physical Chemistry C, vol. 128, no. 12, pp. 5280-5287, 2024/03/28 2024.

Magnetic Purcell Enhancement in Nanohole Array based on Anapole Resonances

基于 Anapole 共振的纳米孔阵列中的磁 Purcell 增强

钱熙科[1]，王蒙[1,*]，李泽[1,*]

内蒙古大学物理科学与技术学院，内蒙古自治区呼和浩特市赛罕区大学西街 235 号，010021

*Email: xike-qian@mail.imu.edu.cn

近年来物质与光电场相互作用方面的研究取得了巨大进展。然而，物质与光磁场的相互作用长期被忽视，这是因为磁偶极子跃迁通常比电偶极子跃迁弱4-6个数量级，仅在后者被抑制时才显现。因此本文通过数值模拟设计了不同形状的磷化镓纳米孔阵列超表面，激发电偶极和环形偶极干涉相消形成Anapole模式，从而抑制电偶极跃迁，使磁偶极跃迁占主导地位，在超表面阵列中实现了大面积、高强度的磁热点分布，提供了显著的磁局域态密度增强。其中正三角形阵列通过优化可以达到超过300的磁Purcell增强，并且对偶极子位置变化不敏感，为高效磁光相互作用及其大规模应用提供了切实可行的新途径。

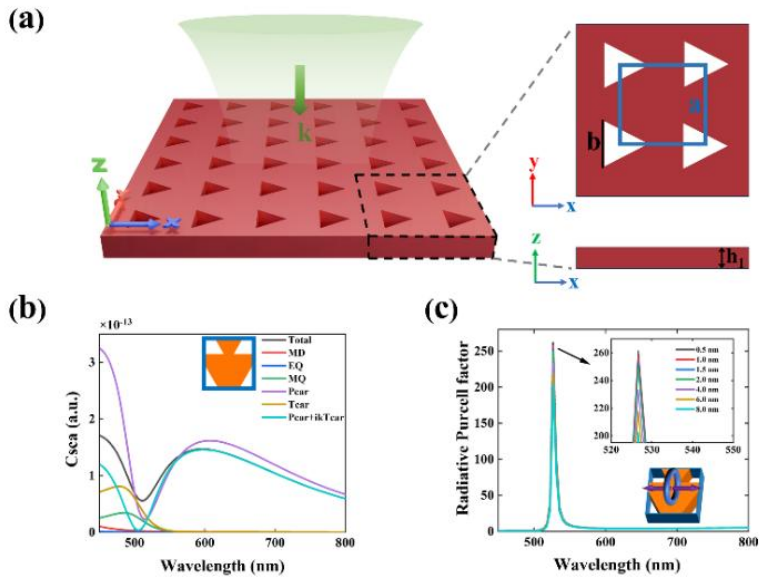


图1：(a) 正三角形纳米孔阵列结构示意图 (b) 正三角形纳米孔阵列模式分解图 (c) 正三角形纳米孔阵列辐射Purcell增强图

关键词：Anapole模式；磁Purcell增强；纳米孔阵列超表面

参考文献：

[1] Li, Z.; Li, Y.; You, Q.; Wang; Luan, H.; Wang, P. *Phys. Rev. A.* 2024, 110, 013516.

[2] Sugimoto, H.; Fujii, M. *ACS Photonics*. 2021, 8, 1794–1801.

金镜面纳米盘间隙中磁 Anapole 增强的磁 Purcell

徐壮壮[1]，王蒙[1,*]，李泽[1,*]

内蒙古大学物理科学与技术学院，内蒙古自治区呼和浩特市赛罕区大学西街 235 号，010021

*Email: xuzhuangzhuang@mail.imu.edu.cn

Magnetic Anapole (MA)模式因其具有显著的场增强能力而成为传感、信息和光子学领域的潜在研究热点。在这项工作中，我们系统地研究了由金镜面和纳米盘组成的纳米盘金镜面结构 (NDOM)的间隙中形成的 MA 模式。相应的磁近场表现出特征性的类似 Anapole 的磁热点分布，并可实现高达 40 倍的磁场增强因子。通过多极展开分析，我们还揭示了磁偶极子和磁环形偶极子之间的干涉相消导致间隙中的 MA 模式。此外，通过在间隙中引入磁偶极子，我们观察到显著的辐射 Purcell 因子，最高可达约 76，它遵循 802 nm 处散射光谱中的 MA 模式峰值。值得注意的是，随着间隙尺寸的减小和纳米盘半径的增加，辐射 Purcell 因子达到最大值的波长发生红移。此外，增加金纳米盘的厚度会导致辐射 Purcell 因子的增强，在达到大约 50 nm 的厚度后稳定下来。这种结构有助于研究光与物质之间相互作用。

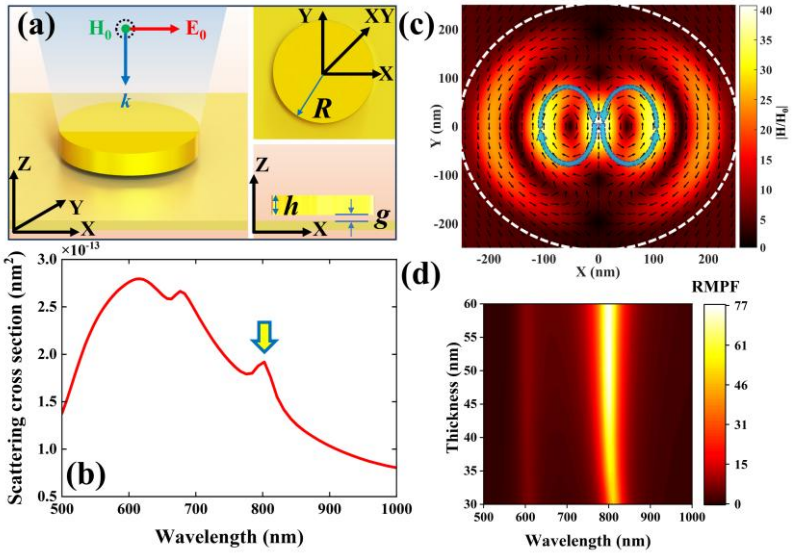


图1：（a）NDOM 结构的示意图。（b）NDOM 系统的模拟远场散射光谱。（c）x-y 平面 802 nm 处的磁场线和磁场分布。（d）间隙中心的 Purcell 随金纳米盘的厚度而变化。

关键词：Anapole模式；辐射Purcell因子；磁偶极子；光与物质相互作用

参考文献：

[1] T. Yezekyan, V. A. Zenin, J. Beermann *et al*., *Nano Lett*. 2022. 22, 6098–6104.
[2] Li, Z.; Li, Y.; You, Q *et al.*, *Phys. Rev. A.* 2024, 110, 013516.

双缺陷协同增强的 $Cr_xTi_yO_2$ 半导体型 SERS 基底研究

蒋于瑞[1,2]，任俊阳[1,3]，杨梦雅[1,3]，黄行九[1,3]，唐祥虎[1,3*]

[1] 中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所，安徽 合肥 230031
[2] 安徽大学物质科学与信息技术研究院，安徽 合肥 230601
[3] 中国科学技术大学，安徽 合肥 230026

*Email: tangxh2011@iim.ac.cn

近年来，缺陷工程策略在半导体型表面增强拉曼光谱（SERS）基底开发中展现出巨大潜力。尽管空位缺陷和掺杂策略已分别被证实可用于提升材料SERS性能，但二者协同增强的SERS基底开发及其对分子检测的增强作用机制仍缺乏系统性研究。基于此，本研究提出了一种基于$Cr_xTi_yO_2$的双缺陷协同SERS基底，通过合理调控Ti空位与Cr掺杂浓度实现性能突破。研究结果表明，Ti空位诱导了价带顶的电子自旋极化，而Cr掺杂在带隙中引入了Cr 3d态，二者协同优化了能带结构和载流子分离效率。这种双缺陷调控使得光诱导电荷转移过程显著强化，密度泛函理论（DFT）计算结合实验证实了激光激发下的电荷转移共振现象。性能表征结果显示，优化后的$Cr_xTi_yO_2$基底对亚甲基蓝(MB)的检测限低至10^{-11} M，增强因子（EF）达2.6×10^6，并且对于宽带隙分子4-巯基苯甲酸(4-MBA)亦表现出低至10^{-8} M的检测能力。此外，该基底具备优异的信号重现性和长期稳定性。本研究通过双缺陷协同调控策略，为高性能半导体SERS基底的设计提供了新思路，在痕量检测和分子传感领域具有重要应用潜力。

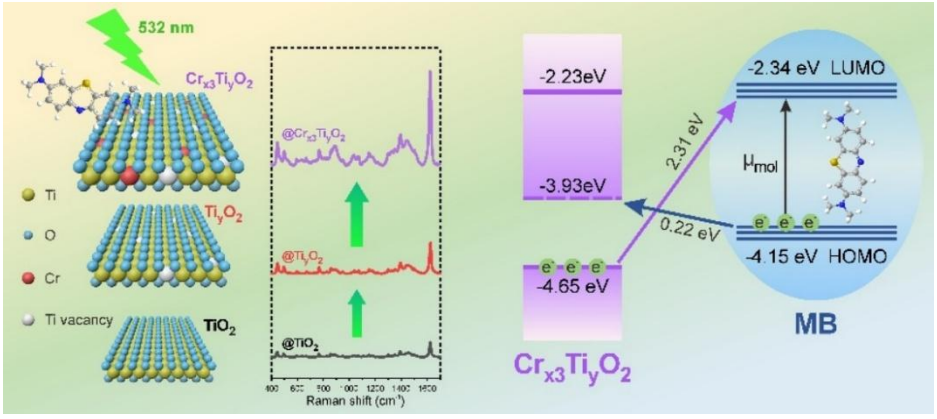


图1：基底调控前后的构效关系及电荷转移机理示意图。

关键词：半导体SERS基底；钛空位；铬离子掺杂；协同调控

参考文献：

[1] Yi J, You E-M, Hu R, et al. Surface-enhanced Raman spectroscopy: a half-century historical perspective [J]. Chemical Society Reviews, 2025, 54(3): 1453–1551.

[2] Quan Y, Tang X H, Lu W, et al. Amorphous/crystal heterostructure coupled oxygen vacancies-sensitized TiO_2 with conspicuous charge-transfer resonance for efficient SERS detection of chloramphenicol [J]. Advanced Optical Materials, 2023, 11(23): 2301609.

等离激元效应增强光谱技术及应用

韩舒[1]，李晓峰[1]，王艳慧[1]，汪安[1]，张凡利[1,*]

[1] 中国计量大学 光学与电子科技学院，浙江省杭州市钱塘区学源街 258 号，310018

*Email:zhangfl@cjlu.edu.cn

金属等离激元效应源于光子与金属表界面电子之间的相互作用，表现为电子的集体振荡，能够将光场局域在纳米甚至亚纳米尺度范围内，从而显著增强光与物质之间的相互作用。光本身具有电场和磁场分量，因此构建精确的等离激元纳米光腔对于实现电磁场的高度局域化、探索新型微纳光场调控机制以及研究等离激元纳米结构与光、物质三者之间的耦合行为具有重要意义[1-3]。近年来，本实验室致力于研究等离激元纳米光腔的近场增强特性及其在光与物质相互作用中的应用。通过调控光腔的尺寸、材料组成等关键参数，可实现电磁场的极端局域，进而精确调控电偶极与磁偶极跃迁过程。在此基础上，结合前期对等离激元增强光谱技术以及“热点”区域内光与物质相互作用机制的理解，我们进一步开展了针对等离激元纳米结构中“热点”的调控与应用研究。借助便携式拉曼光谱仪与表面增强拉曼散射（SERS）技术，我们成功构筑了具有高SERS活性的纳米基底材料。该类材料可应用于农药残留、重金属污染以及生命健康等多个领域的现场快速检测，实现对目标分子的超痕量检测，具备重要的科学价值与广阔的市场应用前景[4-6]。

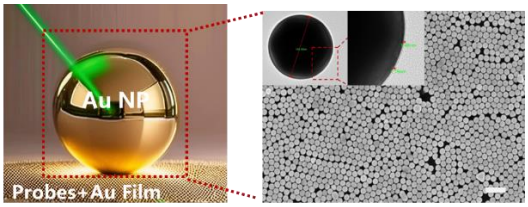


图1：等离激元纳米光腔的构筑及其示意图

关键词：等离激元纳腔；电偶极跃迁；表面增强拉曼光谱；痕量检测

参考文献：

[1] Zhang, F. L., Yi, J., Lin, W., et al. *Nano Today*, **2022**, *44*, 101464.
[2] Jin, H., Wang, J. Y., Zhang, F. L. et al. *Nano Res.*, **2023,** *16*(4), 5376-5382.
[3] Li, X. F., Wang, J., Zhang, F. L. et al. *Anal. Chem*., **2025**, *97*(12), 6753-6761.
[4] Wang, Y. H., Huang, C., Zhang, F. L., et al. *Food Chem.*, **2025**, 463, 141391.
[5] Huang, C., Wang, Y. H., Zhang, F. L., et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2024**, *16*(14), 18124.
[6] Wan, M. J., Wu, Y. T., Zhang, F. L., et al. *Food Chem.*, **2025**, *492*, 145529.

Li_2O-Ta_2O_5二元系熔体结构的原位高温拉曼光谱研究及定量解析

夏翔[1]，尤静林[1,*]，刘国鹏[1]，赵玉帆[1]，张隆兴[1]，刘勇[1]，陆佳雯[1]

[1]省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室、上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室和上海大学材料科学与工程学院，上海 200444

*Email: jlyou@163.com

为了研究Li_2O-Ta_2O_5二元系熔体中Ta^{5+}的结构行为，本研究运用原位高温拉曼光谱技术对熔体的结构进行表征。构建了一系列熔体中可能存在的Ta-O团簇模型，并通过量子化学从头计算模拟了对应的拉曼光谱和拉曼散射截面（*RSCS*）[1,2]。利用Voigt线型函数对拉曼光谱中非桥氧的伸缩振动谱带进行解卷积（图1a），最终得到了Li_2O-Ta_2O_5二元系熔体中各种团簇的定量分布，探究了体系中Li_2O含量对熔体中微结构分布的影响。Li_2O-Ta_2O_5二元系熔体的拉曼光谱呈现为具有拖尾的非对称包络峰，表明熔体中存在多种微结构。定量结果显示熔体中同时存在[TaO_4]、[TaO_5]和[TaO_6]三种Ta-O配位基团，且其分布随体系中Li_2O含量增加呈现规律性变化（图1b）：五配位（P_i）和六配位（H_i）结构占比逐渐减少，而四配位（Q_i）结构的占比明显增加。对于Q_i物种来说，随着体系中Li^+含量的增加，Q_2和Q_3的含量逐渐下降，Q_1的含量呈现为先增长后下降的趋势，Q_0的含量则逐渐增加（图1c）。Q_i物种含量的变化归因于体系中Li^+不同的含量对环结构和有限链结构中桥氧键的破坏程度不同。证实了体系中Li^+的引入显著降低Ta-O网络聚合度，促进低配位团簇的形成。本研究为建立Li_2O-Ta_2O_5二元系熔体中微结构与其物性的关联，以及优化其晶体生长工艺参数提供了理论依据，对Li_2O-Ta_2O_5二元系功能晶体的可控制备具有指导意义。

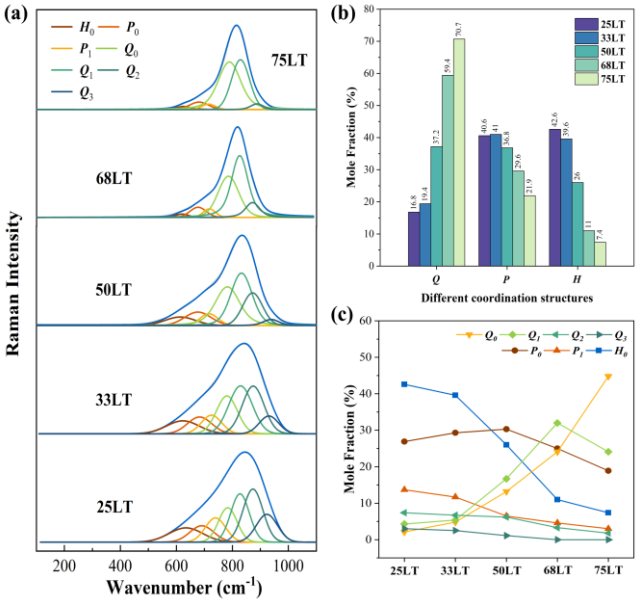


图1：Li_2O-Ta_2O_5二元系熔体（nLT，n为Li^+在对应样品体系中的摩尔百分比，n=25, 33, 50, 68, 75）拉曼光谱的（a）解卷积结果，（b）Ta-O配位数的分布和（c）各微结构的定量结果，测试温度为1923K

关键词：Li_2O-Ta_2O_5二元系熔体；原位高温拉曼光谱；量子化学从头计算；定量解析

参考文献：

[1] Wang, J.; You, J. L.*; Wang, X. P.; Wang, M. et. al. *J. Mol. Liq.* **2022,** *365*, 120098.
[2] You, J. L.*; Jiang, G. C.; Hou, H. Y. et. al. *J. Raman Spectrosc.* **2005**, *36(3)*, 237-249.

压砧加载条件下应力原位拉曼光谱成像系统研制

李敬業，陶雨，王扬斌，雷力*

四川大学原子与分子物理研究所，成都，610065

*Email: lei@scu.edu.cn

传统拉曼应力测量多局限于静态或事后分析，难以满足复杂载荷条件下对材料应力演化过程进行实时原位观测的需求。为此，我们设计并搭建了一套具备原位测量能力的拉曼光谱应力成像系统，旨在实现受载条件下材料应力分布的动态监测与可视化。该系统集成了显微拉曼光谱仪、高精度位移平台、可控加载单元及专用数据采集和分析模块，并配套开发了原位扫描控制程序与数据处理程序，能够在外加应力或压力环境下实现微米级的原位应力探测，获取材料表面或界面区域的二维应力成像图谱。通过硬质压头与金刚石压砧（DAC）等加压方式对透明硬质材料在原位加载过程中的拉曼峰位迁移进行定量分析，进一步构建了从拉曼偏移到应力分布再到硬度估算的完整分析路径，实现了材料力学性能的空间分布可视化与硬度间接表征。

本研究将原位拉曼应力成像方法拓展应用至压砧加载环境，系统具有良好的适应性和操作稳定性，为研究材料在复杂加载条件下的应力变化提供了可靠的实验工具。

关键词： 压砧；拉曼光谱；原位测量；应力成像

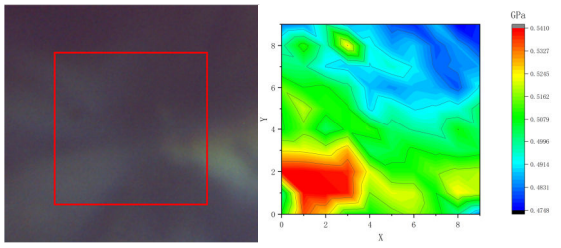


图 1 压砧加载条件下蓝宝石（Al_2O_3）应力分布图

参考文献：

[1]Pu M F, Zhang F, Liu S, Irifune T, Lei L. Tensile-strain induced phonon splitting in diamond. *Chin. Phys. B.* 2019; 28(5): 053102.

[2] Li Y, Wu B B, Liu J Y, Lei L. Stress-induced fluorescence in diamond at ultrahigh pressures and low temperatures. *Solid State Commun.* 2024; 390: 115609.

[3] Shizhao Fan, Yuhao Yin, Rong Liu, Haiyang Zhao, Zhenghui Liu, Qian Sun, Hui Yang. Polarity control and crystalline quality improvement of AlN thin films grown on Si(111) substrates by molecular beam epitaxy. *J. Appl. Phys*. 2024; 136 (14): 145301.

[4] Abiko K, Kato Y, Hohjo H, Kishida Y, Sudo E. Raman imaging of residual stress distribution in epoxy resin and metal interface. *J.Raman Spectrosc*. 2020; 51: 193–200.

基金项目：国家自然科学基金(NO. 11774247，NO. 12374013)，中央高校基本科研业务费专项资金(2020SCUNL107)
通讯作者：雷力，男，四川大学研究员，博士生导师，主要从事极端条件光谱学研究。Email：lei@scu.edu.cn

$CaO-SiO_2-TiO_2$ 三元系熔体及玻璃结构的原位高温拉曼光谱研究

刘勇[1]，尤静林[1,*]，赵玉帆[1]，陆佳雯[1]，张隆兴[1]

[1] 省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室、上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室和上海大学材料科学与工程学院，上海 200444

*Email: jlyou@163.com

以硅酸盐为主要成分的连铸结晶器保护渣，在钢铁冶金过程中起到重要作用，但传统保护渣存在的的氟化物，不仅会腐蚀设备，还造成环境污染。研究者在探究无氟保护渣时发现，TiO_2替代氟化物后生成的$CaO·SiO_2·TiO_2$晶相的结晶性与枪晶石相似[1]。因此，对$CaO-SiO_2-TiO_2$系玻璃与熔体微结构进行定性与定量分析，有助于为含钛无氟保护渣的设计提供参考。

本研究通过固相烧结法制备了CaO/SiO_2=1情况下不同TiO_2含量（TiO_2=0, 5, 10, 15, 20, 25, 30 mol%）的一系列样品，并采用气动悬浮激光加热装置[2]制备了相应成分的玻璃。测定了其在1773K 下的原位高温拉曼光谱和常温下的玻璃拉曼光谱。如图1（a）为该体系熔体的拉曼谱图，可以看出随着TiO_2含量的增加，拉曼特征峰出现红移，同时包络状的谱峰包含了丰富的微结构信息，700-1000 cm^{-1} 的特征峰归属于Ti-O_{nb}和Si-O_{nb}的伸缩振动。从图1（b）玻璃谱图中可以看出玻璃和熔体的特征峰位置和变化趋势相同，说明玻璃能够保留一部分熔体的微观结构，但是特征峰的波数和半高宽等存在差异，这是由于其内部的微结构含量不同造成的，从而表明玻璃并不能真正的反应出熔渣在高温下的微观结构信息。

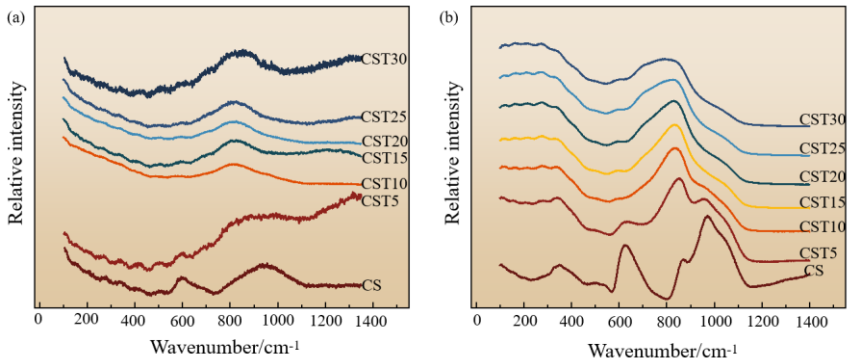


图1：(a) $CaO-SiO_2-TiO_2$系熔体1773K 时的拉曼光谱图 (b) $CaO-SiO_2-TiO_2$系玻璃拉曼光谱图

关键词：$CaO-SiO_2-TiO_2$系无氟保护渣；高温拉曼光谱；玻璃

参考文献：

[1] Nakada H, Nagata K. *ISIJ International*. **2006**, 46(3), 441-449.

[2] Gong, X Y.; Wang, J.; You, J L. *Ceramics International*. **2022**, *48*, 4911-4920.

金刚石偏振拉曼光谱研究

王泽瑜，刘静仪，王扬斌，雷力*

四川大学原子与分子物理研究所，四川 成都，610065

*Email: lei@scu.edu.cn

我们系统地开展了立方相金刚石的变温（77~573 K）与变压（常压至150 GPa）偏振拉曼光谱实验。实验中，我们选用了 (100) 晶面的金刚石压砧作为主要载体，封垫材料为铼，传压介质采用 4:1 混合的甲乙醇溶液，以确保在宽压域内的准静水环境。在 0~20 GPa 压强范围内，采用红宝石荧光作为标压材料；而在 20 GPa 以上，则基于金刚石的一阶拉曼模式进行标定。拉曼激发光源功率设定为 80 mW，光谱采集参数为单次积累时间 1 s，累计 10 次叠加。

结合对称性分析与拉曼张量理论推导，本研究揭示了其在极端条件下的声子动力学演化行为与光-声耦合机制。在立方对称性下，金刚石 F_{2g} 拉曼模式的拉曼张量形式决定了其偏振强度的方向分布；而温度与压力扰动引起晶格对称性的微扰，使拉曼张量元产生各向异性响应，进而引发偏振强度极化图变化。

通过对实验数据的拟合分析，我们提取了在不同物理条件下拉曼张量元的相对大小与相位变化。此外，实验结果与张量理论的紧密结合，实现了对金刚石拉曼强度各向异性变化的定量分析，并构建了一种可用于反演晶体对称性扰动与光学响应的新路径。该路径为高压条件下光学材料的设计与声子调控提供了重要的理论支撑。

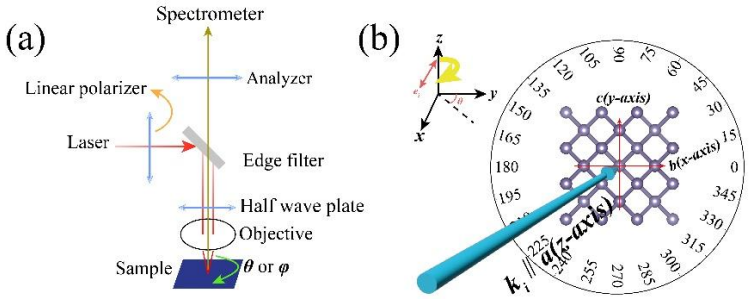


图 1 实验装置示意图

关键词： 高压；拉曼光谱；金刚石；拉曼张量

参考文献：

[1] Mossbrucker, J., and T. A. Grotjohn. "Determination of local crystal orientation of diamond using polarized Raman spectra." *Diamond and related materials* , 1966, 5(11): 1333-1343.

[2] Ding, Ying, et al. "Raman tensor of layered Td-WTe2." *The Journal of Physical Chemistry C* , 2020，124（30）: 16596-16603.

[3] Zhu, Yanming, et al. "Raman tensor of layered black arsenic." *Journal of Raman Spectroscopy* , 2020, 51(8): 1324-1330.

基金项目：国家自然科学基金(NO. 11774247，NO. 12374013)，中央高校基本科研业务费专项资金(2020SCUNL107)
通讯作者：雷力，男，四川大学研究员，博士生导师，主要从事极端光谱学研究，Email：lei@scu.edu.cn

正反斯托克斯拉曼谱学的机理研究

蒲梅芳[1]，胡启威[2]，雷力[1,*]

[1] 四川大学，成都，610065
[2] 四川轻化工大学，宜宾，644005

*Email: lei@scu.edu.cn

摘要：正反斯托克斯拉曼光谱因其非破坏性、指纹识别能力等特性已成为材料结构解析、物理性质研究等核心表征手段。而反斯托克斯拉曼光谱因其独特的激发态敏感性，成为揭示极端条件下晶格非谐效应及量子关联特性的不可替代的分析工具。通过对合金、半导体和金刚石样品的系统测量，我们发现反斯托克斯/斯托克斯强度比为研究声子布居、晶格非谐性机制起重要作用。同时我们研究了温度校正因子 γ 显著依赖于激发波长、拉曼峰位和温度范围。通过将反斯托克斯/斯托克斯测温法应用于激光加热金刚石压砧（LHDAC）实验，系统研究了多种材料在高温高压下的非谐效应。研究发现：低压区由声子散射主导强非谐效应，随着压力升高逐渐转变为以局域分子晶格热膨胀为主导的非谐效应。由于反斯托克斯散射由激发态声子布局数决定，随温度升高，反斯托克斯非谐效应大于正斯托克斯。通过声子散射可以有效控制热导率，该研究为半导体器件散热问题提出有效解决。

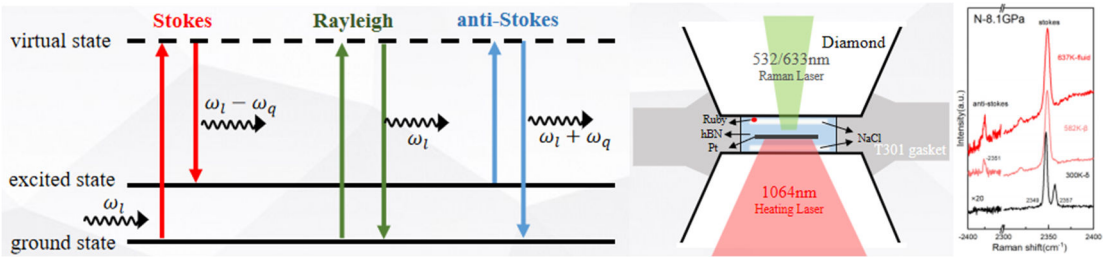


图 abc：瑞利散射、斯托克斯散射与反斯托克斯散射的能级跃迁示意图；激光加热金刚石压砧（LHDAC）样品组装示意图；流体N_2的熔化线；

关键词：β-Ga_2O_3；正反斯托克斯拉曼谱学；非谐效应；三声子、四声子耦合；声子布局数；

参考文献：

[1] Lin, Y.; Li,Lei, et al.Chin. Phys. B. 2025, 34, 057802.
[2] Zhao M.;Li,Lei, et al., Chin. Phys. B. 2023-32-090704.

致谢：感谢这两项基金支持(Grant No.12374013)、（Grant No. 2020SCUNL107).

基金项目：国家自然科学基金(NO. 11774247，NO. 12374013)，中央高校基本科研业务费专项资金(2020SCUNL107)
通讯作者：雷力，男，四川大学研究员，博士生导师，主要从事极端条件光谱学研究。Email：lei@scu.edu.cn

K_2GeO_3 熔体结构的原位拉曼光谱及理论计算研究

赵玉帆[1*]，尤静林[1*]，夏翔[1]，刘国鹏[1]，刘勇[1]

[1] 省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室、上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室和上海大学材料科学与工程学院，上海，200444

*Email: jlyou@163.com

本文利用原位高温拉曼光谱和密度泛函理论(DFT)计算研究了K_2GeO_3晶态到熔态的微结构的转变机制 (图1所示)。实验表明：K_2GeO_3晶体在常温下476和797 cm^{-1}处的拉曼特征峰，二者分别归属为$[GeO_3]^{2-}$基团中Ge-O-Ge的弯曲振动和Ge-O非桥氧的对称伸缩振动。2个峰在1323 K熔融状态下分别移动到505和782 cm^{-1}，拉曼波数大范围变化的现象是由于晶体在固液边界层转化过程中，由$[GeO_4]^{4-}$四面体形成的内部微观结构发生了改变，即Ge-O-Ge键角减小，这导致$[GeO_3]^{2-}$长链收缩[1]，说明了K_2GeO_3熔体主要由$[GeO_3]^{2-}$长链和游离的K^+构成。

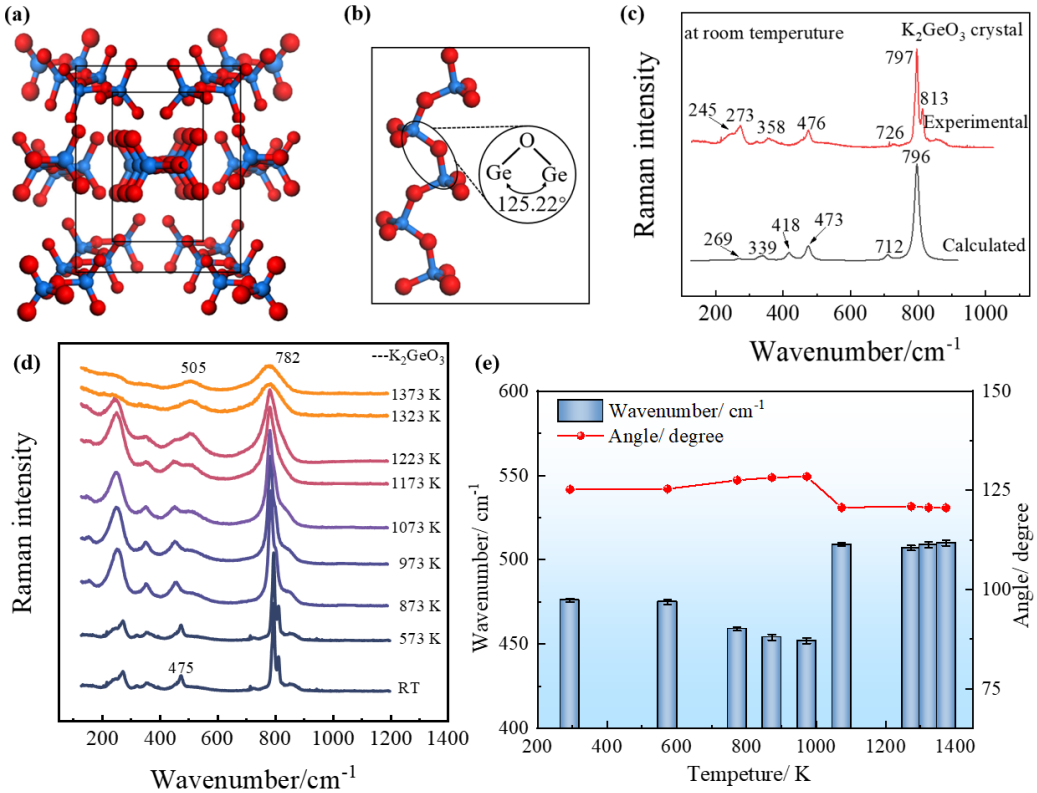


图 1：(a) K_2GeO_3 晶胞结构 (b) 晶胞中 Ge-O-Ge 键角 (c) DFT 计算与常温实验的拉曼光谱 (d) K_2GeO_3 在不同温度下的拉曼光谱 (e) 随温度的升高 Ge-O-Ge 键角与拉曼光谱的 Ge-O-Ge 桥氧振动波数的关系

关键词： K_2GeO_3晶体；高温拉曼光谱；熔体结构；密度泛函理论计算

参考文献：

[1] Zhao, Y.; You, J.; Wang, J.; Wang, M.; Tang, K.; *et al. Inorg. Chem.* **2023**, 62, 6.

基金项目：国家自然科学基金（批准号：21773152, 22003039）、科技委基础加强计划重点基础研究项目（2021-JCJQ-ZD-051-00-02）、上海市科学技术委员会项目（批准号：12520709200）和科技部中央引导基金（批准号：YDZX20173100001316）资助。

原位拉曼动态捕获 RuO_2/TiO_2 异质界面上氨分解的反向氢溢流过程

姚双双[1]，谢微[1,*]

南开大学化学学院，天津，300071

*Email: wei.xie@nankai.edu.cn

氨（NH_3）作为一种重要的无碳能源载体，钌（Ru）基催化剂在氨分解中表现出优异的活性[1]。然而，该催化过程长期受限于反应动力学，问题主要源于Ru活性位点易发生氢中毒[2]，导致催化剂活性迅速下降和耐久性丧失。针对这一挑战，本研究通过在RuO_2/TiO_2异质界面构建反向氢溢流路径，提出了一种规避氢中毒现象的创新策略。该双位点催化剂突破传统的正向氢溢流途径（从Ru到载体），利用TiO_2活化N-H键，通过界面调控将活性氢通过反向溢流（从载体到Ru）传递至Ru位点，从而在空间上实现了氨活化与氢复合过程的解耦。借助原位拉曼光谱等动态表征技术，成功捕获并验证了光热催化条件下异质界面处的反向氢溢流过程：(1) 光照下TiO_2激活N-H键裂解，生成活性氢物种；(2) 热条件下活性氢迁移至Ru位点；(3) Ru位点促进H-H的重组和解吸。该机制显著优化了Ru在催化循环中的功能，在温和条件（300 °C, 2.5 W·cm^{-2}）下实现了优异的催化性能，产氢速率高达10.17 mmol·g^{-1}·min^{-1}。本研究修正了氨分解催化剂的传统设计理念，为发展高效、抗毒化的制氢技术提供了新方向。

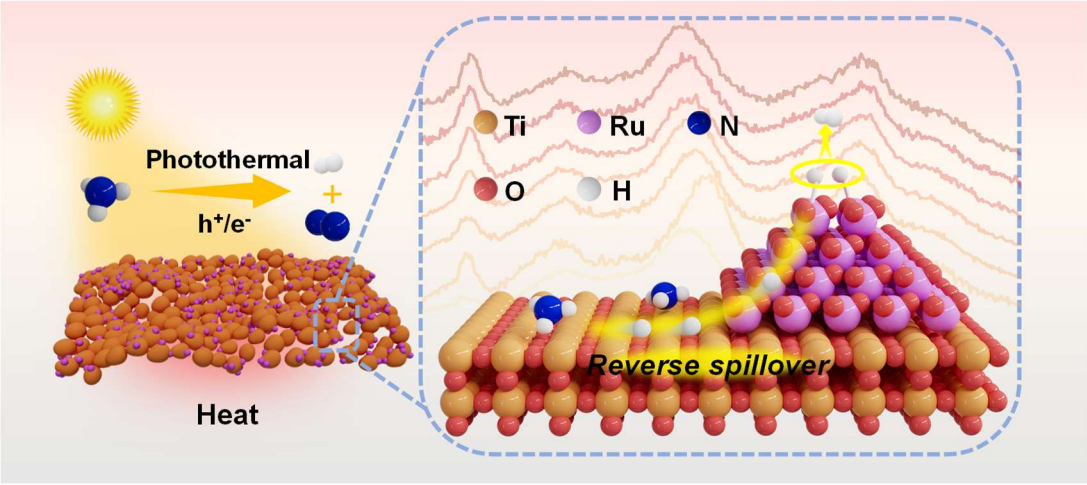


图1： RuO_2/TiO_2光热催化氨分解制氢示意图。

关键词： 氨分解；反向氢溢流；光热协同；RuO_2/TiO_2异质结；双位点催化

参考文献：

[1] Li, J.; Sheng, B.; Chen, Y.; Yang, J.; Wang, P.; Li, Y.; Yu, T.; Pan, H.; Qiu, L.; Li, Y.; Song, J.; Zhu, L.; Wang, X.; Huang, Z.; Zhou, B. *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 7393.

[2] Wu, S.; Peng, Y.; Chen, T.; Mo, J.; Large, A.; McPherson, I.; Chou, H.; Wilkinson, I.; Venturini, F.; Grinter, D.; Escorihuela, P., Held, G.; Tsang, S. *ACS Catal.* **2020**, *10*, 5614-5622.

$CaO-SiO_2-Fe_xO$ 三元系拉曼光谱及其熔体粘度相关性研究

张隆兴，尤静林*，夏翔，赵玉帆，刘国鹏

省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室、上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室和上海大学材料科学与工程学院，上海，200444

*Email: jlyou@163.com

本工作系统研究了$CaO-SiO_2-Fe_xO$三元系的粘度及其微观结构。通过结合深度神经网络（DNN）学习，我们开发了基于DNN的粘度预测模型。该模型使用包含1483个实验数据点的数据集进行训练、验证和测试（划分比例为5:2:3），覆盖了冶金熔渣的关键成分范围（SiO_2: 0-70 mol%, CaO: 0-70 mol%, Fe_xO: 0-90 mol%）。模型表现出高预测精度，决定系数（R^2）达0.9464，平均绝对误差（MAE）为0.069，能够快速、准确地预测粘度，减少了对大量实验测量的依赖。

微观结构分析（通过拉曼光谱、X射线光电子能谱和量子化学从头算方法）表明，随着铁含量的增加，硅氧四面体（SiOT）网络结构被破坏，表现为Si-O-Si键向Si-O-Fe和Fe-O-Fe键转变，并伴随粘度下降。研究进一步通过结构描述符（NBO/Si比值）定量关联了四配位中$Fe^{3+}/(Fe^{3+}+Si^{4+})$比值与熔体粘度（如图1所示）。结果表明：四配位中$Fe^{3+}/(Fe^{3+}+Si^{4+})$比值的增加非线性地提高了NBO/Si值（相关系数r=0.99）；NBO/Si值的升高即硅氧四面体网络的解聚，线性地降低了熔体粘度（r=0.96）。所建立的模型为冶金熔渣设计中的粘度优化以及地质系统中岩浆输运动力学的定量分析提供了有效的预测框架。

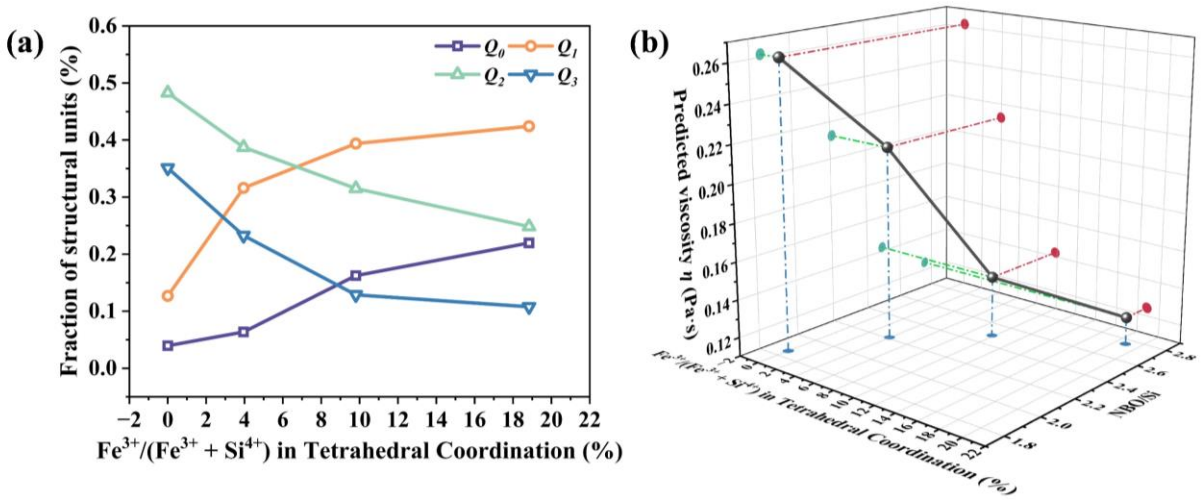


图 1：(a) 非桥氧种类及各自百分含量随四配位中 $Fe^{3+}/(Fe^{3+}+Si^{4+})$比值增加的转变；(b) 四配位中 $Fe^{3+}/(Fe^{3+}+Si^{4+})$比、NBO/Si 比与预测熔体粘度的三维相互关系模型

关键词：铁硅酸钙；深度神经网络学习；粘度预测模型；微观结构定量分析

参考文献：

[1] Tang, X.; You, J.; Zhang, F. *Ceram. Int.* **2024**, *50*, 16765-16774.

[2] Poulin, S.; Franca, R.; Moreau-Belanger, L.; Sacher. E. *J. Phys. Chem.* **2021**, *114*, 10711-10718.

激光切割碳纳米管量子点的发光及传感特性研究

任煊[1]，张利胜[1,*]

[1] 首都师范大学 物理系，北京市海淀区西三环北路 105 号，100048

*Email: 2230602012@cnu.edu.cn

富勒烯、碳纳米管和石墨烯分别构成了零维、一维和二维碳纳米材料。其中的富勒烯和石墨烯被制备成量子点，并表现出优异的发光特性[1]。在传感器、屏幕显示、激光器、红外感应等领域获得应用，并在更多领域展现出强大的应用潜力[2]。然而，碳纳米管作为典型的一维碳纳米材料，由碳纳米管制备量子点，特别是采用激光切割方法制备碳纳米管量子点尚未见报道。

本文采用激光烧蚀切割碳纳米管，制备出了量子点。研究表明，碳纳米管量子点在400 nm - 650 nm范围内出现了强的光致发光（图1），发光峰半高宽为145 nm，斯托克斯位移为100 nm，表现出了优异的发光特性。碳纳米管量子点的表面增强拉曼光谱(SERS)如图2所示，初步给出了量子点域的六边形结构主体和边缘缺陷主体结构。

在此基础上，我们初步开展了量子点对离子的传感效应的研究。随着铜离子浓度的增加，发光强度变化明显（图1）。研究表明，碳纳米管量子点是优异的离子传感器，其离子检测灵敏度可达10^{-4}M。我们将在现有研究工作的基础上，进行密集、完整的数据检测和记录，并进行建模和数据分析，获得碳纳米管量子点发光作为铜离子传感器的检测模型。同时，在SERS光谱分析的基础上已经量子点与铜离子相互作用机制和传感机制。

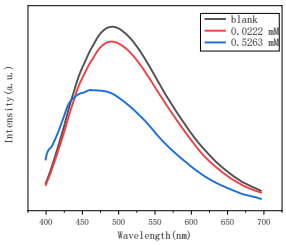


图1：碳纳米管量子点的荧光强度与铜离子浓度的关系

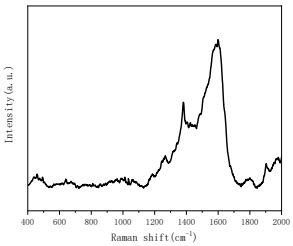


图2：碳纳米管量子点拉曼光谱

关键词：碳纳米管；量子点；光致发光；离子检测

参考文献：

[1] Pierrat, P.; Gaumet, J.-J. *Tetrahedron Lett.* **2020**, **61(49)**: 152554.

[2] Lin, J.; Xie, H.; Ye, Y. *J. Soc. Inf. Disp.* **2023**, **31(3)**: 125.

硫化亚铜、硫化铜及自掺杂铜硫化合物纳米晶的合成、转化与光催化研究

洪锦鹏，王译晨，王旭，阮伟东*

吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，中国长春，130012

*Email: ruanwd@jlu.edu.cn

硫化亚铜（Cu_2S）、硫化铜（CuS）及自掺杂铜硫化合物 $Cu_{2-x}S$（0<x<1）纳米晶在光催化、能量存储与光电子学领域具有显著的应用潜力[1,2]。本研究系统探索了上述纳米晶的合成策略、结构转化规律及其光催化性能。基于简易的合成方法，通过调控前驱体浓度等反应条件，实现了对铜硫化合物（$Cu_{2-x}S$，0≤x≤1）粒径、掺杂水平及物相转化的精准调控[3]。结合 X 射线衍射（XRD）、透射电子显微镜（TEM）及紫外–可见（UV–Vis）吸收光谱等表征技术，解析了纳米晶在不同条件下的转化路径。通过自掺杂工程策略调控晶格缺陷，显著提高了材料的载流子迁移率与光捕获能力。结果表明：相较于未掺杂体系，自掺杂铜硫化合物纳米晶的光催化活性显著增强，在光解水产氢与有机污染物降解方面表现尤为突出。本研究为铜硫基功能材料的设计合成与催化应用提供了新的设计思路。

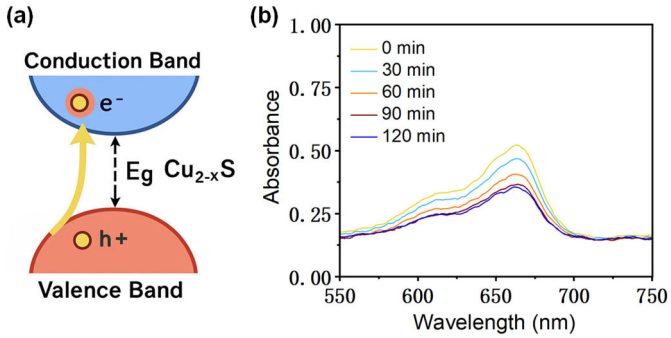


图 1: (a) 铜硫化合物能带结构及电子跃迁机制示意图；(b) Cu_2S 催化降解亚甲基蓝（MB）水溶液的紫外可见吸收光谱。

关键词： 硫化亚铜；自掺杂；光降解

参考文献：

[1] Shao, X. et al. *CrystEngComm* **2020**, *22*, 678–685.
[2] Chen, L. et al. *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 1057–1065.
[3] Sun, M. et al. *Chem. Mater.* **2021**, *33*, 8546–8558.

本研究得到吉林省科技发展计划（202302004）资助。

氧化钒量子点的合成及其对 Fe^{3+}的选择性荧光检测

王迪[1]，滕若楠[1]，段鹏威[1]，姜钧天[2]，赵冰[1]，徐雪松[2]，阮伟东[1,*]

[1] 吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，中国长春，130012
[2] 吉林大学中日联谊医院，中国长春，130033

*Email: ruanwd@jlu.edu.cn

氧化钒量子点（VO_x QDs）凭借独特的量子限域效应、可调能带结构及丰富的表面化学特性，在环境监测与生物传感领域展现显著应用潜力[1]。本研究提出一种基于乙醇溶剂热法的VO_x QDs合成新策略，聚焦其在Fe^{3+}特异性检测中的应用拓展[2]。通过TEM、XRD及FTIR等表征手段证实，所制备的VO_x QDs具备均匀的尺寸分布与稳定的光学性能，表面密集的含氧官能团为金属离子识别提供了理想的活性作用位点。研究创新性构建“开-关-开”荧光响应机制：利用Fe^{3+}与VO_x QDs表面官能团的配位作用引发荧光淬灭，再通过还原剂介入实现Fe^{3+}价态还原，促使荧光信号恢复[3]。这种双重调控机制通过荧光信号的动态变化，建立起对Fe^{3+}的特异性识别路径，有效规避其他金属离子的干扰效应。该探针具有高灵敏度、环境友好性和操作简便性，为环境监测和生物医学应用中的Fe^{3+}检测提供了一种新策略。

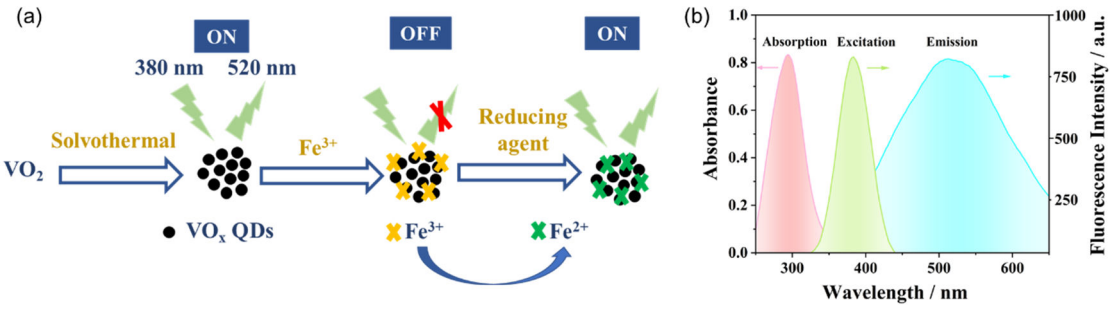


图 1: (a) 基于 VO_x QDs 的 Fe^{3+}荧光检测示意图；(b) VO_x QDs 的紫外可见吸收谱、光致发光的激发谱及在最佳激发波长下的荧光发射谱。

关键词： 氧化钒量子点；荧光探针；Fe^{3+}检测；开关开式传感

参考文献：

[1] Zhang, C. et al. *Microchem. J.* **2021**, *170*, 106702.
[2] Huang, L. et al. *ChemNanoMat* **2018**, *4*, 1048–1053.
[3] Huang, L. et al. *Anal. Chem.* **2019**, *91*, 5753–5761.

本研究得到吉林省科技发展计划（202302004）资助。

氧化钨纳米片的合成及其基于荧光探针法的铁离子检测

卢林婧，苟庆霜，韩晓霞，阮伟东*

吉林大学化学学院超分子结构与材料全国重点实验室，中国长春，130012

*Email: ruanwd@jlu.edu.cn

氧化钨作为一类重要的过渡金属氧化物，因其缺陷工程可控性，在新能源与传感领域展现出显著应用潜力。本研究系统探究了具有氧空位掺杂的氧化钨纳米片的合成、荧光性能及金属离子传感应用，旨在阐明缺陷态对材料发光行为的影响机制及其在传感领域的应用。采用二水合钨酸钠为钨源，钨酸为前驱体，通过溶剂热法在乙醇体系中成功制备了具有丰富缺陷的氧化钨纳米片[1]。将其与传统煅烧法制备的纯相氧化钨纳米颗粒对比，系统研究了氧空位引入对材料微观结构、能带特性及荧光性能的影响规律。研究表明，氧空位可通过优化载流子分离效率并抑制非辐射复合路径，有效提升辐射复合概率。进一步发现，特定金属离子能选择性地作用于材料表面缺陷位点，其中铁离子（Fe^{3+}）对荧光强度的淬灭效应尤为显著[2]。该结果为开发基于缺陷氧化钨的荧光探针提供了坚实的实验依据。

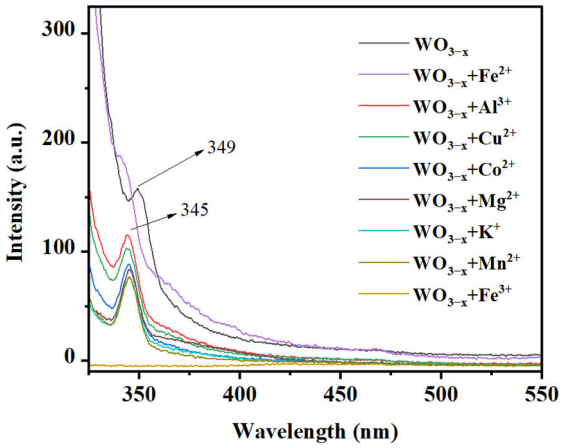


图1：不同金属阳离子作用下氧化钨纳米片荧光强度的变化曲线。

关键词：氧化钨；氧空位；荧光性能

参考文献：

[1] Du, J. et al. *Mater. Today Chem.* **2022**, *26*, 101089.

[2] Zhan, Y. et al. *Sens. Actuators, B* **2018**, *255*, 290–298.

本研究得到吉林省科技发展计划（202302004）资助。

Interfacial Coupling Induced Optical Anisotropy in 1L-MoS_2/$NbIrTe_4$ Heterostructures

Wen Ting[1,*], Li Xianchang[1]

[1] School of Electronic Information, Huzhou College, Huzhou 313000, China

*Email: wenting@zjhzu.edu.cn

Optical anisotropy in two-dimensional (2D) materials offers new opportunities for realizing polarization-sensitive luminescent devices. Importantly, in addition to exploiting naturally-occurring anisotropic 2D crystals, the construction of van der Waals heterostructures (HSs) provides an alternative effective strategy for introducing external anisotropy.[1,2] However, a systematic understanding of interface-induced anisotropy in such HSs remains lacking, which limits their further application in functional devices. Here we systematically investigate the angle-resolved photoluminescence (PL) of excitonic states X_A and X_B in a HS, composed of isotropic monolayer MoS_2 and strongly anisotropic $NbIrTe_4$. Experimental results reveal that the anisotropic potential and local strain field introduced by $NbIrTe_4$ significantly alter the in-plane symmetry of MoS_2, thereby inducing pronounced anisotropy in its excitonic emission, shown in Figure 1.[3] This study not only elucidates the physical mechanism of anisotropy modulation at van der Waals interfaces, but also provides theoretical insights and design strategies for the development of high-performance polarization-sensitive luminescent devices.

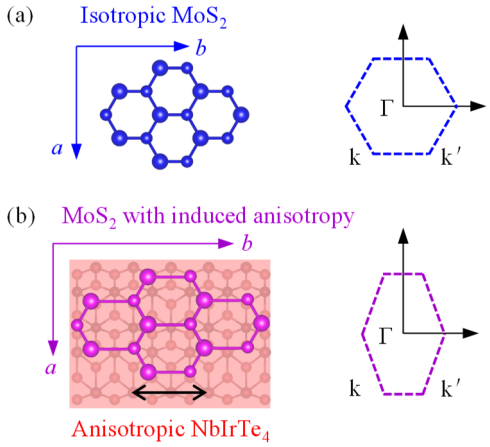


Figure 1: (a) Schematic illustration of the in-plane lattice structure of MoS_2 and its corresponding Brillouin zone projected from the in-plane lattice symmetry; (b) Illustration of the interlayer coupling in the 1L-MoS_2/$NbIrTe_4$ HS, which breaks the in-plane symmetry of the MoS_2 lattice, along with the corresponding Brillouin zone projection reflecting the modified lattice symmetry.

Key words: Anisotropy; Angle-resolved photoluminescence; Heterostructure

References:

[1] Pei, S.; Wang, Z.; Xia, J. *ACS Nano* **2022**, *16*, 11498.

[2] Sierra, J. F.; Světlík, J.; Savero Torres, W.; Camosi, L.; Herling, F.; Guillet, T.; Xu, K.; Reparaz, J. S.; Marinova, V.; Dimitrov, D.; Valenzuela, S. O. *Nat. Mater.* **2025**, *24*, 876-882.

[3] Mak, K. F.; Lee, C.; Hone, J.; Shan, J.; Heinz, T. F. *Phys. Rev. Lett.* **2010**, *105*, 136805.

$SrGeO_3$ 晶态到熔态的结构演变及其原位拉曼光谱研究

解迎芳[1,2,*]，尤静林[3]，赵玉帆[3]，陆佳雯[3]

[1] 上海电子信息职业技术学院机械与能源工程学院，上海，201411
[2] 上海电子信息职业技术学院高端装备机械可靠性与智能诊断研究中心，上海，201411
[3] 省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室、上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室和上海大学材料科学与工程学院，上海，200444

*Email: yingfangxie@163.com

α-$SrGeO_3$晶体可用于扩展固态激光器的光谱覆盖范围和调控光的偏振态。大尺寸和高质量晶体的获得对其应用至关重要[1]。本文利用原位高温拉曼光谱和密度泛函理论(DFT)计算研究了α-$SrGeO_3$晶态到熔态的微结构中链-环结构转变机制（图1所示）。实验表明：1633 K到1653 K区间拉曼特征峰的突变，即发生了由$[Ge_3O_9]^{6-}$环到$[GeO_3]_n^{2-}$链的转变。同时利用DFT计算提出了链-环结构转变的机制：熔体的微结构主要由$[GeO_3]_n^{2-}$链构成，并在相变温度下，$[GeO_3]_n^{2-}$链上桥氧原子进攻相邻Ge原子，逐渐诱发$[GeO_3]_n^{2-}$链的断裂与新$[Ge_3O_9]^{6-}$三元环生成。

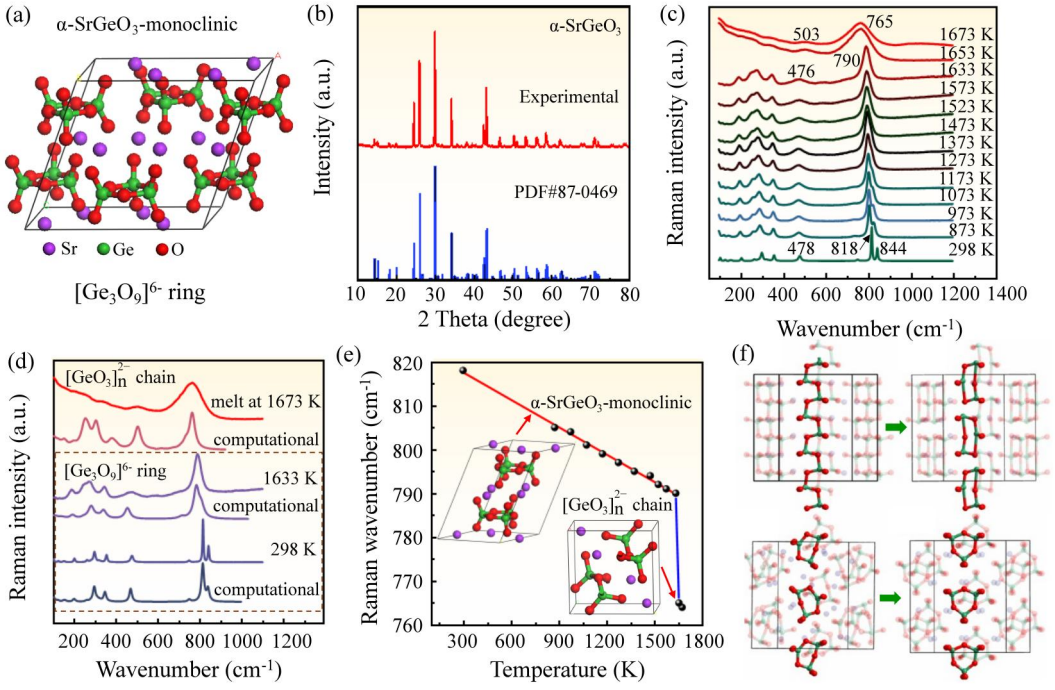


图1：(a) α-$SrGeO_3$晶胞结构及对应的(b) XRD图 (c) $SrGeO_3$在不同温度下的拉曼光谱及对应的(d)DFT计算与实验的拉曼光谱 (d) 高频区拉曼特征峰的波数与温度的变化关系 (e) 熔态到晶态链环结构转变过程

关键词： $SrGeO_3$晶体；高温拉曼光谱；熔体结构；密度泛函理论计算

参考文献：

[1] Wang, H.; Li, B.; Zhou, Y.; Zheng, G.; Zhang, X.; Wan, S. *J. Mater. Chem. C* **2024**, 12, 6.

基金项目：国家自然科学基金（批准号：21773152, 22003039）、科技委基础加强计划重点基础研究项目（2021-JCJQ-ZD-051-00-02）、上海市科学技术委员会项目（批准号：12520709200）和科技部中央引导基金（批准号：YDZX20173100001316）资助。

手性等离激元金纳米棒沉积金属有机框架的调控

王雪华[1]，张玲玲[1,*]

[1] 西安交通大学生命科学与技术学院，陕西省西安市咸宁西路 28 号，710049

*Email: linglingzhang@xjtu.edu.cn

手性等离激元金纳米结构兼具结构手性与等离激元共振特性，在圆偏振光响应、手性传感和生物医学检测中展现重要潜力[1]。本文提出一种基于手性半胱氨酸配体诱导与表面活性剂协同调控的合成策略，通过优化氯金酸、表面活性剂浓度、配体比例，实现左/旋右手性金纳米棒（L/D-GNRs）的可控制备。通过调节纳米棒的螺旋扭曲度与长径比，其局域表面等离激元共振（LSPR）峰位可在550–800 nm 范围内精准调控，圆二色性（CD）光谱的不对称因子（*g*-factor）最高达0.035（600 nm）。螺旋结构的曲率差异导致局域电磁场的非对称分布，增强了手性等离激元耦合效应。本研究建立了手性金纳米棒的结构-光学性能关联机制，为设计高性能手性光电器件、超灵敏生物传感器及圆偏振光调控材料提供了新思路。

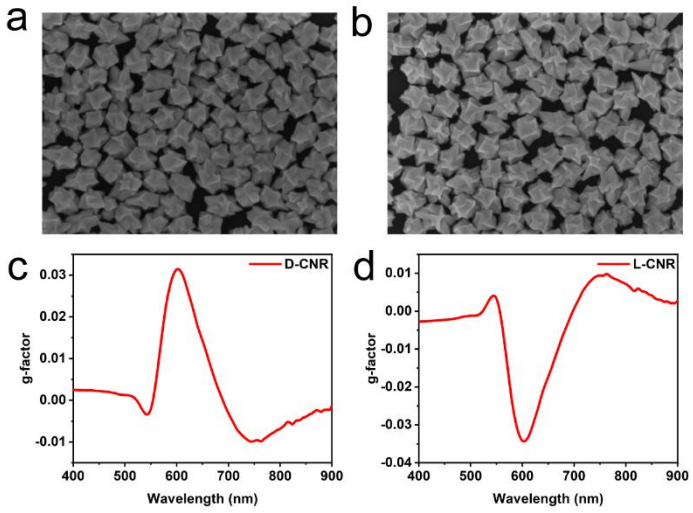


图1：手性Au NRs及其手性光学响应

关键词：手性等离激元；金纳米棒；局域表面等离激元共振；圆二色性

参考文献：

[1] Zhang, L. L.; Chen Y. L.; Zheng J. P.; Lewis G. R.; Xia X. Y.; Ringe E.; Zhang W.*; Wang J. F.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202312615.

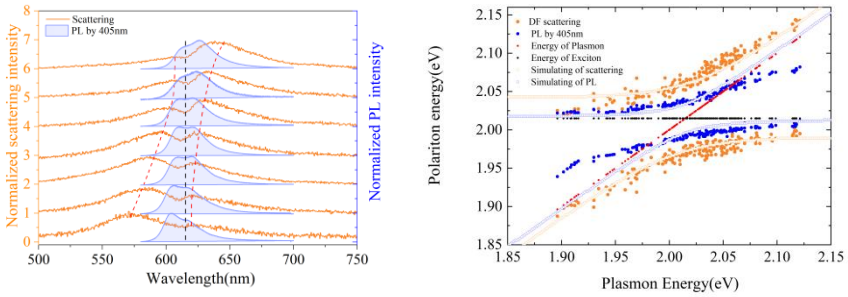
金纳米棒等离子体与单层 WS_2 激子强耦合暗场散射与光致发光（PL）光谱研究

李京[1]，尤卿章[2]，薄文静，米笑晨，王培杰[1*]

[1] 首都师范大学，西三环北路 105 号，100048

*pjwang@cnu.edu

在量子纳米光子学领域，等离激元-激子强耦合系统因其独特的量子态杂化特性，为探索光-物质相互作用的新奇特性和开发新型量子光学器件提供了重要平台。传统上，强耦合的判定主要依据散射光谱中的反交叉行为，但该方法易受等离激元多模干涉和 Fano 共振等效应的干扰。相比之下，光致发光（PL）光谱能直接反映激子态的真实能级，是验证强耦合的更可靠手段，但由于辐射效率低、信号弱等问题，相关实验观测仍具挑战性[1]。本研究构建了金纳米棒-单层 WS_2 异质结构强耦合体系，通过系统测量 150 组单个纳米棒与单层 WS_2 耦合结构的暗场散射光谱和 PL 光谱，有力地证明了明确的强耦合产生。另外，统计分析了散射光谱与 PL 光谱的双峰劈裂峰值能量分布，观测到明显的拉比劈裂。其中散射光谱拉比劈裂的平均值为 106 meV，PL 光谱拉比劈裂的平均值为 45 meV（图 B）。在 405nm 激光激发下 PL 双峰劈裂对应真实的极化激元态能级，其显著小于散射光谱拉比劈裂，原因在于 PL 光谱仅反映激子主导的辐射复合过程，避开了等离激元多模干涉的影响。利用双振子耦合模型进行数值解析计算[2]，其模拟结果与实验高度吻合（图 B）。该研究在单颗粒强耦合体系中同时实现了散射与 PL 光谱的拉比劈裂测量，为探索室温下量子光学特性提供了有力参考。



A B

图1：图A，典型单个纳米棒与单层WS_2耦合结构的暗场散射光谱及PL光谱。图B，150组单个纳米棒与单层WS_2耦合结构散射光谱及PL光谱峰值能量散点分布图，并通过理论解析计算的反交叉曲线。

关键词：拉比劈裂；强耦合；暗场散射光谱；光致发光（PL）光谱

参考文献：

[1] Baumberg, J. J. (2024); Robust consistent single quantum dot strong coupling in plasmonic nanocavities. Nature Communications, 15(1).

[2] Leng, H., Szychowski, B., Daniel, MC. *et al.* Strong coupling and induced transparency at room temperature with single quantum dots and gap plasmons. *Nat Commun* **9**, 4012 (2018).

$BaGe_4O_9$ 晶体及其熔体结构的原位拉曼光谱研究

耿健生，尤静林*，赵玉帆，陆佳雯，张隆兴，刘勇，任文娜

省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室、上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室和上海大学材料科学与工程学院，上海，200444

*Email: jlyou@163.com

$BaGe_4O_9$ 功能晶体在锂离子电池电极材料[1]、高性能 LED 荧光粉[2]等领域具有广泛应用。晶胞结构主要由[GeO_4]四面体与[GeO_6]八面体通过“共顶点”方式连接。本文通过固相烧结法制备出高纯的 $BaGe_4O_9$ 晶体，将实验拉曼光谱与密度泛函理论计算 (DFT) 相结合，利用 Materials Studio 软件对晶体进行结构优化和拉曼光谱的理论计算，对实验拉曼光谱的振动模式进行归属[3]。通过显微共焦拉曼光谱仪原位升温测得了 1673 K 的高温拉曼熔体谱，如图 1 所示。实验结果表明：随着温度升高，谱图的主要峰位向低波数发生红移与展宽，晶体的无序性不断增加，处于 875 cm^{-1} 处的谱峰归属为 Ge^{IV}-O-Ge^{VI} 非对称伸缩振动逐渐减弱，1608 K 时几乎完全消失，Ge^{IV}-O-Ge^{VI} 逐渐发生断裂。1608 K 到 1618 K 时低波数区谱峰消失，晶体发生熔化。同时拉曼特征峰发生突变，422 cm^{-1}、532 cm^{-1} 与 782 cm^{-1} 处的谱峰消失，在 497 cm^{-1} 与 823 cm^{-1} 处出现新的峰位，这是由于锗原子的配位数由六配位与四配位共存向四配位发生改变，在熔体中锗原子只以四配位的形式存在。

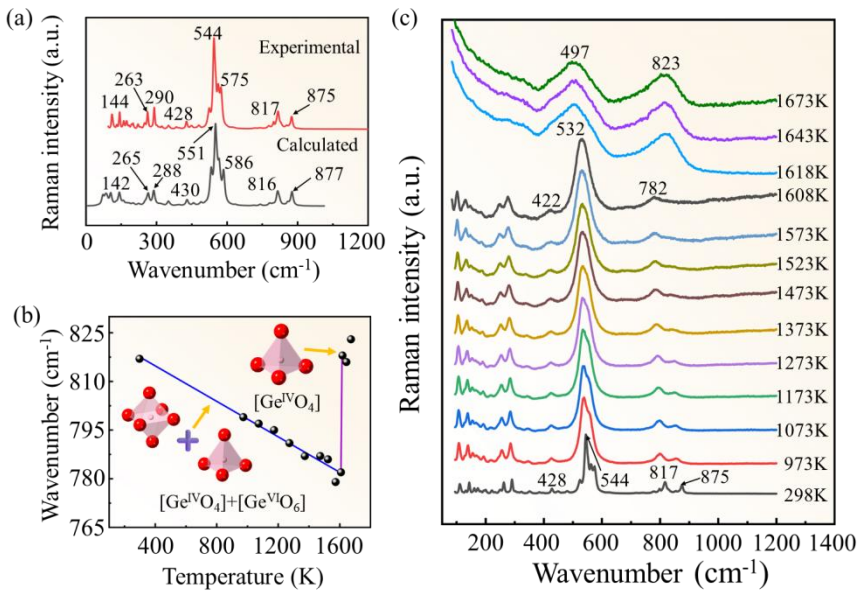


图1： (a) $BaGe_4O_9$的DFT计算与实验的拉曼光谱 (b) $BaGe_4O_9$高频区拉曼特征峰与温度的关系 (c) $BaGe_4O_9$在不同温度下的拉曼光谱

关键词： $BaGe_4O_9$晶体；高温拉曼光谱；密度泛函理论；熔体结构

参考文献：

[1] Li, W.; Yin, Y.; Xin, S.; Song, W.*Energy Environ. Sci*. **2012**, 5, 8007.
[2] Ji, C.; Huang, Z.; Tian, X.; Xie, W. *Dyes Pigm*. **2019**, 160, 772.
[3] Zhao, Y.; You, J.; Wang, J.; Wang, M. *Inorg. Chem*. **2023**, 62, 10905.

β-Ga_2O_3晶体结构的原位升温拉曼光谱研究

任文娜，尤静林*，张隆兴，耿健生，夏翔，刘勇，陆佳雯

[1] 省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室，上海市钢铁冶金新技术开发应用重点实验室，上海大学材料科学与工程学院，上海，200444，中国

*Email: jlyou@163.com

氧化镓（Ga_2O_3）在多个领域具有重要的应用价值，如功率电子器、高温传感器等，研究其微观结构对于深入理解材料的电学、光学性能以及热稳定性具有重要意义。氧化镓有五种不同的晶型（α-Ga_2O_3）、单斜相（β-Ga_2O_3）、缺陷尖晶石相（γ-Ga_2O_3）、立方相（δ-Ga_2O_3）和六方相（ε-Ga_2O_3）。其中 β-Ga_2O_3 为单斜晶相，空间群为 C2/m，其中 Ga 原子占据八面体和四面体间隙位，形成独特的配位环境。其主要结构单元是由[GaO_6]八面体的双链沿 b 轴延伸，链条通过[GaO_4]四面体连接，这种特殊的连接方式赋予了其高熔点（2073 K）、宽禁带（8 eV）和优异的热稳定性。本研究中使用卤素灯对 β-Ga_2O_3 进行升温，并对其进行原位拉曼测试。同时，我们采用密度泛函理论（DFT）对 β-Ga_2O_3 的拉曼光谱活性振动波数进行计算，并根据计算结果对其振动模式进行归属。

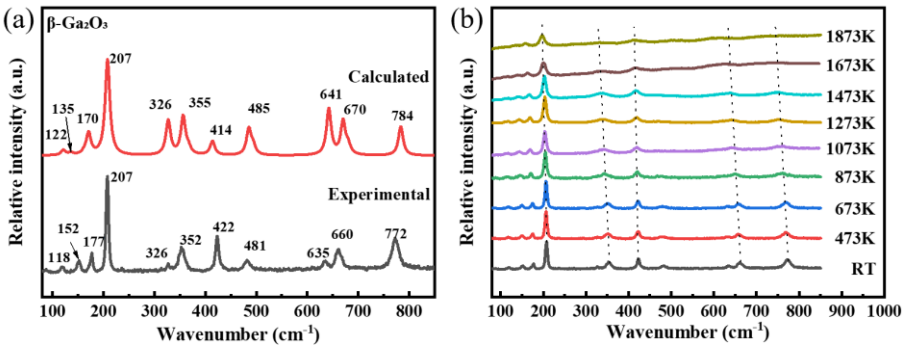


图1：（a）β-Ga_2O_3实验和计算模拟拉曼谱图；（b）β-Ga_2O_3升温至1873 K的原位升温拉曼谱图

根据图1（a）中的计算结果及实验拉曼光谱进行振动模式归属，在低频区（100-400 cm^{-1}）207和352 cm^{-1}处特征峰归属于晶格振动，涉及Ga-O键的集体平移和转动模式，反映GaO_6八面体骨架的低频扭曲和晶格刚性。在中频区（400-600 cm^{-1}）422 cm^{-1}处特征峰对应于O-Ga-O的不对称弯曲振动。在高频区（600-800 cm^{-1}）660和772 cm^{-1}处特征峰归属于Ga-O的不对称伸缩振动。图1（b）展示了β-Ga_2O_3在升温至1873 K过程中的原位拉曼光谱变化，结果表明在此温度范围内未出现新的特征峰，说明材料未发生新的固态相变，晶体结构稳定。随着温度的升高，所有特征峰均表现出明显的红移现象，同时，谱峰逐渐展宽。此外，207 cm^{-1}附近的峰的相对强度随温度的升高而减弱。这些共同变化表明β-Ga_2O_3在高温下仍比较稳定。

关键词：氧化镓；原位升温拉曼光谱；密度泛函理论

参考文献：

[1] Wu, W.; Huang H.; Wang, Y.; Han, K. *J. Phys. D: Appl. Phys*. **2025**. *58*. 063003.
[2] Zhao, Y.; You, J.; Wang, J.; Wang, M. *Inorg. Chem*. **2023**, *62*, 10905.

各向异性层状材料面内角分辨拉曼光谱的定量预测

Quantitatively Predicting Angle-Resolved Polarized Raman Intensity of Anisotropic Layered Materials

谢佳良[1]，刘涛[1]，冷雨辰[1]，梅瑞[1]，伍恒[1]，柳晨凯[1]，王佳宏[2]，李洋[2]，喻学锋[2]，林妙玲[1,*]，谭平恒[1,*]

[1] 半导体芯片物理与技术全国重点实验室，中国科学院半导体研究所，北京，100083
[2] 深圳二维原子晶体制备技术工程研究中心，中国科学院深圳先进技术研究院，深圳，518055
*Email: linmiaoling@semi.ac.cn ; phtan@semi.ac.cn

角分辨偏振拉曼（ARPR）光谱为研究各向异性层状材料（ALMs）的光学各向异性以及与结构对称性相关的电子-光子/电子-声子耦合机制提供了重要视角。然而，ALM薄片的ARPR响应一直表现出复杂的厚度、激发波长以及介电环境依赖性，这极大地阻碍了对其的深入理解和预测。本研究以黑磷（BP）（≥20纳米）薄片和四层Td相碲化钨（Td-WTe_2）为例，引入了本征拉曼张量（$\boldsymbol{R}^{int}$）的概念。通过实验测定的面内复折射率并综合考虑ALM薄片内部的双折射效应、线性二向色性和多层结构的层间干涉效应对相应声子模式$\boldsymbol{R}^{int}$复张量元的影响，本研究提出了预测厚层及原子级厚度ALM薄片ARPR强度轮廓的有效方法。理论表明，有效拉曼张量（$\boldsymbol{R}^{eff}$）的张量元与ALM材料内部的入射光和散射光的偏振矢量直接相关。通过$\boldsymbol{R}^{eff}$可定量预测ALM薄片的ARPR响应，结果显示ARPR强度轮廓对ALM层厚、介质衬底和激发波长存在复杂的依赖关系。此理论框架可进一步推广至其他从原子级厚度到体相的ALM薄片且并不依赖于具体的电子能带性质，从而全面预测ALMs的ARPR响应。

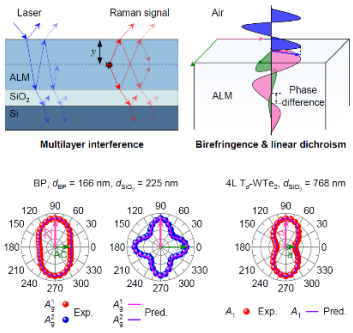


图1：本研究发展了定量预测少层及体相ALMs的ARPR强度轮廓的方法。通过考虑双折射、线性二向色性及光学干涉等效应确定ALM中的本征拉曼张量元，这为分析不同ALMs的ARPR响应建立了理论框架。

关键词：各向异性层状材料；角分辨拉曼光谱；光学各向异性；复拉曼张量

参考文献：

[1] Xie, J.; Liu, T; Lin, M; Tan, P., et al. *Adv. Mater.* **2025**. DOI: 10.1002/adma.202506241.

$Fe_{0.25}TaSe_2$中的电荷密度波和反铁磁有序态的拉曼光谱研究

郭晓[1,2]、田宗葵[1]、夏庆林[1]、聂耀庄[1]、黄寒[1*]

[1]物理学院，中南大学，长沙 410083

[2]半导体物理与芯片技术国家重点实验室，半导体研究所，中国科学院，北京 100083

*Email: physhh@csu.edu.cn

在TMDCs中插层磁性原子是一种有效调控材料的电学，光学，磁学等性质的有效方法。深入理解其中声子参与的多体相互作用也是此类研究的重点之一[1-3]。在本项研究中，我们通过CVT法生长了高质量的Fe原子插层的$Fe_{0.25}TaSe_2$晶体。利用FFM以及TEM验证了其存在相对于$TaSe_2$层的2a × 2a长周期的Fe插层超结构。通过PPMS，GIXRD，变温电阻率和变温拉曼光谱等测量确认$Fe_{0.25}TaSe_2$中在170 K以下存在电荷密度波以及在130 K以下发生的自旋声子耦合行为。此外，我们发现在经过Fe原子的插层后，$Fe_{0.25}TaSe_2$的电荷密度波相变温度相比于$TaSe_2$由90 K提高至170 K。我们还发现，由于Fe的自旋有序态以及$TaSe_2$层的电荷密度波态对晶格重排有着竞争互扰关系。在奈尔温度以下，自旋-声子模SPM2声子的自旋声子耦合行为有着异常的随温度降低的峰宽展宽现象。我们的发现对二维磁性材料中的局域自旋和电子态对晶格的调制研究提供了新的见解。

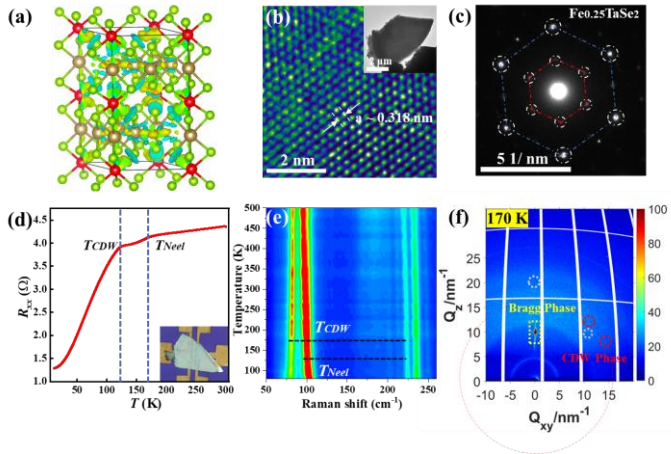


图1：插层$Fe_{0.25}TaSe_2$的电荷密度波态和反铁磁态相变过程的谱学研究。(a), DFT计算的$Fe_{0.25}TaSe_2$的差分电荷图；(b), $Fe_{0.25}TaSe_2$的HRTEM图像；(c), $Fe_{0.25}TaSe_2$的EDS图像；(d), 变温电阻率测量，反映了在130 K和170 K存在反铁磁态和电荷密度波相变过程；(e), $Fe_{0.25}TaSe_2$的变温拉曼光谱彩图，显示出两个明显的相变过程；(f), $Fe_{0.25}TaSe_2$在170 K的GIXRD图像，新出现了CDW晶格衍射点。

关键词：拉曼光谱；插层二维材料；自旋声子耦合；电荷密度波

参考文献：

[1] Guo, X.; Tian, Q. W.; Wang, Y. S.; et. al., *Carbon*, **2022**, 190, 312-318.

[2] Guo, X.; Liao, J. J.; Yang, D. B.; et. al., *Appl. Phys. Lett.* **2024**, 124, 241602.

[3] Guo, X.; Wang, Y. S.; You, S. W.; et. al., *Carbon Lett.* **2023**, 33, 1359-1365.

基于格拉姆角场增强（GAF-Enhance）与卷积神经网络的拉曼光谱识别算法：低信噪比，小数据库，可解释性 CNN 方法

李可清[1,2]，杨慕紫[2]，谢泽中[2]，李明阳[4]，杨皓[3]，陈建[2,*]

[1]中山大学化学学院，广州市番禺区大学城外环东路 132 号，510006
[2]中山大学分析测试中心，广州市新港西路 135 号中山大学测试大楼，510275
[3]广西大学化学化工学院，南宁市大学路 100 号，530004
[4]中山大学化学工程与技术学院，广东省珠海市唐家湾中山大学珠海校区，519082

*Email:puscj@mail.sysu.edu.cn

本研究提出使用格拉姆角场增强（GAF-Enhance）进行卷积神经网络训练的方法。相较于传统[1]中直接对原始数据的增强来解决拉曼光谱的数据库较少的问题，本文直接对一维拉曼光谱变换为二维后的图像进行对比度和亮度的增强，在纹理特征上增强了变换后的图像，使得模型在小样本和低信噪比的情况下依然有较好的识别能力。研究使用的原始数据包括12种常见有机小分子与KOH水溶液拉曼光谱以及来自Kaggle网站的公开数据集[2]进行训练和验证，前者在盲测集的准确率可以达到94%，后者的在盲测集的准确率可以达到88.64%，展示了GAF-Enhance算法在卷积神经网络以及拉曼光谱识别上的应用潜力。

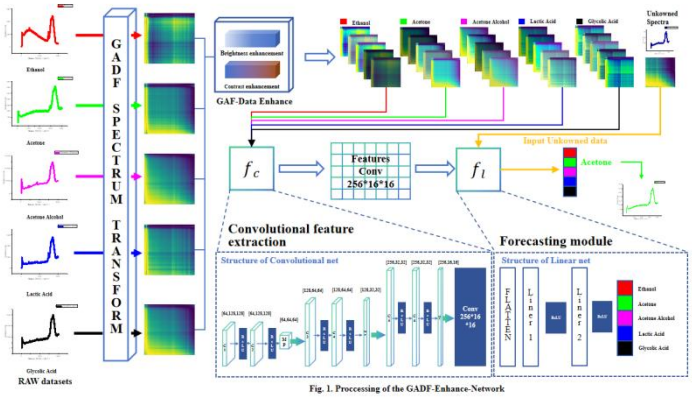


Fig. 1. Processing of the GADF-Enhance-Network

图1：GADF-Enhance卷积神经网络的工作流程

关键词：格拉姆角场增强（GAF-Enhance）；卷积神经网络（CNN）；拉曼光谱；有机小分子检测

参考文献：

[1]Wang Qiaoyun, Pian Feifei, Wang Mingxuan, Song Shuai, Li Zhigang, Shan Peng & Ma Zhenhe.(2022).Spectrochimica Acta PartA :Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 275,121189-121189.

[2]Hirotsugu Hiramatsu Liquid Chromatography Raman Spectroscopy[EB/OL].[2020.10.21]. https://www.kaggle.com/datasets/sergioalejandrod/raman-spectroscopy

基于石墨烯边缘扫描的共聚焦拉曼显微镜横向空间分辨率的定量测定

Quantitative Measurement of Lateral Spatial Resolution in confocal Raman Microscope via Graphene Edge Scanning

刘涛[1,2]，王钟杰[1,2]，刘雪璐[1,2]，林妙玲[1,2]，谭平恒[1,2,*]

[1] 半导体芯片物理与技术全国重点实验室，中国科学院半导体研究所，北京，100083
[2] 材料科学与光电工程中心&中国科学院拓扑量子计算卓越创新中心，中国科学院大学，北京，100049
*Email: phtan@semi.ac.cn

横向空间分辨率（LSR）是共聚焦拉曼显微镜的核心指标，它决定了系统在微米乃至纳米尺度上解析精细结构与化学信息的能力。本研究提出一种定量测定方法：沿石墨烯边缘进行线扫描，分别获取面积相关的 G 模和边缘长度相关的 D 模的强度分布曲线，从而提取共聚焦拉曼显微镜的 LSR。实验选用数值孔径介于 0.25–0.90 的系列物镜，所得 LSR 实验值均略高于理论衍射极限，差异源于有限大小的共焦孔径。结果进一步表明，为获得最佳分辨率，必须确保激光精确聚焦并将光束扩束至物镜入瞳直径；任何离焦或光束缩径都会显著降低性能。该方法为共聚焦拉曼显微镜 LSR 的定量评估提供了简便而可靠的手段，亦可推广至其他二维材料及多种实验条件。

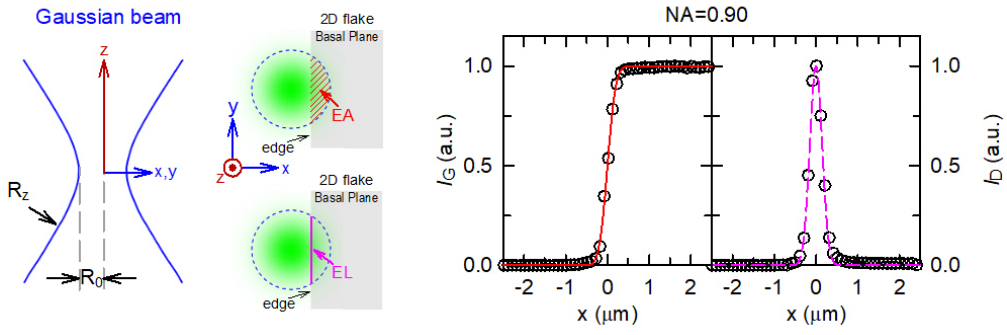


图1：本研究提出了一种新颖且定量的方法，以单层石墨烯边缘为参照，通过分析对面积敏感的G模和对边缘长度敏感的D模，构建了稳健的横向分辨率（LSR）评估框架，并为提升拉曼成像性能提供了实用指导。

关键词：共聚焦拉曼显微镜；横向空间分辨率；石墨烯边缘扫描；衍射极限

参考文献：

[1] Liu, T.; Wang, Z.-J; Liu., X.-L., Lin, M.-L.; Tan, P.-H. **2025**, to be published.

BP/MoS_2 异质结中 MoS_2 组分的各向异性拉曼光谱

张紫涵 [1,2,*]，柳晨凯 [1,2]，谢佳良 [1,2]，梅瑞 [1,2]，刘涛 [1,2]，
林妙玲 [1,2]，谭平恒 [1,2]

[1] 中国科学院半导体研究所，半导体芯片物理与技术全国重点实验室，北京，100083
[2] 中国科学院大学，材料与光电研究中心，北京，100049

*Email: zzh@semi.ac.cn

在考虑双折射效应、线性二向色性以及光学腔效应基础上，黑磷的角分辨拉曼光谱已经可以得到定量预测[1]。黑磷等各向异性层状材料（ALMs）可与各向同性材料集成形成范德华异质结（vdWHs），在偏振光探测领域具有重要应用价值。在这类异质结中，各向异性组分的光学各向异性如何影响各向同性组分的拉曼响应，仍未得到充分的研究和理解。本研究通过角分辨偏振拉曼光谱观测到：黑磷/单层二硫化钼（BP/1LM）范德华异质结中，单层二硫化钼组分的拉曼响应呈现显著的各向异性，其A_1'和E'模的强度与黑磷组分拉曼模强度随角度的变化特征高度一致[2]。本研究全面考虑黑磷的双折射效应、线性二向色性以及多层结构中的干涉效应，通过理论计算，成功复现了实验结果，并证实了单层二硫化钼组分的拉曼响应与黑磷组分厚度和激发波长的依赖关系。本研究为理解和设计由各向同性与各向异性二维材料构成的异质结中的光学各向异性提供了理论框架。

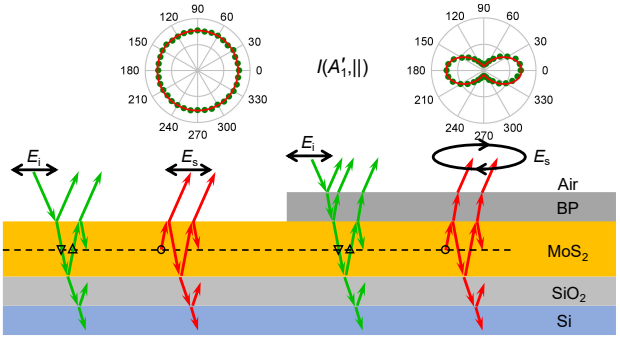


图1：1LM和BP/1LM异质结中1LM组分A_1'模的ARPR强度轮廓；
入射光和拉曼散射光在多层介质结构中的干涉

关键词：角分辨偏振拉曼散射；各向异性层状材料；范德华异质结；双折射效应；线性二向色性；干涉效应

参考文献：

[1] Xie, J.-L.; Liu, T.; Leng, Y.-C.; Mei, R.; Wu, H.; Liu, C.-K.; Wang, J.-H.; Li, Y.; Yu, X.-F.; Lin, M.-L.; Tan, P.-H. Adv. Mater. **2025**, DOI: 10.1002/adma.202506241.
[2] Zhang, Z.-H.; Liu, C.-K.; Xie, J.-L.; Mei, R.; Liu, T.; Lin, M.-L.; Tan, P.-H. **2025**, to be published.

面向手持光谱仪拉曼光谱重建的小样本深度学习策略研究

孙昊冉[1]，赵伟光[2]，张慧娟[1]，赵艳[1]，蒋毅坚[1]，闫胤洲[1,*]

[1] 北京工业大学，物理与光电工程学院，北京, 100124
[2] 北京山河湾谷创新学院，北京, 100124
*Email: yyan@bjut.edu.cn

拉曼光谱作为光学检测技术，可提供分子振动指纹信息。手持光谱仪的高紧凑性为拉曼光谱现场检测提供了可能，但需要较高的激发光功率克服 CMOS 探测器的热噪声干扰，易引起待检物损伤。研究开发了一种融合残差网络与 U-Net 结构的深度学习算法（ResUNet）用于重建手持光谱仪低功率激发下低信噪比拉曼光谱[1]。该深度学习模型通过预设的小样本拉曼光谱数据集进行训练，该数据集包含 30 种代表性物质，每种物质采集两种不同信噪比范围（SNR=10-20, SNR=20-60）下的光谱，最大限度覆盖光谱仪探测波数与强度范围。为了评估训练效果，引入两项光谱差异评价标准：均方误差（MSE）和结构相似性指数（SSIM）。与 Savitzky-Golay（S-G）滤波器和小波变换（WT）算法相比，ResUNet 模型具有更优异的去噪性能，重建光谱 MSE 和 SSIM 分别达到 0.003038 和 0.7124。为了进一步评估拉曼特征峰重建的准确性，引入拉曼光谱特征峰 F1-score 指标，将重建拉曼峰与参考拉曼峰进行真阳（正确重建）、假阳（错误重建）和假阴（重建失败）判断，并以此迭代优化训练模型，最终获得了 F1-score 为 77.23%的重建模型。采用该模型能够在不损失光谱信噪比的前提下，将激发光功率从 500 mW 降低至 18 mW。同时，实现用于物质判别的拉曼特征主峰准确重建，避免了手持光谱仪在高激发光功率工作条件下对样品产生的热损伤，为低成本手持式光谱仪的高灵敏现场无损检测提供了全新的解决方案。

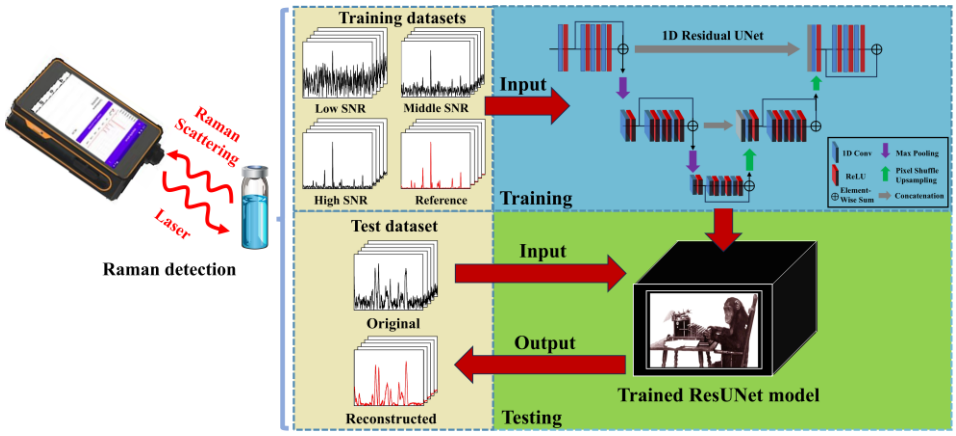


Figure 1: ResUNet model workflow for training and reconstruction of Raman spectra with varied SNRs acquired from a handheld spectrometer.

关键词： 深度学习；拉曼光谱；光谱重建；手持光谱仪

参考文献：

[1] Sun, H. R.; Zhao, W. G.; Zhang, H. J.; Zhao, Y.; Jiang, Y. J.; Yan, Y. Z. *J. Raman Spectrosc.* **2025**, accepted.

Tunable dual-mode resonant excitation of dumbbell-shaped structures in the mid-infrared band

哑铃型结构在中红外波段下的可调制双模式共振激发

江涛[1]，王蒙[1,*]，李泽[1,*]

内蒙古大学物理科学与技术学院，内蒙古自治区呼和浩特市赛罕区大学西街 235 号，010021

*Email: taojiang@mail.imu.edu.cn

近年来，中红外波段下的超表面因为其在气体检测，介电传感等领域具有广泛的应用前景，成为了研究热点。研究人员在超表面结构上激发了许多模式共振，其中激发 BIC 与 Anapole 模式共振最让人兴奋。在本文提出了一种由两个不对称参数共同作用的二聚体哑铃形超表面结构，该结构创新性地引入了两个独立的不对称参数。在中红外波段下，该超表面能够同时展示出 QBIC 模式与 Anapole 模式。更为重要的是，通过调节这两个不对称参数，可以实现对这两种模式峰值的独立调控，突破了传统单峰调制的性能限制。在介电环境传感研究中，该超表面结构展现出了卓越的性能，我们对不同形状的哑铃型超表面结构传感灵敏度进行了深入研究，模拟计算结果表明，圆形双哑铃型结构具有传感高灵敏性，灵敏度达到 20930GHz/RIU。这项研究为超表面结构在多模式调控和功能化应用方面提供了新的设计思路。

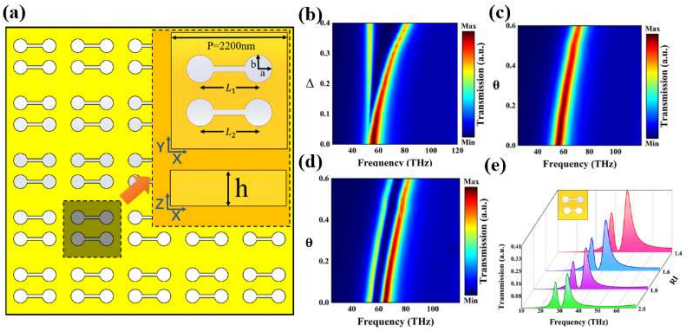


图1：(a) 一维超表面结构示意图；(b) $\theta = 0, \Delta$ 参数变化热图；(c) $\Delta = 0, \theta$ 参数变化热图；(d) $\Delta = 0.2, \theta$ 参数变化热图；(e) 圆形结构不对称参数 $\Delta = 0.2$在不同折射率下双峰共振图

关键词：中红外传感；QBIC模式；Anapole模式；两个不对称性

参考文献：

[1] Feng J, Wang X, Shi W, Fan F, Chang S. *Nanophotonics*. 2024;13(21): 4007-4017.

[2] Sun Y, Chen Y, Qin X, Xu N, Wang B-X. *Appl Phys Lett*. 2025;126(20):201701.

利用原子轨道重叠积分描述等离激元光电荷转移过程

吴泰锐[1]，吴德印[1,*]

[1] 厦门大学化学化工学院，福建 厦门，361005

*Email: dywu@xmu.edu.cn

利用等离激元介导化学反应，可诱导分子在激发态条件下发生化学反应。一方面能在温和条件下进行，另一方面能促使反应沿特定路径发生。利用币族金属金银铜，构建一定的纳米间隙结构，在可见光下能发生局域表面等离激元共振，进而形成局域光电场增强和化学反应热点，促进光和物质间的相互作用。

然而在等离激元光化学的理论计算方面，同时描述金属的连续轨道和分子的离散轨道存在一定的困难。大部分研究者使用的簇模型，难以表达金属能带的轨道连续性。为解决这一问题，部分研究者使用了胶冻模型来描述金属能带连续性，但使用这种方法描述金属的轨道以及金属与分子间的相互作用上仍存在困难。也有少部分研究者使用周期性模型来进行描述，但几乎都聚焦于材料本身的光吸收，缺少对金属-分子间的光电荷转移研究。

在本工作中，我们从含时微扰理论出发，引入分子轨道和复合体系轨道的重叠积分，从而可以在第一性原理基础上描述周期性模型中，金属-分子间的光电荷转移吸收系数。我们将其称为投影吸收系数。使用这种方法，我们成功地描述了在Fe掺杂的Au(100)上，末端吸附和侧端吸附的氮气分子光吸收差异。在进行投影前，两者相差很多倍，如图1a和1b所示，两者难以进行比较；在进行投影后，两者能很好地进行比较，如图1c和1d所示。对于侧端吸附构型，在较低能量和更宽能量范围，在可见光区激发光有更好的吸收效率。我们的工作为等离激元诱导光电荷转移的理论方法提供了新思路，对发展等离激元光电化学理论方法中进一步描述电位、覆盖度和电化学界面中的光电荷转移反应有重要的潜力。

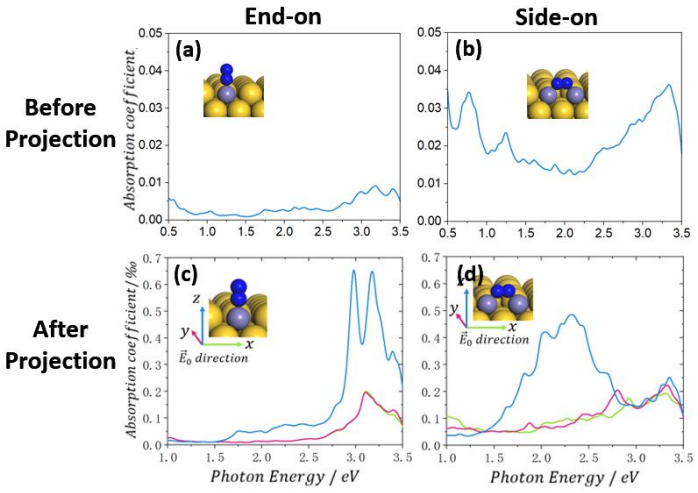


图1. Fe掺杂的Au(100)表面上，投影前后分别在单端和侧端吸附构型中与氮气分子相关的光吸收系数。投影前(a)单端和(b)侧端；投影后(c)单端和(d)侧端。

关键词： 等离激元，吸收系数，理论方法，光电荷转移，氮气还原

基于金刚石拉曼转换的光谱窄化研究

丁洁[1,2*]，蔡云鹏[1,2]，白振旭[1,2]

[1]河北工业大学，天津市北辰区西平道 5340 号，300401
[2]河北工业大学创新研究院（石家庄），石家庄， 050299

*Email: dingjie@hebut.edu.cn

金刚石作为一种出色的拉曼晶体，不仅拥有极宽的透射光谱（>2.3 m）、高的拉曼增益系数（~10 cm/GW），而且结合已知的最大的晶体拉曼频移（1332.3 cm^{-1}）及超高的热导率（>2000 Wm-1k-1），成为了目前拉曼激光器的有效增益介质。我们针对腔内金刚石拉曼转换过程展开研究，建立了倍频功率随温度变化的理论模型，分析了外腔金刚石拉曼倍频激光器的线宽压缩特性。同时，通过对受激拉曼散射和倍频过程的分析，论证了线宽压缩的机理。最终，实现了外腔泵浦的连续波可调谐金刚石拉曼激光器。结合受激拉曼散射技术与二次谐波生成技术，完成4.55 W的可见光输出。利用自建的F-P标准具，测得在40 W泵浦功率下，输出光谱线宽从4.66 GHz压缩到456 MHz。

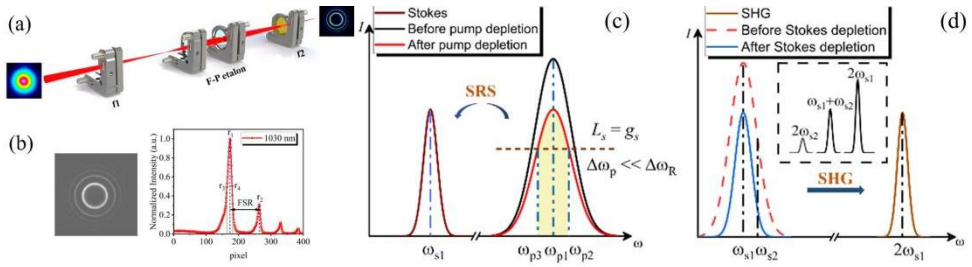


图1：(a)测量激光线宽的实验装置示意图 (b)测量干涉图和散点拟合图 (c) SRS窄化示意图 (d) SHG处模态抑制机制图

关键词：拉曼；金刚石；光谱窄化；非线性

参考文献：

[1] Zhang, S.; Li, S.; Zhou, W.; Zheng, L. *Chem. Phys.* **2011**, *135*, 14304.Yunpeng Cai, Yaxuan Duan, Hui Chen, Bingzheng Yan, Yaoyao Qi, Zhenxu Bai, Yulei Wang, Zhiwei Lu, Jie Ding*, All-solid continuous-wave Nd: YVO4-diamond intracavity Raman laser, Functional Diamond, 2024, 4, 1, 2416188.

[2] Yunpeng Cai; Hui Chen; Feng Gao; Zhenxu Bai;, Yaoyao Qi; Yulei Wang; Zhiwei Lu; Jie Ding*; Ultra-narrow linewidth in continuous-wave external cavity diamond Raman laser, Diamond and Related Materials, 2024, 146, 111254.