

北京大学无机化学研究所和中国科学院
福建物质结构研究所双边学术交流会

会议手册

主办单位：中国科学院福建物质结构研究所

承办单位：结构化学国家重点实验室

福建·福州

2020年12月26—27日

一、日程安排表

日期：2020年12月26-27日

地点：化学楼四楼报告厅

日期	时间	内容	主持人
12月26日下午	13:40-14:00	合影（化学楼大门台阶前）	
	14:00-14:15	开幕式、领导讲话	郭国聪
	14:15-14:40	IL-01 张亚文（北京大学） 氧化铈负载金属纳米催化材料的界面效应调控及应用	王瑞虎
	14:40-15:05	IL-02 孙庆福（福建物构所） 仿生配位自组装：结构与功能进展	
	15:05-15:30	IL-03 张磊（福建物构所） 金属氧簇的配位延迟水解合成与结构调控	
	15:30-15:45	休息	
	15:45-16:10	IL-04 王炳武（北京大学） 分子磁性研究	朱起龙
	16:10-16:35	IL-05 徐刚（福建物构所） 表面全官能团化的二维材料	
	16:35-17:00	IL-06 黄闻亮（北京大学） f区元素非寻常氧化态化学	吴明燕
	17:00-17:25	IL-07 孙志华（福建物构所） 铁电半导体材料与器件	

日期	时间	内容	主持人
12月27日上午	09:00-09:25	IL-08 李彦（北京大学） 单壁碳纳米管的结构可控生长	黄伟国
	09:25-09:50	IL-09 王明盛（福建物构所） 光致变色化合物的设计合成	
	09:50-10:15	IL-10 刘志伟（北京大学） 稀土配合物电致发光	
	10:15-10:30	休息	
	10:30-10:55	IL-11 刘天赋（福建物构所） 基于氢键组装的多孔框架材料	徐忠宁
	10:55-11:20	IL-12 郑捷（北京大学） 稀土储氢材料新功能探索	
	11:20-11:45	IL-13 袁大强（福建物构所） 晶态分子笼的设计合成	

二、 会议摘要及报告人简历

氧化铈负载金属纳米催化材料的界面效应调控及应用

张亚文*

北京分子科学国家实验室，北京大学稀土材料化学及应用国家重点实验室，北京大学化学与分子工程学院，北京 100871，中国

*Email: ywzhang@pku.edu.cn

氧化铈负载的金属催化剂在诸如催化转换器、水汽变换以及乙醇或柴油燃料的重整等工业反应中有着重要的应用。然而在纳米尺度上，尤其是在 1 纳米以下的范围内，研究者对金属-载体的界面结构对催化性能的影响的作用机制的认识依然十分模糊，也因此吸引了广泛的研究兴趣^[1-3]。在本报告中，我们将围绕三个典型碳一催化反应，包括 CO 氧化、CO₂ 加氢以及水汽变换反应，讨论氧化铈负载的贵金属催化剂上的界面效应及其对催化性能的调控机制。我们将具有亚纳米尺度的 PtO_x 团簇负载到主要暴露 (110) 晶面的氧化铈纳米线上，随后的研究表明当 Pt-O 配位数过大时，吸附在过度氧化的 Pt 位点上的 CO 中间体以及 PtO_x 团簇中的界面晶格氧对于低温 CO 氧化反应都是非活性的，因此造成样品催化活性显著降低^[4]。对于氧化铈纳米线负载的 Ru、Rh、Pd、Ir 几种催化剂，我们发现由于存在不同的金属载体电子相互作用，金属 Ru、Rh、Ir 与金属 Pd 表现出了完全不同的催化活性中心以及尺寸效应。在另一个工作中，我们调变了氧化铈纳米线上负载的 Ru 催化剂的尺寸（包括单原子、团簇和纳米颗粒），并发现金属载体强相互作用与氢溢流效应之间的竞争作用共同决定了 Ru/CeO₂ 催化剂的低温 CO₂ 加氢高选择性（高达 99%）生成甲烷的活性（图 1）^[5]，其中纳米团簇（尺寸约为 1 nm）催化剂展示出最高的甲烷化催化活性。此外，进一步研究证实负载其它贵金属（Rh、Ir、Pd、Pt）纳米团簇催化剂中，由于存在有效金属-载体相互作用的差异，导致 CO₂ 加氢反应的产物选择性发生显著改变^[6]。其中，由于在反应中存在 Ce 原子向 Ru 或 Rh 位点的电荷转移，导致这两种催化剂有利于生成甲烷，而对 Pt/CeO₂ 和 Pd/CeO₂ 来说，由于在反应中存在 Ru 或 Rh 位点向 Ce 原子的电荷转移，导致这两种催化剂有利于生成 CO。我们还研究了 Pt/CeO₂ 催化剂在水汽变换反应中的尺寸效应，结果表明金属与载体间的电子相互作用所代表的界面电子效应以及丰富的氧空位所代表的界面几何效应一起决定了催化反应路径，导致 3.8 nm Pt 样品拥有最高的活性（图 2）。总之，我们近期的研究成果揭示了在碳一分子的转化反应中，金属载体界面结构（包括几何与电子结构）对于调节氧化铈负载的金属催化剂的性能具有重要作用，因此也对设计和优化高性能负载金属纳米催化剂具有指导意义。

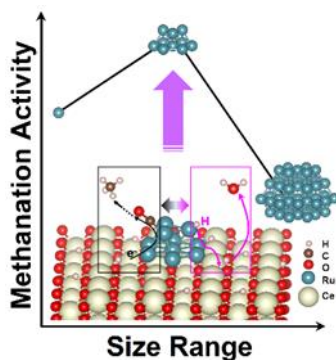


图 1. 金属载体相互作用与氢溢流效应调节氧化铈负载的 Ru 单原子，团簇和纳米颗粒的甲烷化活性的竞争关系。

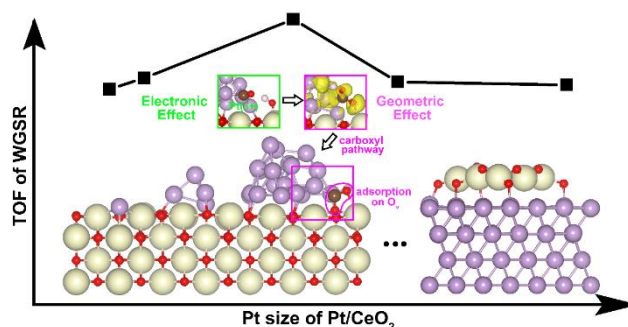


图 2. 不同尺寸的 Pt/CeO₂ 催化水汽变换反应的电子和几何效应示意图。

关键词：稀土；贵金属；负载纳米催化剂；界面效应；碳一催化反应

参考文献：

- [1] N. Ta, J. Liu, S. Chenna, P. A. Crozier, Y. Li, A. Chen, and W. Shen, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 20585.
- [2] M. Cargnello, V. V. T. Doan-Nguyen, T. R. Gordon, R. Diaz, E. Stach, R. J. Gorte, P. Fornasiero, and C. B. Murray, *Science* **2013**, *341*, 771.
- [3] K. Ding, A. Gulec, A. M. Johnson, N. M. Schweitzer, G. D. Stucky, L. Marks, and P. C. Stair, *Science* **2015**, *350*, 189.
- [4] J. Ke, W. Zhu, Y.-Y. Jiang, R. Si, Y.-J. Wang, S.-C. Li, C.-H. Jin, H.-C. Liu, W.-G. Song, C.-H. Yan, and Y.-W. Zhang, *ACS Catal.* **2015**, *5*, 5164.
- [5] Y. Guo, S. Mei, K. Yuan, D.-J. Wang, H. Liu, C.-H. Yan, Y.-W. Zhang, *ACS Catal.* **2018**, *8*, 6203.
- [6] Y. Guo, Z. Liu, F. Zhang, D.-J. Wang, K. Yuan, L. Huang, H.-C. Liu, S. D. Senanayake, J. A Rodriguez, C.-H. Yan, Y.-W. Zhang, *ChemCatChem*, **2020**, DOI:10.1002/cctc.202001531.

个人简介：



张亚文，北京大学化学与分子工程学院教授、博士生导师、国家杰出青年科学基金获得者(2010)。1997年于北京大学获博士学位。主要从事稀土-贵金属纳米材料化学及其催化功能的基础研究，在稀土和贵金属纳米材料的液相可控制备、组装及性质的构效关系的研究方面做出了重要贡献。迄今在国际学术刊物上如 *Nat. Catal.*、*JACS*、*ACIE*、*ACS Catal.* 等杂志上发表 SCI 收录论文 150 多篇，总引用率 10000 次以上，H 因子为 56。以第二完成人先后在 2010 年和 2011 年获教育部自然科学奖一等奖和国家自然科学奖二等奖各一项(项目名称：“稀土纳米功能材料的可控合成、组装及构效关系研究”)。担任中国稀土学会催化专业委员会常委以及中国化工学会稀土催化与过程专家委员会特聘副主任委员。还于 2014 年以来多次被选入爱思唯尔化学组中国高被引学者名录。

单壁碳纳米管的结构可控生长

李彦

北京大学化学与分子工程学院 Email: yanli@pku.edu.cn

单壁碳纳米管的能带结构取决于其碳原子六元环沿管壁的排布方式，亦即手性指数(n,m)，因此结构/手性选择性的合成既具有重要的科学意义，又是许多高端应用的要求，同时也是领域内最具挑战性的研究课题。我们提出了利用具有独特原子排布方式的晶态催化剂作为结构模板来合成单一手性单壁碳纳米管的策略，发展了一类新型钨基金属间化合物催化剂，它们具有较低的晶体结构对称性和很高的熔点，利用其结构模板效应，再辅以生长过程动力学条件的调控，实现了具有单一手性结构的单壁碳纳米管的选择性合成。



李彦，北京大学化学学院教授，主要从事碳纳米材料的研究。曾获国家杰出青年基金支持、受聘教育部长江学者特聘教授，并获得中国化学会赢创化学创新奖杰出科学家、全国优秀科技工作者、北京市高等学校教学名师、北京大学十佳教师、十佳导师等荣誉。现为英国皇家化学会会士，兼任 ACS Nano 副主编及 Chemical Society Reviews、Materials Horizons、carbon、Nano Research 等期刊的顾问编委或编委，也是多个国际学术组织的委员。

分子磁性研究

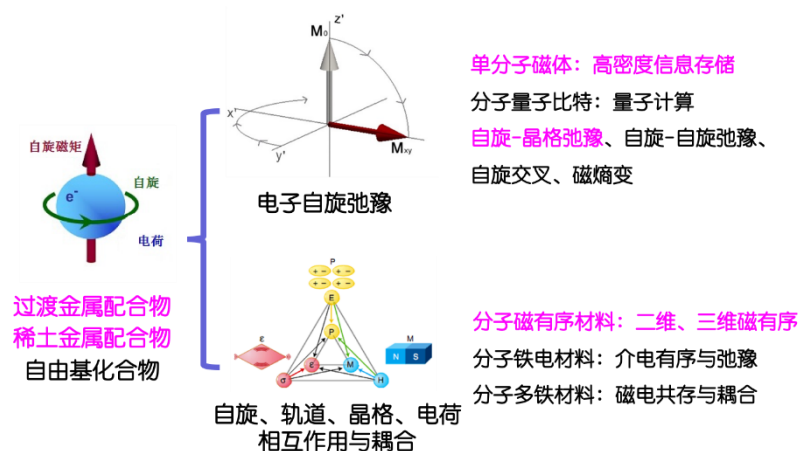
王炳武

北京大学化学与分子工程学院，北京，100871

Email: wangbw@pku.edu.cn

磁性是物质的基本属性之一，来源于基本粒子的运动。理解磁性的根源，研究其与物质的组成、几何结构、电子结构的关系，是物理科学和化学科学的基本问题之一。分子磁性是多学科交叉学科，其研究发端于磁化学，逐渐成为一个独立的研究领域。围绕分子磁性，探索了过渡金属和稀土金属磁电子结构与其几何性质、功能之间的联系：

1. 使用理论和实验方法研究单分子、单离子和单链磁体磁弛豫现象，探索制备高性能单分子磁体、单离子磁体的新策略；
2. 从理论和实验角度讨论了分子基磁有序体系、自旋交叉体系、多功能磁性分子等的磁构关系，探讨了理解分子磁性的思路。



分子磁性研究领域的划分

关键词：分子磁性，单分子磁体，磁各向异性

参考文献

- [1] Wang C, Sun R, Chen YF, Wang BW*, Wang Z M, Gao S, *CCS Chem*, 2020, 2, 362-368.
- [2] Meng YS, Xu L, Xiong J, Yuan Q, Liu T, Wang BW*, Gao S*, *Angew Chem Int Ed* 2018, 57, 4673.
- [3] Yao XN[#], Du JZ[#], Zhang YQ, Leng XB, Yang M W, Jiang SD, Wang ZX, Ouyang Z W, Deng L*, Wang BW*, Gao S*, *J Am Chem Soc* 2017, 139, 373.
- [4] Xiong J, Ding H Y, Meng YS, Gao C, Zhang XJ, Meng ZS, Zhang YQ, Shi W, Wang BW*, Gao S*, *Chem Sci*, 2017, 8, 1288.
- [5] Sun WB, Yan PF, Jiang SD, Wang BW*, Zhang YQ, Li HF, Chen P, Wang ZM, Gao S*, *Chem Sci*, 2016, 7, 684.

个人简介



王炳武，北京大学，副教授。分别于1999年、2004年在北京大学获得理学学士和博士学位。主要研究领域为分子磁学，研究范围包括：磁性分子体系磁结构关系的理论和实验研究；在分子自旋电子学、化学反应的磁效应、生物磁感应等领域涉及的分子磁现象。在研究中发表分子磁性相关论文140余篇，被引用5000余次，其中7篇为ESI高被引论文。

稀土配合物电致发光

有机电致发光, 又称有机发光二极管(OLEDs), 被认为是新一代的绿色显示和照明技术。根据 OLEDs 的工作机理, 选择高激子利用率(EUE)发光材料是获得高效率的前提。目前, OLEDs 产业线上用的红光和绿光材料均是 EUE 高达 100%, 激发态寿命超过 1 μ s 的贵金属铈配合物, 而蓝光材料则是 EUE 较低但激发态寿命较短(纳秒)的纯有机化合物, 主要原因是蓝光对应的激发态能量高, 在较长激发态寿命(如微秒)情况下容易导致器件不稳定。因此, OLEDs 发展面临的国际难题是缺乏同时具有高 EUE 和高稳定性(激发态寿命短)的蓝光材料。另一方面, 由于 OLEDs 发光材料的专利大多被国外机构垄断, 中国 OLEDs 的发展面临的难题则是缺乏具有自主知识产权的发光材料。在此背景下, 我们提出并证明以稀土铈(III)和铈(II)配合物为代表的 d-f 跃迁发光稀土配合物是一类同时具有高效率和高稳定性的 OLEDs 发光材料^[1-4]。结合发射光谱可调, 成本低等优点, d-f 跃迁发光稀土配合物有望成为一类具有中国特色的高性能 OLEDs 发光材料。

参考文献:

- [1] D. L. Wang, et al. Deep-blue organic light-emitting diodes based on a doublet d-f transition cerium(III) complex with 100% exciton utilization efficiency, *Light: Sci. Appl.*, 2020, 9, 157.
- [2] Z. F. Zhao, et al. Efficient rare earth cerium(III) complex with nanosecond d-f emission for blue organic light-emitting diodes, *Natl. Sci. Rev.*, 2020, DOI: 10.1093/nsr/nwaa193.
- [3] G. Zhan, et al. Highly efficient and air-stable lanthanide Eu^{II} complex: New emitter in organic light emitting diodes, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, 59, 19011.
- [4] J. Y. Li, et al. Highly efficient and air-stable Eu(II)-containing azacryptates ready for organic light-emitting diodes, *Nat. Commun.*, 2020, 11, 5218.

个人简介:



刘志伟 北京大学副教授, 博士生导师。2003 年本科毕业于华中师范大学化学学院, 2008 年获北京大学无机化学专业博士学位, 2008-2009 年、2009-2011 年先后在加拿大多伦多大学材料科学与工程系和美国南加州大学化学系从事博士后研究, 2011 年回到北京大学化学学院工作。主要研究领域是光电转换功能材料与器件, 近年来的研究兴趣集中在铈、亚铜、稀土等金属配合物的光致发光与电致发光, 以及锡基钙钛矿材料在太阳能电池中的应用。以第一作者或通讯作者身份在 *Science* 等期刊发表 SCI 论文 70 余篇; 撰写《金属配合物电致发光》(2019, 科学出版社) 等专著。

稀土储氢材料新功能探索

我们利用稀土储氢材料的可逆吸放氢性质调控重要含氢化学反应中氢中间体，使反应更高效的发生，在水溶液电化学和有机储氢液体可逆储氢等应用中取得了良好的效果。上述“广义储氢”反应充分利用了稀土储氢材料良好的吸放氢可逆性和动力学，规避了其质量储氢密度低的不足，赋予这一经典材料体系新的机遇。



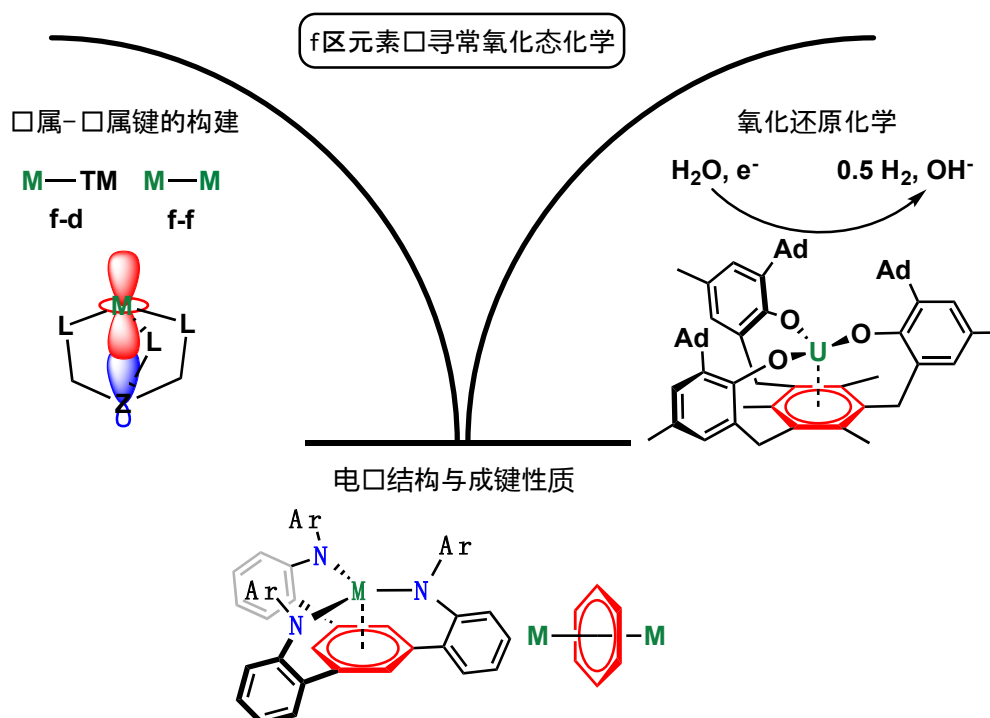
郑捷，北京大学化学学院副教授，博士生导师。2004年和2009年于北京大学化学学院获理学学士和博士学位，2010年获荷兰艾因霍恩理工大学PhD，2011年进入北京大学化学学院任教。研究领域为氢能和储氢材料，近年来重点关注稀土储氢材料的新功能和氢化物制氢技术。发表第一/通讯作者论文60余篇，授权专利10余项，主持和参加国家自然科学基金、科技部重点研发计划、北京市科技项目和企业合作项目10余项。

f 区元素非寻常氧化态化学

黄闻亮

北京大学化学与分子工程学院

氧化态是元素最基本的性质之一。f 区元素，即稀土与锕系元素，因其特有的 4f 或 5f 价键轨道，具有特殊的性质与反应性。近年来，f 区元素的非寻常氧化态化学取得了突破性的进展，高价与低价的稀土或锕系元素的分子配合物被陆续报道。这些非寻常氧化态的 f 区金属配合物不仅有助于加深对其电子结构与成键性质的理解，也为发展 f 区元素的氧化还原化学打下了基础。我们课题组基于芳烃与 f 区元素良好的适配性，合成了一系列反三明治型 f 区元素芳烃配合物，并深入研究了其电子结构。在此基础上，我们设计了新型三脚架型配体，利用底座芳环的两性特征来稳定同一 f 区元素的多种氧化态。



个人介绍:

黄闻亮 2008 年本科毕业于北京大学元培学院，2013 年在 美国加州大学洛杉矶分校获得哲学博士学位，导师为 Paula L. Diaconescu 教授，2014-2017 年在美国麻省理工学院化学系开展博士后研究，合作导师为 Stephen L. Buchwald 教授。2017 年 8 月入职北京大学化学与分子工程学院，任 PI，特聘研究员，预聘制助理教授，博士生导师，建立 f 区元素配位化学课题组。课题组的主要研究兴趣为 f 区元素（稀土与锕系元素）的配位化学与金属有机化学，特别是 f 区元素的非寻常氧化态化学。自担任独立 PI 后，已在 J. Am. Chem. Soc., Chem. Sci. 等国际顶级期刊上以通讯作者发表多篇论文。2018 年入选国家青年高层次人才计划。

仿生配位自组装：结构与功能进展

孙庆福

结构化学国家重点实验，中国科学院福建物质结构研究所，福州，350002

*Email: qfsun@fjirsm.ac.cn

化学家们总是惊讶于自然界奇妙的多级次结构，在这种结构中，多个基本单元（如氨基酸或核苷酸）逐步自组装成复杂的大分子，并且产生各个聚集组分的所不具备的功能。在过去的几十年里，金属导向自组装已发展成为构建具有精巧结的与功能的分子聚集体的高效手段之一。金属-有机配位大环和多面体型超分子容器在识别与传感、仿生催化、靶向药物等方面拥有广泛的应用前景。基于钪离子配位导向自组装策略，我们课题组近期在功能复合的配位超分子结构设计、诱导匹配自适应转化、催化剂水相封装、光动力诊疗应用等方面取得系列进展[1-5]。同时，我们将具有优异光电磁及催化性能的稀土金属离子引入到配位超分子体系的结构设计，突破了此前配位超分子体系中金属大都仅作为连接节点而缺乏自身功能性的难题，发展了稀土配位超分子的精准组装与发光调控策略，并基于多组分协同效应进一步推动了稀土超分子体系在高效分子、离子、温度等光学传感、萃取分离及多模态生物成像等方面的应用[6-10]。

参考文献

- [1] Zhang, G.-L.; Zhou, L.-P.; Yuan, D.-Q.; Sun, Q.-F. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015**, *54*, 9844.
- [2] Zhang, T.; Zhou, L.-P.; Guo, X.-Q.; Cai, L.-X.; Sun, Q.-F. *Nat. Commun.*, **2017**, *8*, 15898.
- [3] Cai, L.-X.; Li, S.-C.; Yan, D.-N.; Zhou, L.-P.; Guo, F.; Sun, Q.-F. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 4869.
- [4] He, L.; Cai, L.-X.; Li, M.-H.; Zhang, G.-L.; Zhou, L.-P.; Chen, T.; Lin, M.-J.; Sun, Q.-F. *J. Chem. Sci.* **2020**, *1*, 7940.
- [5] Cheng, P.-M.; Cai, L.-X.; Li, S.-C.; Hu, S.-J.; Yan, D.-N.; Zhou, L.-P.; Sun, Q.-F. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, doi:10.1002/anie.202011474.
- [6] Yan, L.-L.; Tan, C.-H.; Zhang, G.-L.; Zhou, L.-P.; Bunzli, J.-C.; Sun, Q.-F. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 8550.
- [7] Li, X.-Z.; Zhou, L.-P.; Yan, L.-L.; Yuan, D.-Q.; Lin, C.-S.; Sun, Q.-F. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 8237.
- [8] Liu, C.-L.; Zhang, R.-L.; Lin, C.-S.; Zhou, L.-P.; Cai, L.-X.; Kong, J.-T.; Yang, S.-Q.; Han, K.-L.; Sun, Q.-F. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 12474.
- [9] Li, X.-Z.; Zhou, L.-P.; Yan, L.-L.; Dong Y.-M.; Bai, Z.-L.; Sun, X.-Q.; Diwu J.; Wang S.; Bünzli, J.-C.; Sun, Q.-F. *Nature Commun.* **2018**, *9*, 547.
- [10] Wang, Z.; He, L.; Liu, B.; Zhou, L.-P.; Cai, L.-X.; Hu, S.-J.; Li, X.-Z.; Li, Z.; Chen, T.; Li, X.; Sun, Q.-F. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 16409.

个人简介:



孙庆福研究员，1983年生于山东，汉族，中共党员，2011年东京大学博士学位，随后分别在东京大学及加州大学伯克利分校从事博士后，2013年引进到福建物构所工作，任结构化学国家重点实验室课题组长，主要从事超分子化学及功能配合物化学相关研究，海外高层次人才（青年项目）及国家杰出青年基金获得者，曾获中国化学青年化学奖，上海分院杰出青年科技创新人才，中科院优秀导师奖，福建省青年科技奖，福建省青年五四奖章标兵等荣誉。

金属氧簇的配位延迟水解合成与结构调控

金属氧簇作为金属氧化物材料的团簇状态，具有原子精确的结构和化学可调的性能，对理解氧化物材料生长过程中的聚集态形式，以及构建其性能与结构之间的构效关系，都具有十分重要的科学意义。但是，对于一些高价态的金属离子（如 Ti^{4+} , Sn^{4+} 等），由于其极易水解的特性，导致水解过程中聚集态形式复杂多样，难以通过结晶去确定分子结构，使得这类金属氧簇的制备成为本领域的研究难点。针对这一问题，我们在过去五年里发展了金属氧簇的配位延迟水解合成策略，利用有机配体与金属离子的螯合作用延迟其水解过程，并通过酯化反应控制体系含水量实现了金属氧簇的可控生长与结晶，在簇核数、对称性等方面突破了传统合成方法的限制，获得了系列结构新颖的钛氧团簇、锡氧团簇。同时，这一合成策略还允许我们通过修饰功能有机配体或活性金属离子（团簇）对金属氧簇的表面结构进行调控，实现了其光学、催化等性能优化或拓展。

1. Wang D, Chen ZN, Ding QR, Feng CC, Wang ST, Zhuang W*, Zhang L*, Rational Preparation of Atomically Precise Non-Alkyl Tin-Oxo Clusters with Theoretical to Experimental Insights into Electrocatalytic CO_2 Reduction Applications, *CCS Chem*, 2021, 10.31635/ccschem.020.202000546.
2. Gao MY, Wang K, Sun Y, Li D, Song BQ, Andaloussi YH, Zaworotko MJ, Zhang J, Zhang L*, Tetrahedral Geometry Induction of Stable Ag-Ti Nanoclusters by Flexible Trifurcate TiL_3 Metalloligand, *J Am Chem Soc*, 2020, 12784.
3. Chintakrind K, Narayanam N, Li YZ, Wang F, Kashi C, Li QH, Xu G, Zhang L*, Zhang J, Atomically Precise Titanium-Oxo Nanotube with Selective Water Adsorption and Semiconductive Behaviors, *CCS Chem*, 2020, 209.
4. Liu YJ, Fang WH*, Zhang L*, Zhang J, Recent advances in heterometallic polyoxotitanium clusters, *Coord Chem Rev*, 2020, 213099.
5. Fan X, Wang J, Wu K*, Zhang L*, Zhang J*, Isomerism in Titanium-Oxo Clusters: Molecular Anatase Model with Atomic Structure and Improved Photocatalytic Activity, *Angew Chem Int Ed*, 2019, 1320.

个人简介:



张磊：研究员，博士生导师。1982年出生于山东，2004年本科毕业于南京大学化学系，2009年获中科院福建物构所博士学位。2009年11月至2014年8月，在爱尔兰都柏林圣三一学院（博士后）和德国慕尼黑工业大学（洪堡学者）从事研究工作。2014年9月获聘中科院福建物构所“百人计划”回国工作。研究方向为金属氧簇化学，已发表第一作者/通讯作者学术论文70余篇，其中包括 *J. Am. Chem. Soc.* (5篇), *Angew. Chem. Int. Ed.* (5篇), *Adv. Mater.* (1篇), *CCS Chem.* (2篇), *Chem. Soc. Rev.* (1篇)等。主持国家自然科学基金委优秀青年科学基金、重大研究计划-培育项目、面上项目、青年项目、福建省杰青项目等。曾入选南京大学优秀毕业生（2004），中科院“朱李月华”优秀博士毕业生（2009），中科院福建物构所“百人计划”（2014），福建省青年拔尖人才（2018），中国青年化学家元素周期表“钛”元素代言人（2019）等。

表面全官能团化的二维材料

徐刚*

¹中国科学院福建物质结构研究所 福建 福州, 350002

* Email: gxu@fjirsm.ac.cn

二维材料, 由于其超薄的厚度使其表现出不同于块体材料的优异的物理/化学性质, 是物理、化学和材料等研究领域的热点。在无机二维材料的表面通过共价连接的方法修饰有机官能团, 可以大幅度的调控和优化二维材料的性能。但现有策略通常都是先从块体材料剥离出二维材料, 然后通过剧烈的化学反应进行后修饰的方法。这种先剥离后修饰的方法制备的二维材料通常其表面只有很少的比例可以被接上有机官能团, 并且官能团的种类、数量和位置不清, 分布无序, 材料易产生缺陷。因此, 二维材料官能团化研究的发展受到很大的限制。

我们利用配位化学的方法先在块体材料内将二维材料表面修饰上官能团, 然后剥离获得表面完全有机官能团化的二维材料。这种先修饰后剥离制备获得的新型二维材料具有一个二维无机层, 有机官能团通过共价键长程有序的连接在二维材料的上下表面上。由于是基于配位化学的合成, 该策略制备的材料具有制备简单、结构明确、体系拓展性强、官能团可设计等优点。现有结果表明这类材料的带隙和导电性能可以被大幅度的调制, 其调制幅度远超此前文献的报道。^[1]初步应用基础研究表明这类材料展现巨大的应用潜力, 已在气敏探测和催化等方面表现出优于传统二维材料的性能。^{[2][3][4]}

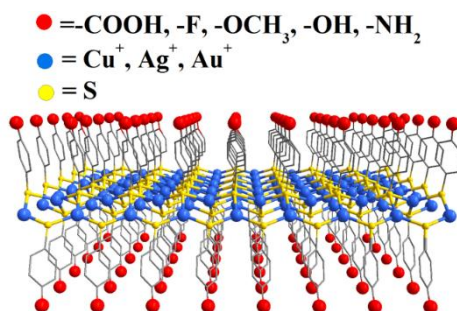


Fig. 1 Fully functionalized two-dimensional materials.

关键词: 配位化学; 二维材料; 官能团化; 带隙调控; 半导体性能

参考文献:

- [1] Y.Z. Li, X.M. Jiang, Z.H. Fu, Q.Q. Huang, G. E. Wang, W. H. Deng, C. Wang, Z.Z. Li, W.J. Yin, B.L. Chen, G. Xu*, *Nat. Commun.*, 2020, 11, 261-268
- [2] H.J. Jiang, L.A. Cao, Y.Z. Li, W.H. Li, X.L. Ye, W.H. Deng, X.M. Jiang, G.E. Wang, G. Xu, *Chem. Commun.*, 2020, 56, 5366-5369
- [3] Q.Q. Huang, Y.Z. Li, Z. Zheng, X. M. Jiang, S.S. Sun, H.J. Jiang, W.H. Deng, G.E. Wang, T.Y. Zhai*, M.D. Li*, G. Xu*, *CCS Chem.* 2019, 1, 655-662
- [4] Y.Z. Li, J. Shu, Q.Q. Huang, K. Chiranjeevulu, P. N. Kumar, G. E. Wang, W.H. Deng, D.P. Tang, G. Xu*, *Chem. Commun.*, 2019, 55, 10444-10447



徐刚, 中科院福建物质结构研究所研究员、博士生导师, 课题组长。08年博士毕业于物构所。随后先后获得日本 JSPS 奖学金和德国洪堡奖学金分别在日本京都大学, 德国雷根斯堡大学等地从事博士后研究。2013年“百人计划”人才引进回到福建物构所工作, 主要从事导电配位聚合物材料的研究, 已发表 *Angew Chem. Int. Ed.*, *Adv. Mater.*, *J. Am. Chem. Soc.*等 SCI 论文 90 多篇, 他引 4000 多次。目前作为课题负责人承担有国家优秀青年科学基金项目, 国家自然科学基金面上项目, 中科院前沿重点研究项目等。获得过福建省青年拔尖人才、福建运盛青年科技奖、福州青年科技奖等奖励。

铁电半导体材料与器件

孙志华

中国科学院福建物质结构研究所，福州，350002

*Email: sunzhihua@fjirsm.ac.cn

【摘要】 铁电半导体材料是发展新一代光电器件的强有力候选者，光与自发极化效应的耦合作用孕育了系列具有重大应用前景的新型光电技术。在极性固体内，电子输运对偶极矩运动具有强烈的屏蔽作用，从而导致铁电极化与半导体特性之间难以兼容耦合。围绕这个科学问题，我们主要开展新型铁电半导体的设计合成、结构精准调控与性能研究，解决传统铁电体的电导率低和禁带能级大等瓶颈，获得了性能优异的铁电半导体材料。(a) **创新结构设计、发展铁电半导体材料新体系**：基于金属配位骨架模型，利用“化学嵌入”功能配体的设计策略诱导强极化效应，发展了铁电半导体新体系；(b) **结构精准调控、实现铁电极化与半导体特性耦合**：聚焦二维钙钛矿结构的铁电半导体材料，开展晶体结构修饰与精准调控，有效降低材料的禁带能级 (~ 1.8 eV)，并提高了电导率和载流子迁移速率 (~ 2.6 cm²·V⁻¹·s⁻¹)，同时提出了外电场诱导偶极子的重排、增强极化强度的新思路；(c) **拓展铁电半导体的光电应用**：以铁电极化与半导体特性耦合为基础，组装高性能器件，发挥铁电内建电场对载流子输运的促进作用，实现了材料在自驱动光电探测、高能 X-射线检测及超级电容器等领域的应用。

报告人简介：



孙志华，研究员，博士生导师。2010年7月在山东大学获得博士学位，同年进入福建物构所工作，2015年12月晋升为研究员。近年来以通讯作者/第一作者在*J. Am. Chem. Soc.* (8)、*Angew. Chem. Int. Ed.* (12)、*Nature Comm.* (1)、*Adv. Mater.* (3)、*Adv. Funct. Mater.* (4) 和 *Chem. Soc. Rev.* 等国际期刊发表系列学术论文，论文引用4100多次，个人H-index为39，获授权国家发明专利9件。入选“中组部万人计划-青年拔尖人才”、中科院青年创新促进会优秀会员，作为负责人主持国家优秀青年基金 (结题优秀)、面上项目和福建省杰出青年基金等项目，先后获得中国科学院卢嘉锡青年人才奖、上海分院杰出青年科技创新人才奖和福州市青年科技奖等荣誉。

光致变色化合物的设计合成

王明盛

中国科学院福建物质结构研究所

光致变色化合物是一类光敏型双稳态智能材料，具有颜色和物理性质可逆变化的特点。从早期的简单颜色应用，发展到近年的各种智能系统等各种高端应用，人们对其性能需求越来越高。我们围绕以下以下一些问题开展了工作，并取得重要科学发现：1) 针对变色产物稳定问题，提出金属配位稳定光生自由基的方法，开发了结构和性能调控灵活的光致变色化合物新体系—金属紫精化合物，揭示了其变色机理，并通过周期配位导向自组装方法，实现近平面结构受体周期排列插层结构的可控合成，解决了自由基变色产物长期氧气、热稳定问题；2) 针对褪色速率控制问题，提出光激发 π 聚集体吸收带的方法，首次实现紫精/金属紫精化合物的全光光致变色，把传统热模式所需的几十秒到几个小时的褪色时间缩短到光模式的 1 秒；3) 在实现全光光致变色基础上，通过改变激光功率实现单光子吸收和多光子吸收模式的切换，实现了单光束变色和褪色的可逆切换，使光致变色过程同时满足了简便、快速的要求。



王明盛，现为福建物构所研究员、博导，1999 年本科毕业于厦门大学化学系，2004 年博士毕业于福建物构所，2014 年入选首批海西院团队百人计划，并在郭国聪研究员支持下独立带领一个研究小组开展光致变色化合物的设计合成研究。工作以来在 *Nat Commun* (1)、*JACS* (4)、*Angew Chem Int Ed* (7)、*CCS chem* (1)、*Coord Chem Rev* (1) 等化学大类 1 区期刊发表第一/通讯作者论文 14 篇，其中独立通讯 5 篇、共通讯 5 篇。主持国家自然科学基金面上、中科院前沿重点、中科院青促会优秀会员、福建省基金杰青等项目 13 项；曾获中国科学院卢家锡青年人才奖、福建省运盛青年科技奖；作为主要完成人完成的一项成果获 2013 年度福建省自然科学奖。

基于氢键组装的多孔框架材料

氢键在自然界和生物体内都扮演着非常重要的角色。它不仅决定了物质的结构，也是许多功能可以正常运转的关键要素。受到大自然广泛存在的氢键的启发，化学家开始利用氢键连接结构基元构筑新的化合物。氢键有机框架化合物 Hydrogen-bonded organic framework (HOFs) 则是利用氢键连接结构基元得到的具有空腔的多孔框架化合物。HOFs 做为晶态多孔框架材料的一种，具有多孔框架材料（包括 Metal-organic frameworks 和 Covalent-organic frameworks 等）共同的优点---如：高比表面积和孔体积、均一可调的孔尺寸、高度的结晶性、明确可裁剪的结构等；此外，它还具有其他多孔框架材料所不具备的独特优点，如：合成条件简单、易于回收利用、具有溶液可操作性、生物兼容性好、可生物降解等。对 HOFs 材料的研究不仅有利于揭示基于弱分子间相互作用的复杂结构及功能的机理，而且便于进一步开发新的功能材料以及优化已有材料的性能。本报告将主要介绍如何通过结构化学的合理设计提升这类材料的稳定性，并且利用这类材料的特点拓展与提升其功能性。



刘天赋，中国科学院福建物质结构研究所，研究员、博士生导师。2011 年于中科院物构所获得博士学位之后，先后在美国 Texas A&M University 和 Northwestern University 进行博士后研究工作。2016 年 8 月以高层次人才引进到中科院福建物质结构研究所工作，任课题组长。曾获得国家级人才计划、中科院“百人计划”、第五批福建省引才“百人计划”等项目支持。主持多项国家及省部级科研项目，包括自然科学基金面上项目、国家重点研发计划子课题等。研究工作致力于多孔框架

材料（包括金属有机框架材料及氢键有机框架材料）的设计合成及其在气体分离、气相催化、药物传输与癌症治疗、光催化等领域的应用。研究成果以第一/通讯作者发表在 Nature Communications、Journal of the American Chemical Society、Advanced Materials、CCS Chemistry 等杂志期刊上。论文他引 5500 多次，H 因子 41。

晶态分子笼的设计合成

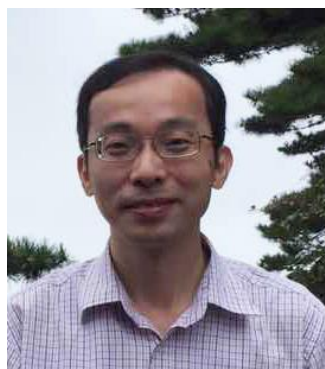
袁大强 中国科学院福建物质结构研究所

E-mail: ydq@fjirsm.ac.cn

自然界中的微观孔结构是生命体系中物理化学过程的重要载体之一，因此在分子层次上对其进行模拟具有重要的科学价值。作为多孔材料的功能基元之一，分子笼具有独特的吸附、分离、催化及传感等功能，使其成为诸多化学反应与生物过程的基础载体。主-客体相互作用则是分子笼实现其特殊功能的核心作用力。因此，从功能基元的角度出发，采用模块化合成具有特定大小、形状的功能分子笼已经成为超分子合成化学研究的最前沿领域之一。我们围绕配位分子笼和多孔有机笼的定向构筑开展研究，致力于探索合成与调控分子笼结构的新方法，从结构单元间作用力强弱的角度来理解其合成规律，设计合成了系列稳定并且具有独特孔结构的新型分子笼。同时从主-客体化学的角度来设计与探究它们的气体吸附性能和催化性能。

参考文献

- [1] K. Su, W. Wang, S. Du, C. Ji, M. Zhou, D. Yuan*, Reticular Chemistry in Construction of Porous Organic Cages, *J. Am. Chem. Soc.*, 142 (2020) 18060-18072.
- [2] G. Liu, M. Zhou, K. Su, R. Babarao, D. Yuan*, M. Hong, Stabilizing the Extrinsic Porosity in Metal–Organic Cages-Based Supramolecular Framework by In Situ Catalytic Polymerization, *CCS Chemistry*, 2 (2020) 1382-1390.
- [3] K. Su, M. Wu, D. Yuan*, M. Hong, Interconvertible vanadium-seamed hexameric pyrogallol[4]arene nanocapsules, *Nat. Commun.*, 9 (2018) 4941.
- [4] G. Liu, Y. Yuan, J. Wang, Y. Cheng, S. Peh, Y. Wang, Y. Qian, J. Dong, D. Yuan*, D. Zhao*, A Process-Tracing Study on the Post-Assembly Modification of Highly Stable Zirconium Metal–Organic Cages, *J. Am. Chem. Soc.*, 140 (2018) 6231-6234.



袁大强，男，博士，研究员，博士研究生导师。于1999年、2002年在北京师范大学化学系分别获学士、硕士学位。2002年7月起任职于中科院福建物质结构研究所，2006年7月获中国科学院研究生院（中科院福建物质结构研究所）博士学位。2007年8月起先后在美国迈阿密大学(Miami University)化学与生物化学系、美国德州农工大学(Texas A&M University)化学系及可持续能源高级研究中心从事博士后研究工作。2011年8月作为海西院引进人才返回福建物构所工作、2012年获得中科院“百人计划”择优支持、2017年入选第五批福建省引才“百人计划”、2016年获得第二十三届福建运盛青年科技奖、2018年获得福建省自然科学奖一等奖(排名第三)。课题组主要研究兴趣是新型晶态多孔材料的设计合成及性能研究。迄今以通讯/第一作者已在 *J. Am. Chem. Soc.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*Nature Commun.* 等刊物上发表 SCI 收录论文 80 余篇，2015 年、2018-2020 年分别入选汤森路透和科睿唯安全球高被引科学家目录。目前主持了国家自然科学基金面上基金项目、中国科学院前沿科学重点研究项目和福建省百人计划项目。