



中国科学技术大学  
University of Science and Technology of China

化学与材料科学学院

# 科研快报

2020年第1期 (总第1期)

化学与材料科学学院 编

2020年6月

## 基础结合应用研究

### ▶ 能源领域

高效率硅基-钙钛矿二端叠层太阳能电池方向取得重要进展

中国科大在金属卤化物钙钛矿导电层稳定锂电池方面取得重要进展

中国科大在调控MOF基单原子Ni催化剂的配位环境优化CO<sub>2</sub>电还原性能中取得新进展

### ▶ 新材料领域

邻苯二酚功能化聚烯烃

中国科大新型手性无机纳米材料的研制取得新突破

### ▶ 健康领域

中国科大在抗肿瘤超声动力敏化剂领域取得进展

中国科大在窄谱抗菌领域取得进展



## 基础研究

### ▶ 催化与表界面化学

中国科大用MOF封装催化剂实现均相/多相优势互补

### ▶ 化学理论与机制

中国科大在DNA调控胶体结晶自组装方面取得重要进展

## 能源领域

## 高效率硅基-钙钛矿二端叠层太阳能电池方向取得重要进展

提高现有晶硅电池的发电量是太阳能研究人员和光伏工业界长期追求的目标。美国科罗拉多大学Mike McGehee教授和中国科学技术大学徐集贤教授以联合通讯的方式发表了晶硅-钙钛矿二端叠层太阳能电池的重要进展。通过使用改进的钙钛矿光伏薄膜与效率为~21%的晶硅电池进行光电耦合,将太阳能转换效率提高到27% (图1),证明了使用叠层技术大幅突破硅电池理论极限的可行性和巨大前景。成果发表在学术杂志《Science》上 (*Science* 2020, 367, 1097)。

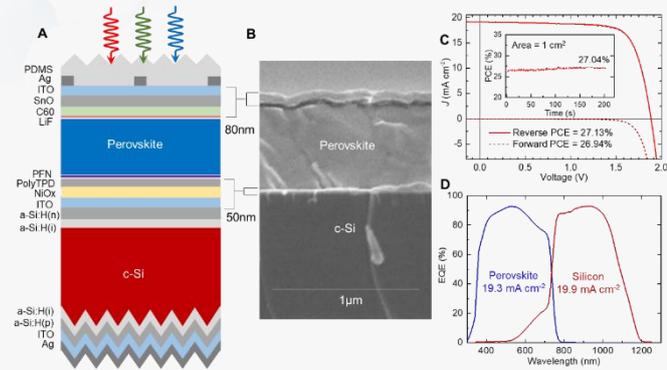


图1.硅基-钙钛矿二端叠层电池的结构和光伏效率。(A) 结构示意图;(B) 器件剖面的电子显微图像;(C) 光伏曲线;(D) 上下两节电池的光谱响应曲线。

详细阅读 <https://scms.ustc.edu.cn/2020/0306/c2404a414118/page.htm>

论文链接 <https://science.sciencemag.org/content/367/6482/1097>

## 中国科大在金属卤化物钙钛矿导锂层稳定锂电池方面取得重要进展

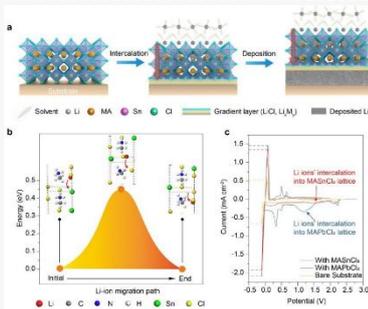


图2.金属卤化物钙钛矿框架的锂离子传导特性机理探究。a.锂离子在金属卤化物钙钛矿晶格中的迁移并均匀沉积在基底的示意图。b.锂离子在金属卤化物钙钛矿MASnCl<sub>3</sub>晶格中的迁移能垒计算。c.旋涂有金属卤化物钙钛矿薄膜电极的循环伏安曲线。

详细阅读 <https://scms.ustc.edu.cn/2020/0413/c2404a418118/page.htm>

文章链接 <https://www.nature.com/articles/s41467-020-15643-9>

中国科大在调控MOF基单原子Ni催化剂的配位环境优化CO<sub>2</sub>电还原性能中取得新进展

电催化CO<sub>2</sub>还原技术是一种具有应用前景的降低CO<sub>2</sub>浓度的方法,而设计制备低成本、高效的CO<sub>2</sub>电还原催化剂是该技术规模化应用的前提。单原子催化剂(SACs)由于具有金属原子最大化的利用率、高的催化活性和选择性等优势引起了人们广泛的关注,其通用合成和配位环境的控制仍然是一个巨大的挑战。中国科学技术大学江海龙教授、刘波教授与广东工业大学的潘春阳教授等利用不含N的MOFs作为前驱体,提出了一种通用的主-客体协同保护策略制备了一系列SACs,通过调控单原子Ni催化剂的配位环境成功实现了CO<sub>2</sub>到CO的高选择性转化。该成果发表在《德国应用化学》杂志上 (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 2705-2709)。

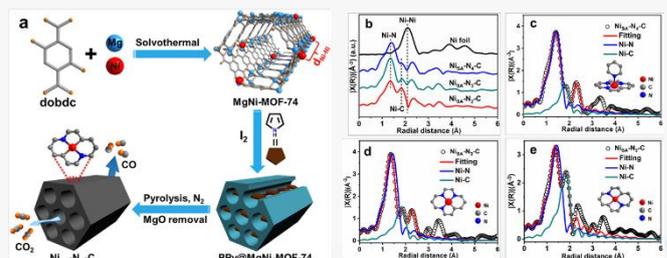


图3.主-客体协同保护策略构筑单原子Ni催化剂及其结构特征。

详细阅读 [https://scms.ustc.edu.cn/\\_s48/2020/0624/c21222a432863/page.psp](https://scms.ustc.edu.cn/_s48/2020/0624/c21222a432863/page.psp)

论文链接 <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/anie.201914977>

## 新材料领域

### 邻苯二酚功能化聚烯烃

聚烯烃年产量巨大、用途广泛,但是其最大的缺点之一是其非极性的特点。在聚烯烃材料中引入极性官能团,对于材料性能的改变具有显著的效果。聚烯烃作为最常见的高分子材料,单体通常来源于不可再生的化石燃料。从可持续发展的角度来看,利用生物来源的共聚单体生产高性能聚烯烃材料具有重大意义。丁香酚是一种可再生且价格低廉的一种烯烃单体。由于其很好的抗氧化性、自由基捕获性,以及烯丙基官能团的异构性,其聚合反应非常具有挑战性。中国科大陈昶乐教授课题组通过使用高性能的钨催化剂,实现了乙烯与丁香酚类单体的高效共聚,制备了邻苯二酚功能化的聚烯烃材料。这一合成路线实现了从可再生的生物质单体出发,制备了一种兼具极性、粘附性、相容性、可与不同金属离子作用并具自修复性能的功能性聚烯烃材料。研究成果发表在国际权威期刊*Angew. Chem. Int. Ed.*杂志上(*Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 7953 – 7959)。

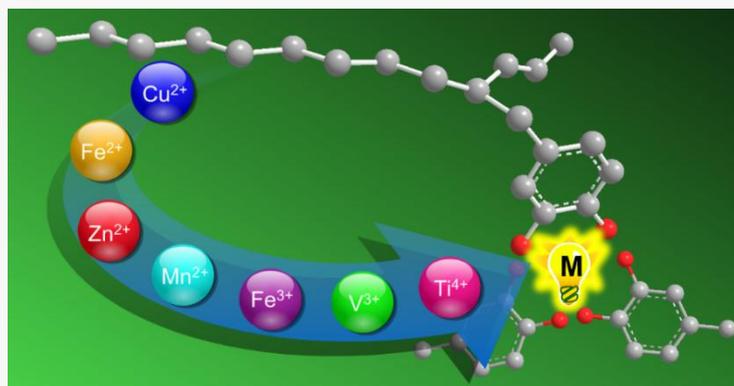


图4

详细阅读 [https://scms.ustc.edu.cn/\\_s48/2020/0624/c21222a432862/page.psp](https://scms.ustc.edu.cn/_s48/2020/0624/c21222a432862/page.psp)

论文链接 <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/anie.202000848>

### 中国科大新型手性无机纳米材料的研制取得新突破

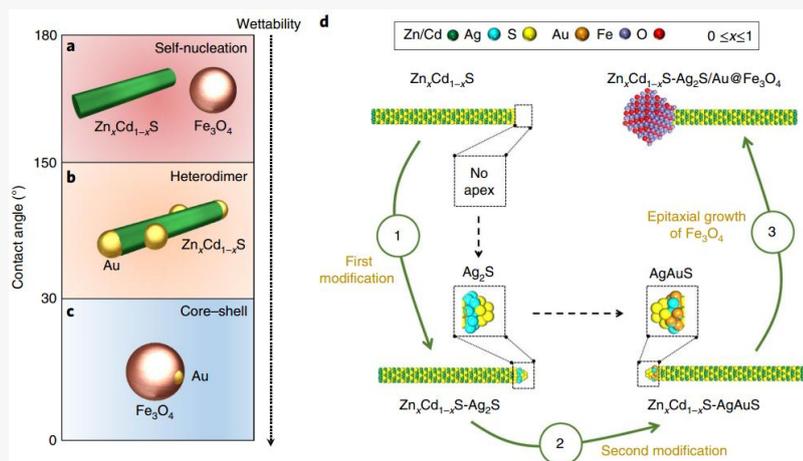


图5.一维纳米棒的位点选择性磁化。(a-c) 异质成核生长与两种材料间接触角的关系总结。(d) “双缓冲层”策略实现磁性组分在纳米棒端点的选择性生长。

手性材料在推动生物标记、手性分析和检测、对映异构体选择性分离、偏振相关光学和光电子学应用等领域的发展具有重要意义。中国科学技术大学俞宏院士团队与国家纳米科学中心唐智勇研究员课题组、多伦多大学Edward Sargent教授团队开展多方合作,在新型手性无机纳米材料合成研究中取得突破性进展。研究人员首次通过在一维纳米结构单元中定点选择性复合磁性材料,利用局域磁场调制电偶极矩与磁偶极矩之间的相互作用,成功合成了一类新型手性无机纳米材料。该成果发表《自然纳米技术》杂志上(*Nat. Nanotechnol.* **2020**, *15*, 192-197)。

详细阅读 <https://scms.ustc.edu.cn/2020/0221/c2404a413608/page.htm>

论文链接 <https://www.nature.com/articles/s41565-019-0606-8>

## 健康领域

## 中国科大在抗肿瘤超声动力敏化剂领域取得进展

恶性肿瘤严重威胁人类健康甚至生命,超声动力治疗由于其安全高效的特性引起了广泛的研究兴趣。超声动力疗法通过敏化剂在激发能的激活下所产生的活性氧物质来清除肿瘤细胞。但超声动力敏化剂稀少,严重限制了超声动力疗法的发展。中国科学技术大学阳丽华副教授课题组与季恒星教授课题组合作,发现压电材料可作为超声动力敏化剂来源。研究表明具有合适能级结构的压电材料在超声条件下能够产生活性氧物质,从而实现了对肿瘤细胞的响应性清除。相关研究成果发表在期刊*The Journal of Physical Chemistry Letters*上(*J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11*, 1228–1238)。

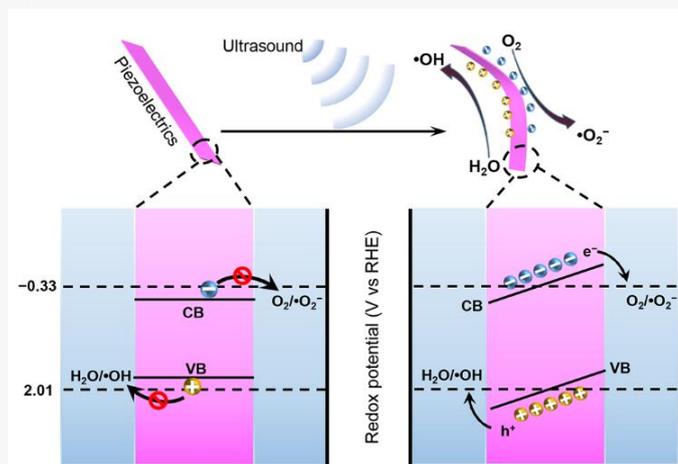


图6.压电材料在外加超声激活下产生活性氧物质的示意图。

详细阅读 <https://scms.ustc.edu.cn/2020/0622/c2404a432416/page.htm>

论文链接 <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.9b03769>

## 中国科大在窄谱抗菌领域取得进展

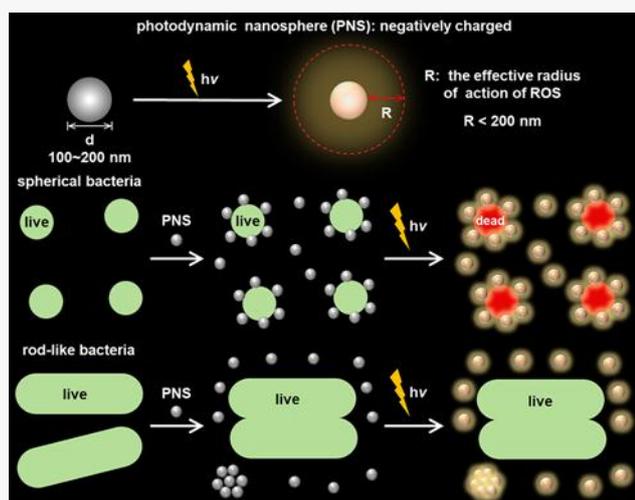


图7. (上) 光动力纳米球 (PNS) 在光照下原位生成活性氧物质 (ROS)。(中和底) 带负电荷纳米球选择性吸附到(中) 球细菌表面、而不吸附到(底) 杆菌表面。如果这些纳米球具有光动力效应, 它们在光照下可高效清除球菌、却不干扰杆菌。

详细阅读 <https://scms.ustc.edu.cn/2020/0325/c2404a416865/page.htm>

论文链接 <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.0c00287>

细菌抗药性的出现与扩散严重威胁全球公共卫生安全。应对这一挑战亟需开发新型抗菌物和抗菌疗法。窄谱抗菌物/疗法可特异性地识别并清除目标病菌,从而减少对宿主共生菌群的脱靶干扰、并降低对细菌的抗药性进化压力。光动力疗法利用光动力敏化剂响应光照所原位生成的活性氧物质 (ROS) 来清除目标细胞,常规而言是一种广谱抗菌疗法。中国科学技术大学阳丽华副教授课题组发现带电荷纳米球基于细菌形貌选择的识别机制,赋予光动力疗法以辨别目标细菌的能力,从而将其转变成一种窄谱抗菌物/疗法。此工作不仅首次揭示了细菌形貌在相似电荷纳米球/细菌相互作用中的关键作用,还有望为过敏性皮炎等由于球菌在杆菌主导健康共生菌群的微环境中过度繁殖所引起的疾病提供一种新疗法。相关研究成果发表在期刊*The Journal of Physical Chemistry Letters*上(*J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11*, 2788–2796)。

## 催化与表界面化学

### 中国科大用MOF封装催化剂实现均相/多相优势互补

均相和多相催化剂各有所长，如何将它们相互整合，扬长避短？中国科学技术大学江海龙研究团队将分子级别的可溶性活性物种封装在以有序MOF孔道为唯一传输通道的中空多孔胶囊晶体中，实现了均相与多相催化剂之间更好的融合。不同尺寸分子的释放实验证明，该晶体胶囊具有尺寸选择性的渗透功能；系列催化对照实验证明，主/客体的各自优势都得到了很好的维持；尺寸选择性及一锅多步串联等反应验证了此类材料的主客体协同效应。这种新的材料合成理念为主/客体之间的性能妥协，以及均相/多相催化剂各自优势的完全理性整合提供了新的思路。研究成果发表在《国家科学评论》上（*National Science Review* 2020, 7, 37–45）。

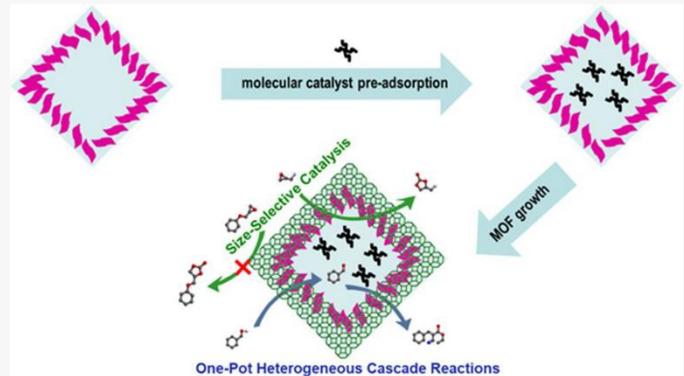


图8. MOF中空胶囊型催化剂的合成及选择性催化示意图。

详细阅读 [https://scms.ustc.edu.cn/\\_s48/2020/0624/c21222a432864/page.psp](https://scms.ustc.edu.cn/_s48/2020/0624/c21222a432864/page.psp)

论文链接 <https://doi.org/10.1093/nsr/nwz147>

## 化学理论与机制

### 中国科大在DNA调控胶体结晶自组装方面取得重要进展

胶体自组装是一个热力学驱动的非平衡过程，容易陷入中间态局部自由能最低的亚稳态，得到有缺陷的组装结构。因此，发展可有效规避局部自由能最低亚稳态使体系达到稳态的胶体自组装方法十分必要。中国科大梁好均教授课题组将DNA动态纳米技术与胶体自组装结合，构建了一种时间依赖相互作用机制调控的胶体粒子自组装体系，通过在常温下调控DNA功能化的胶体粒子自组装过程的动力学路径，并最终诱导胶体粒子组装得到有序排列的超晶格结构。该成果发表在国际权威杂志《美国科学院院报》上（*PNAS*, 2020, 117, 5617-5623）。

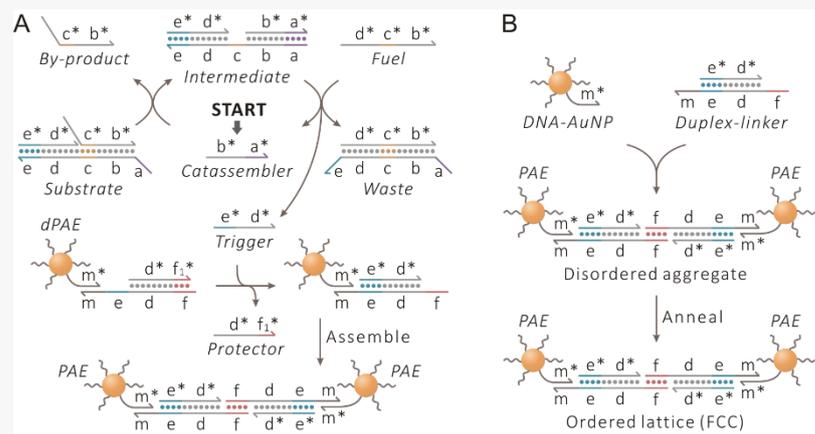


图9. (A) DNA链替换调控的温度不变的、时间依赖的相互作用体系；(B) 能量不变的热退火体系。

详细阅读 [https://scms.ustc.edu.cn/\\_s48/2020/0624/c21222a432865/page.psp](https://scms.ustc.edu.cn/_s48/2020/0624/c21222a432865/page.psp)

论文链接 <https://www.pnas.org/content/early/2020/03/03/1917941117>