

中国材料大会 2024
暨第二届世界材料大会
CMC 2024 & WMC 2024

July 8-11, 2024
Guangzhou, China

FB03-聚集体材料青年论坛
FB03-Youth Forum of Aggregate
Materials

Organized by

Chinese Materials Research Society

Website: <https://cmc2024.scimeeting.cn>

FB03. 聚集体材料青年论坛

分会主席：唐本忠、秦安军、赵征、丘子杰

FB03-01**Ag⁺-半胱氨酸乙酯配位聚合物的光谱和手性**

江云宝*

厦门大学化学化工学院, 谱学分析与仪器教育部重点实验室, 厦门 361005

水溶液中混合 Ag⁺和半胱氨酸, 我们观察到 350nm 处的吸收和 CD 信号, 并且后者因氨基酸构型 D-/L-变化时呈镜像对称。改变溶液 pH 值于氨基酸的 pI 前后可以开关上述光谱信号。我们提出系 Ag⁺...Ag⁺相互作用与配体侧链之间相互作用的作用网络共同支撑的 Ag⁺-半胱氨酸配位聚合物的 Ag⁺...Ag⁺相互作用生色团的光谱信号, 氨基酸的分子手性转呈为配位聚合物的超分子手性。氨基酰化后的酰基半胱氨酸乙酯于乙醇中也可类似地与 Ag⁺形成配位聚合物, 展现吸收、CD 和荧光发射光谱信号, 并且超分子手性呈现有趣的 CD-*ce* 相关性。本报告将详细介绍我们的配体结构与配位聚合物光谱和超分子手性特征的相关性。

FB03-02**本征可拉伸高分子光电材料的聚集态结构表征与调控**

叶龙*

天津大学

高分子光电材料具有本征柔性、重量轻等突出优点, 在可穿戴柔性显示、光伏电池、光电探测器、热电器件、生物电子等领域具有广阔应用前景。开发高性能可拉伸高分子光电材料的关键在于阐明分子结构-聚集态结构-光电/拉伸性能的内在关联, 发展结构与性能的调控与预测方法。近年来, 我们以高分子光电材料为主要研究对象, 发展了构筑、表征、解析本征可拉伸高分子光电共混体系的聚集态结构与力学性能的全链条方法, 并建立了 χ 参数、薄膜结构参数、性能参数三者之间的定量关系。在此基础上, 初步确立和验证了基于 χ 参数来优选和预测高性能有机光伏共混体系的原理, 并成功应用于指导多类共混体系的光电与力学性能优化, 率先实现了拉伸应变超过 100%的有机光伏电池, 并开发了自主知识产权的超薄膜拉伸测试设备。

FB03-03**有机金属超分子化学**

韩英锋*

西北大学

利用金属-碳键构筑超分子功能体系是有机金属化学发展较快的领域之一。我们从含有烯炔基团的多咪唑鎓盐出发, 利用金属-卡宾键的构建制备出系列环状金属卡宾框架体系。在紫外光或者可见光作用下, 该类框架体系中间的烯炔基团发生[2+2]光化学反应, 以 100%的转化率制备出具有环丁烷结构的金属卡宾框架。金属-卡宾键的形成将两个烯炔基团限定在合适的距离范围内 (0.4 nm), 为[2+2]光化学反应提供了先决条件。当金属中心为银时, 可以利用加入氯代物诱导金属-碳键断裂进而去除中心离子, 由此发展出一条多核咪唑类衍生物的高效制备途径。我们首次发展了以含官能团支链的卡宾超分子体系的修饰, 制备出系列新型框架体系。在此基础上, 首次实现了笼状三维咪唑鎓盐的精准合成并发展了其高效制备路线。

FB03-04**AIE 超分子体系的手性传递**

曹利平*

西北大学

聚集诱导发光 (Aggregate-Induced Emission, AIE) 是聚集状态下分子旋转受限而诱发的荧光增强, 典型的 AIE 分子包括四苯乙烯 (TPE) 和六苯基苯 (HPB) 等具有螺旋桨形式的分子[1]。在此报告中, 我们将介绍基于螺旋桨形式的分子的超分子体系, 它们不仅仅具有 AIE 性质, 而且展现出手性传递的功能。因此, AIE 超分子体系实现对手性生物分子, 包括核苷、氨基酸、多肽以及蛋白质的分子识别和手性传递, 并且通过探索手性诱导所产生的独特的 CD 信号, 实现了在水相体系中的手性光学传感、高精度阵列识别和手性传递机制等方面的应用[2-8]。

FB03-05**多组分配位金属笼**

张明明*

西安交通大学

金属笼状化合物是通过配位作用构筑的三维笼状结构, 被广泛地应用于吸附与分离, 控制释放以及催化等领域。将荧光性质引入到该类化合物中来构筑荧光金属笼状化合物, 可以进一步开拓其作为化学与生物传感, 光电器件的应用。然而, 由于过渡金属的重原子效应以及金属到配体的电荷转移等一系列原因, 发光金属笼状化合物的研究还比较少。针对这一问题, 我们利用四苯基乙烯、苝酰亚胺以及卟啉等荧光分子作为配体, 通过金属配位作用构筑了一系列荧光金属笼状化合物, 并拓展了该类笼状化合物在化学传感, 有机光催化以及信息加密等领域的应用。

FB03-06**分子内空间共轭体系的精确合成与性质研究**

丘子杰*

香港中文大学 (深圳)

在经典的分子科学理论中, 通过共价键形成的电子共轭被认为是有机发光材料电子跃迁的基础, 可以通过调整 π 共轭的程度来实现不同的发射波长。但是, 科学家们也发现了一些经典的价键共轭理论难以解释的现象, 比如没有大 π 共轭结构的分子, 如蛋白质和糖类, 虽然在溶液状态下没有荧光, 但是其聚集态或固态下, 这类非共轭分子仍能被紫外光激发, 发射出可见光波段的荧光, 这类现象的机理被归纳为聚集导致的簇发光。

受四苯基乙烯的分子内空间相互作用的启发, 本工作设计合成了一系列四萘基乙烷衍生物, 相比于四苯基乙烯中的苯基, 萘基具有更大的位阻, 因而四萘基乙烷具有更为扭曲的分子结构, 单晶衍射结果表明其萘基之间存在较强的空间相互作用, 在稀溶液下, 单分子内即可形成稳定的萘基聚集体发光。相关的四萘基乙烷衍生物, 还具有丰富的分子构型和手性光学性质。本工作丰富了空间共轭分子的多样性, 并进一步揭示了空间共轭对于发光性质的独特影响。

FB03-07**脂质调控蛋白构象实现类病毒纳米载体的 siRNA 靶向脑胶质瘤递送研究**

朱晗、王逸凡、王志刚、庞代文、刘书琳*

南开大学

胶质母细胞瘤（GBM）作为中枢神经系统（CNS）最常见、最致命的肿瘤之一，对人类健康的威胁日趋严重。由于血脑屏障（BBB）的存在，临床上迫切需要解决靶向脑部的 RNA 疗法的递送难题。而解决这些问题的主要难点之一在于脑部微环境极其复杂，如何在保证纳米载体穿越 BBB 的同时能够将 RNA 药物高效、精确地输送到脑部特定肿瘤细胞亟待解决。为了克服这些问题，本研究提出了一种通过脂质纳米环境调控蛋白质构象的策略，体外筛选出了具有出色人脑星形胶质母细胞瘤细胞（U87MG）选择性靶向能力的类病毒纳米颗粒（pVMNs）。pVMNs 由哺乳动物质膜外叶的主要脂质成分构成，日本脑炎病毒（JEV）的包膜 E 蛋白嵌入其中。分子动力学模拟结果表明，通过系统性改变脂质成分会引起 E 蛋白构象变化，不同细胞上 E 蛋白的主要受体与 E 蛋白之间特定残基的氢键和疏水相互作用不同，导致 pVMNs 可以特异性靶向 U87MG。随后将治疗性 siRNA 封装其中形成 VMNs@siRNA 纳米系统，体外研究结果表明，VMNs@siRNA 不仅可以有效穿越 BBB，还保留了 JEV 病毒的溶酶体逃逸能力，可将 siRNA 在肿瘤细胞内高效释放。体内抗肿瘤活性实验证明，VMNs@siRNA 能够靶向脑部 GBM 区域，显著延缓了肿瘤在脑部的生长并且延长了 GBM 小鼠的生存时间（中位生存时间 38 天），相比之下，接受 PBS 对照治疗的小鼠则在 25 天内全部死亡。这项研究为定制设计具有独特细胞选择性靶向能力的 VMNs 奠定了基础，并为有效治疗 CNS 肿瘤提供了可能。

FB03-08**蛋白靶向染料用于生物成像和临床诊断**

朱守俊*

吉林大学

我们开发了系列花青染料探针库，对染料/蛋白复合物的综合性能进行了系统测试，研究了其结合位点以及染料结构与结合程度的关系。获得了超稳定的染料/蛋白复合物，我们还评估了它们的药代动力学和长期成像能力，确定了花青染料与白蛋白的超分子/共价结合的几个关键参数，包括与氯(C1)的六元环、小的侧基尺寸和相对疏水性。复合物(IR-780@albumin)表现出明显改善的光稳定性，可作为近红外二区生物成像的持久成像探针。我们的发现解决了临床可用的花青染料的光漂白问题，丰富了近红外二区生物成像和成像引导手术的探针库。我们进一步利用 β -乳球蛋白 (β -LG) 和含氯花菁染料 (IR-780) 的自驱动共价键合，开发了一种可肾脏代谢的花青染料/蛋白复合探针。该探针 (β -LG@IR-780) 解决了目前使用的 NIR-II 荧光团的亮度有限以及体内长期滞留的问题，展现出优异的生物安全性和快速肾脏清除能力。该探针可实现对血管和淋巴引流系统的生理及病理状况的无创精准的可视化，便于影像引导手术和术后无创监测。

FB03-09**近红外二区生物医用光功能纳米聚集体**王东*¹、唐本忠²

1. 深圳大学

2. 香港中文大学（深圳）

得益于其生物安全性好、光物理性质可调、易于合成和功能化修饰、出色的荧光和光敏性能、以及可便于构筑多模态诊疗试剂等优势，聚集诱导发光（AIE）材料在光学成像和诊疗领域取得了重大突破进展。我们依托材料学和生物医学的学科交叉，构建了一系列性能优异的近红外二区生物医用光功能纳米聚集体；揭示了材料结构与光敏性能之间的构效关系；实现了对动物活体的肿瘤靶向成像、细菌区分检测、生理环境变化的体内示踪、生物活性分子检测，以及疾病的多模态光学治疗。在这些工作的基础上，提出了“聚

集增强诊疗”新概念。

FB03-10

双自由基特征有机小分子光热材料开发及其应用探索

顾星桂*

北京化工大学

随着光热材料的发展,有机共轭小分子通过非辐射衰变将近红外(NIR)光转化为热,表现出具有柔性、结构多样、可调等独特的优点,近年来在能源、生物医学等领域引起了越来越多的兴趣,但同时也面临着光漂白、吸收波长限制和吸收能力有限等不足。为此,构建稳定、高摩尔吸光系数、高效率的有机小分子光热材料是进一步拓展其广泛实际应用的关键。为了突破现有有机小分子光热材料的严重不足,我们从分子结构设计和聚集态堆积调控两个方面,率先设计开发了一类具有稳定双自由基特征的新型有机小分子光热材料。通过构建稳定的强吸电子平面刚性核,引入强供电子的给体单元,通过强电子给受体作用,拓展分子吸收。另外,通过调整聚集态 $\pi-\pi$ 堆积,进一步拓展、拓宽分子聚集态吸收,使其在聚集态下具有从紫外到近红外的宽谱吸收,且摩尔吸收系数达到 10^5 以上。更为有意思的是,双自由基特征的引入,一方面有效拓展了有机小分子的吸收红移;另外一方面,有力促进了材料的高效光热转换。这类材料在 808 nm 激光照射下,光热转换效率可高达 90% 以上。由此,可被用于肿瘤的光声成像和光热治疗。此外,还利用所设计分子的聚集态太阳光宽吸收特征,实现太阳光的高效捕获,拓展其在海水淡化和光热电转换等方面的应用。

FB03-11

刺激响应型 AIE 荧光探针的设计与应用研究

谢会琳¹、张健全²、唐本忠^{*1,2}

1. 香港科技大学

2. 香港中文大学(深圳)

有机荧光探针具有实时监测、灵敏性高、生物相容性好等优点,在生物医学、环境监测、智能材料等领域具有广泛的应用前景。研制具有优异检测和刺激响应功能的有机荧光探针,实现活性物质的标记和病灶部位的可视化,对于在临床上实现癌症等重大疾病的灵敏诊断具有重要的科学意义。但是,如何通过设计分子与聚集态结构,实现荧光探针性能的精准调控,仍是一个亟待解决的科学问题。报告人将聚集诱导发光(AIE)基元引入到荧光分子设计中,针对不同的应用场景,开发了一系列具有光响应性、可调性高、易制备、应用范围广的有机荧光探针材料,深入探索了其分子设计策略、材料制备方法及在不同领域中的应用,揭示了材料的结构-性能-机理-应用的关系,为刺激响应型 AIE 荧光材料的设计和应用提供了新思路和新方法。

FB03-12

Intracellularly Manipulable Aggregation Facilitates Targeting Therapeutics

汪文锦, 赵征, 唐本忠*

香港中文大学(深圳)附属第二医院, 聚集诱导发光临床转化研究中心

The dynamic modulation of small molecule aggregation represents a crucial research objective for scientists. However, the intricate and dynamic nature of *in vivo* environments impede precise control over individual molecular aggregations. By exploiting the inherent metabolic characteristics present within tumors, innovative strategies can be devised to regulate the aggregation process of aggregate-induced emission luminogens (AIEgens) through tumor-specific enzymes, tumors specific microenvironments, and metabolites associated with these malignancies. This would facilitate targeted aggregations exclusively within tumors while optimizing precision

therapeutics not only for neoplasms but also other ailments. Within this investigation, we present a comprehensive overview of potential strategies for manipulating AIEgens aggregation processes while also presenting our latest achievements in applying this strategy.

FB03-13

高效可溶液加工 n 型共轭聚合物及其器件

黄飞*

华南理工大学

自上世纪 70 年代以来, 导电聚乙炔的发现使得“合成金属”成为高分子科学的新兴领域。然而, 聚乙炔不溶不熔, 难以加工成为实用材料。曹镛等人于 1992 年提出“对阴离子诱导加工”的方法, 实现导电聚苯胺的溶液加工。之后一系列可溶液加工的导电聚合物被发展出来, 并得到广泛应用。然而, 目前大部分导电聚合物为 p 型材料, 有机 n 型高导材料一直受限。为了实现导电聚合物的溶解, 通常需要在侧链引入极性基团。我们通过主链设计以及引入极性侧链 (如季铵盐等), 实现多种水/醇溶 n 型材料的制备, 并在有机光电器件中取得广泛应用。此外, 侧链极性基团还能实现对主链的 n 型自掺杂, 从而提升电子传输性能。最近, 我们提出了一种新的导电聚合物构筑策略, 将氧化聚合与还原掺杂相结合, 实现多种具备高电导率的 n 型导电聚合物的制备, 其与溶液具有相互作用, 无需表面活性剂以及烷基侧链即可实现溶液加工, 有望为柔性印刷透明电极的制备以及有机电子器件提供新的机遇。

参考文献

- [1] Cao, Y.; Smith, P.; Heeger A. J. Synth. Met. 1992, 48, 901.
- [2] Wu, Z.; Sun, C.; Dong, S.; Jiang, X.; Wu, S.; Wu, H.; Yip, H.-L.; Huang, F.; Cao, Y.; J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 2004.
- [3] Tang, H.; Liang, Y.; Liu, C.; Hu, Z.; Deng, Y.; Guo, H.; Yu, Z.; Song, A.; Zhao, H.; Zhao, D.; Zhang, Y.; Guo, X.; Pei, J.; Ma, Y.; Cao, Y.; Huang, F. Nature 2022, 611, 271.
- [4] Tang, H.; Bai, Y.; Zhao, H.; Qin, X.; Hu, Z.; Zhou, C.; Huang, F.; Cao, Y. Adv. Mater. 2024, 36, 2212236.

FB03-14

分子及其聚集态结构调控新型刺激响应性有机材料发光性能

池振国*

中山大学

有机发光材料在发光器件、传感、信息加密防伪以及生物成像与诊疗等方面具有重要的应用。在这些应用场景中, 有机发光材料分子处于固体或聚集状态, 所表现出来的宏观性能主要是分子聚集体的性能。分子聚集体的性能与单个分子有密切联系, 但也存在较大差异甚至是完全不同。本报告主要介绍本课题组近年来通过分子设计调节有机发光材料的聚集态结构, 并进一步调控其刺激响应发光性能, 具体包括聚集诱导热激活延迟荧光材料、有机长余辉材料、柔性氢键有机框架材料的结构与性能调控。

参考文献

- [1] Huang, Q.; Chen, X.; Li, W.; Yang, Z.; Zhang, Y.; Zhao, J.; Chi, Z. Chem 2023, 9, 1241.
- [2] Li, W.; Huang, Q.; Mao, Z.; He, X.; Ma, D.; Zhao, J.; Lam, J. W. Y.; Zhang, Y.; Tang, B. Z.; Chi, Z. Nat. Commun. 2022, 13, 7423.
- [3] Chen, J.; Chen, X.; Cao, L.; Deng, J.; Chi, Z.; Liu, B. Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202200343.
- [4] Chen, Z.; Chen, X.; Ma, D.; Mao, Z.; Zhao, J.; Chi, Z. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 16748.
- [5] Deng, H.; Li, G.; Xie, H.; Yang, Z.; Mao, Z.; Zhao, J.; Yang, Z.; Zhang, Y.; Chi, Z. Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e20231763.
- [6] Huang, Q.; Li, W.; Mao, Z.; Zhang, H.; Li, Y.; Ma, D.; Wu, H.; Zhao, J.; Yang, Z.; Zhang, Y.; Gong, L.;

Aldred, M. P.; Chi, Z. Chem 2021, 7, 1321.

[7] Yang, Z.; Xu, C.; Li, W.; Mao, Z.; Ge, X.; Huang, Q.; Deng, H.; Zhao, J.; Gu, F. L.; Zhang, Y.; Chi, Z. Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 17451.

[8] Li, W.; Huang, Q.; Mao, Z.; Zhao, J.; Wu, H.; Chen, J.; Yang, Z.; Li, Y.; Yang, Z.; Zhang, Y.; Aldred, M. P.; Chi, Z. Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 3739.

FB03-15

光电功能紫精分子及聚集体

何刚*

西安交通大学

聚集体通常表现出与单分子状态不同的光电性质和功能，这使其能够在传感、生物诊疗方面具有潜在的应用。课题组围绕光电功能紫精分子与聚集体的阳离子自由基产生、稳定及性能调控机制关键科学问题，以光电功能为导向，提出了“引入重主族元素精确调控紫精及阳离子自由基空间电子结构”创新学术思路，实现了紫精阳离子自由基在分子和聚集体层面的多途径产生、稳定性控制、功能调控与拓展。基于含硫族元素紫精阳离子自由基特殊的阳离子骨架、可见光激发及高反应活性，将其有效地与带负电的细菌通过静电作用绑定，缩短光敏剂与细菌的作用距离，促进单线态氧的产生，同时能够在伤口或肿瘤部位聚集，在可见光下与细菌接触后产生大量自由基，进一步提高了光动力治疗的效率。将传统的声敏剂四苯基卟啉与新型光敏剂含碲紫精相结合，在超声作用下可产生大量阳离子自由基，并通过电子传递机制高效地产生 ROS 自由基，进而在体内和体外有效地杀死厌氧的牙龈卟啉单胞菌，从而对牙周炎实现治疗，并改善牙齿与口腔环境。将含硒紫精衍生物与水凝胶相结合，创造性地将电极内置于导电凝胶中，制备了反三明治结构的光电双响应的水凝胶伤口敷料，实现了光电协同自由基的生成，极大加速了炎症伤口的愈合。将噻吩紫精电致变色材料与离子凝胶相结合，研制出具有应变感应性能的变色传感材料，该材料可将拉伸信号转化为光学信号，从而实现了对应变的可视化传感，为研制可穿戴变色传感器件提供了一种简便易行的方法。

FB03-16

基于激光激发的聚集诱导发光增强原理的超分辨率纳米光子存储技术的研究

文静*、顾敏

上海理工大学

不断增长的全球数据总量急需大容量存储技术。目前数据中心的存储方式主要基于半导体闪存设备和硬盘，但具有高能耗负担、高运行成本和短寿命等缺陷。光数据存储（ODS, Optical Data Storage）技术是一种低成本的长期档案数据存储技术。然而，光盘的发展受到其低存储容量的限制。为了解决问题，通过将平面记录架构扩展至数百层的三维存储架构，同时打破存储记录点的光学衍射极限屏障，可将光盘的单盘等效存储容量提高至 Pb 级。开发了一种掺有聚集诱导发光染料的有机树脂薄膜的光学记录介质，该介质可以与飞秒激光束相互作用产生记录点；薄膜具有高透明度和均匀性，可进行多层三维存储并实现写入和读出。同时，另一束光可以抑制记录点的写入，从而产生一个具有超衍射极限尺寸的数据记录点。在聚集诱导发光染料分子掺杂的有机树脂的材料体系下，利用双光束的手段，提出了基于激光激发的聚集诱导发光的荧光增强效应，并实现了纳米尺度下的荧光发光调控。最终实现了该有机树脂薄膜在光存储技术中的写入和读出过程中均突破了衍射极限的限制。

FB03-17

有机光伏与聚集体科学

孙会靓*
赣南师范大学

有机半导体是当今材料化学领域的前沿课题，具有重要的商业应用价值。由于有机电子器件中普遍存在的 p-n 结和互补电路，n-型有机/高分子半导体对有机电子器件不可或缺。相比 p 型材料，n-型高分子在材料设计与合成、分子能级和聚集态结构调控等方面的巨大挑战，使得 n-型高分子材料种类少且性能明显滞后，限制了高性能器件和电路的发展，亟需加快 n-型高分子半导体材料创制方面的突破。本次报告将介绍 n-型高分子半导体材料的发展以及报告人在新型双噻吩酰亚胺衍生物化学创制及其 n-型高分子半导体材料的设计与合成方面的研究工作。重点介绍新型 n-型高分子半导体材料在有机光伏电池中的应用。

FB03-18

基于光裂解反应实现多重荧光调节体系并用于动态 4D 信息加密

路琳、赵征*、唐本忠
香港中文大学(深圳)

在自然界中，许多动物可以响应外部刺激控制其外观，例如变色龙通过改变颜色实现伪装和隐藏。受自然现象启发，研究者们设计了一系列智能荧光变色体系，可以在光照下改变其发光强度或颜色，这类材料在信息存储、防伪和生物应用等领域有巨大潜力。光控荧光变色现象主要来源于光反应，包括光异构化、光环化、光二聚和光裂解等。然而，现有的荧光变色材料通常存在荧光对比度低、荧光响应单一（仅强度或颜色变化）的缺点，限制了其作为智能材料的潜在应用，因此开发新型光反应并将其应用于荧光调控体系是十分必要的。

为此，我们开发了一类具有聚集诱导发光（AIE）效应和多重荧光变色特性的光裂解化合物，集成了三种功能单元：发光单元、活性氧生成单元和可氧化裂解的活化烯烃。化合物通过光照产生活性氧可以自催化分子骨架中双键的断裂生成羰基化合物，导致荧光性质的改变。这一过程使得化合物在光照下能够迅速响应并改变其荧光的颜色和强度，实现从橙色到白色最后到蓝色的多色发光调节。高效的双键光裂解反应是实现多重荧光变色的基础，使得材料能够在应用中表现出优异的动态控制能力。利用化合物在不同时间和光照条件下的荧光变化，设计了一种 4D 编码系统。通过控制编码图案的光照时间得到不同的颜色组合，实现时间和空间上的多重信息存储与加密。该 4D 编码系统极大地提高了信息存储密度和解码难度，展示了其在高级防伪和信息安全领域的应用前景。该研究通过集成 AIE 效应和光裂解反应特性，有望在动态信息存储、防伪以及光可控释放应用中展现出巨大潜力，推动可控荧光变色材料的发展和应用前景。

FB03-19

有机晶体材料中的磁-电、磁-光效应

陈志艳¹、秦伟*²

1. 青岛大学
2. 山东大学

通过引入新分子的方式来打破有机共晶结构的对称性，促使了有机共晶中磁-电、磁-光耦合等新奇自旋现象的涌现。首先，我们通过将新分子引入有机二元共晶的单元中，成功制备了多个有机全组分三元晶体，随着第三个给体分子的引入，晶体的晶格构型发生了改变，同时空穴的局域性变差，进而有效调控了三元晶体中的自旋极化强度。更重要的是，第三元诱导了相邻给体和受体之间的二聚化，形成了晶格对称性破缺，随之产生的非极性-极性相变导致了偶极极化。磁场可以有效地调控极性电荷转移晶体中的偶极极化，从而产生磁电耦合效应。另外，通过在手性二元晶体中加入非手性第三组分，制备了手性有机三元晶体，并观察到手性光耦合和手性光活性对磁场的依赖性。非手性结构向手性结构的转变对光的偏振态和电子自旋共振信号产生了显著的影响。此外，在具有明显手性轨道的手性三元晶体中，

观察到圆偏振光子与自旋之间的耦合，产生明显的磁场透过率回线。总的来说，这项工作揭示了有机三元共晶中自旋性能研究的巨大潜力，不仅为有机多铁磁电材料的设计提供了一条潜在可能的路径，而且为揭示自旋-光子相互作用的机制提供了新的载体。

【参考文献】

[1] Chen Z.; Lu X.; Liu J.; Qin W. *Small* 2023, 19(11): 2207143.

[2] Chen Z.; Lv Y.; Qin W. *Sci China Chem* 2024, DOI: 10.1007/s11426-023-1932-4.

FB03-20

溶液和聚集体中的高效圆偏振近红外磷光

刘丹、汪文锦、丘子杰、赵征、唐本忠*

香港中文大学，深圳

圆偏振磷光（CPP）是一种具有手性光学活性的自旋禁止辐射过程。CPP 机制远未得到全面了解，主要是由于具有明确结构的小手性有机分子有效三线态发射的例子有限。在此，报道了一对手性对映体 R/S-BBTI，其特征是具有重碘原子的高度扭曲的螺旋锁环杂芳族化合物。这些手性分子发出近红外磷光，并在紫外线照射后在二甲亚砜（DMSO）溶液中表现出高达 0.013 的不对称因子，效率为 4.2%，寿命为 119 μ s。他们的晶体表现出高效的 CPP，量子效率为 7.0%，寿命为 166 μ s。广泛的实验手性光学研究与理论计算相结合揭示了一种有效的自旋翻转过程，可以调节电子和磁跃迁偶极矩以增强 CPP 性能。此外，R/S-BBTI 的磷光对氧敏感并在 DMSO 中被光激活。因此，R/S-BBTI 可用于细胞和肿瘤的缺氧成像，扩大了 CPP 的应用范围。

FB03-21

Unveiling the Internal Structure of 3D-Printed Stimuli-Responsive Materials with a Molecular Probe

Weijun Wu, Xiaowo Kang, Yu Hu, Zhi Luo*

Southern University of Science and Technology

Stimuli-responsive 3D printing, or 4D printing, offers unparalleled potential in various research fields, enabling the combination of complicated mechanical design with programmable functionalities. The switchable polymer network structures, e.g., crystalline domains, free volume, and phase separation, are the key to achieving macroscopic responsiveness. However, despite a growing repertoire of new materials, most studies rely on rudimentary imaging techniques to visualize the materials' shape change under external stimuli. Seldomly could such macroscopic behavior be correlated with the nanoscopic structures and dynamics of polymers. Here, leveraging the AIE phenomena, we introduce a novel method that can offer direct insights into the network structures and the chain mobility of the printed polymers. We developed a new photo-polymerizable polyurethane with multiple responsive characteristics, including temperature, mechanical strain, and pH, as an example of 4D printing materials. By embedding AIEgen in the polymer matrix, we demonstrated that the emission intensity and wavelength can serve as reporters and correlate the intramolecular motions of the AIEgen with the stimuli responsive properties of the polymers. These observations were confirmed by small-angle X-ray scattering revealing the underpinning structural evolution. With potential applications for real-time structural monitoring, this study provides a new tool for the characterization of 4D printed materials.

FB03-22

磁性纳米探针及其肿瘤诊疗功能调控

侯仰龙^{1,2,*}¹中山大学材料学院, 深圳市, 518107²北京大学, 磁电功能材料与器件北京市重点实验室, 北京市, 100871

生物影像介导的肿瘤诊疗由于其独特的优势在医工交叉领域逐渐兴起, 并表现出巨大的潜在应用价值。基于此, 我们设计开发了一系列多功能磁性纳米诊疗探针。首次报道了单相 Fe_5C_2 纳米颗粒的通用制备方法^[1], 并发现其光热治疗功能, 将其开发为生物相容性良好的多功能探针 $\text{Fe}_5\text{C}_2\text{-Z}_{\text{HER}2:342}$, 用于磁共振成像(MRI)/多光谱光声断层摄影(MOST), 并引导靶向光热治疗(PTT)^[2]。为了进一步深入探究碳化铁纳米颗粒的催化性能, 构建了免疫调节型纳米酶 $\text{Cu@Fe}_2\text{C@mSiO}_2\text{-R848-ICG-AS1411}$ ^[3] 和可视化纳米酶 $\text{Ag}_2\text{S@Fe}_2\text{C-DSPE-PEG-iRGD}$ ^[4], 在近红外二区(NIR-II)荧光成像和 MRI 双模态引导下, 实现了 PTT、化学动力学治疗(CDT)与其他药物协同治疗。同时, 利用磁性纳米材料药物递送功能和对肿瘤微环境敏感性, 分别构建了光/pH 双响应的尺寸可收缩纳米胶囊 $\text{DOX-ICG@Fe/FeO-PPP-FA}$ ^[5] 和诊疗探针 FeS-PEG-CAI ^[6], 通过 MRI 和荧光成像或光声成像相结合, 实现了多种方式协同治疗过程的可视化^[7]。综上所述, 我们开发了多种多功能协同作用的肿瘤诊疗磁性纳米探针, 旨在优化生物影像介导的肿瘤治疗, 以此推动磁性纳米颗粒在该领域的应用前景, 为临床转化奠定基础^[8]。

参考文献

- [1] C. Yang, H. Zhao, Y. Hou, D. Ma, *J. Am. Chem. Soc.* 2012, 134, 15814.
- [2] J. Yu, C. Yang, J. Li, Y. Ding, L. Zhang, M. Z. Yousaf, J. Lin, R. Pang, L. Wei, L. Xu, F. Sheng, C. Li, G. Li, L. Zhao, Y. Hou, *Adv. Mater.* 2014, 26, 4114.
- [3] S. Wang, Z. Wang, Z. Li, X. Zhang, H. Zhang, T. Zhang, X. Meng, F. Sheng, Y. Hou, *Sci. Adv.* 2022, 8, eabn3883.
- [4] Z. Wang, Z. Li, Z. Sun, S. Wang, Z. Ali, S. Zhu, S. Liu, Q. Ren, F. Sheng, B. Wang, Y. Hou, *Sci. Adv.* 2020, 6, eabc8733.
- [5] Z. Wang, Y. Ju, Z. Ali, H. Yin, F. Sheng, J. Lin, B. Wang, Y. Hou, *Nat. Commun.* 2019, 10, 4418.
- [6] J. Wang, Z. Sun, S. Wang, C. Zhao, J. Xu, S. Gao, M. Yang, F. Sheng, S. Gao, Y. Hou, *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144, 19884–19895.
- [7] Z. Sun, T. Wang, J. Wang, J. Xu, T. Shen, T. Zhang, B. Zhang, S. Gao, C. Zhao, M. Yang, F. Sheng, J. Yu, and Y. Hou, *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 11019–11032.
- [8] J. Wang, Z. Fang, C. Zhao, Z. Sun, S. Gao, B. Zhang, D. Qiu, M. Yang, F. Sheng, S. Gao, and Y. Hou*, *Adv. Mater.* 2023, 2307006.

FB03-23

BODIPY 光诊疗剂的设计合成及其应用

蓝敏焕*

中南大学

光诊疗是一种新型的临床治疗肿瘤的方法, 具有精准定位和光控治疗的优点, 为癌症等病症的精确诊断和高效治疗提供了有效的手段, 研发高性能的光诊疗剂是推动光诊疗临床应用的关键。氟硼二吡咯染料(BODIPY)类染料作为一种常见的近红外荧光染料, 具有摩尔消光系数高、荧光量子产率高、光稳定性好、结构易于修饰、不易受环境溶液 pH 影响等优点, 已逐渐成为近几年研究的热点。我们通过调控 BODIPY 的共轭结构、引入推/拉电子基团、共价偶联/超分子组装化疗药物等策略, 设计合成了几种多功能 BODIPY 的光诊疗剂, 采用细胞和小鼠肿瘤模型评估了其光诊疗性能。

FB03-24

近红外光诊疗试剂创新与应用研究

王建国*

内蒙古大学

兼具近红外区 (NIR) 荧光成像和治疗的光诊疗试剂在癌症精准诊断和个性化治疗领域具有广阔的应用前景。作为光诊疗系统的核心, 高性能光诊疗试剂的开发对光诊疗学的研究和发展至关重要。因此, 如何通过分子工程策略平衡有机光诊疗试剂的竞争性辐射和非辐射过程是提高光诊疗试剂性能的关键因素。为了构建高性能光诊疗试剂, 报告人课题组在有机光诊疗试剂的分子设计开发方面提出了如下策略: (i) 为了解决肿瘤缺氧严重损害 II 型光动力疗法的治疗效果, 提出一种“受体平面化-供体旋转”分子设计策略构建具有高光热转换效率和活性氧产生能力的近红外发光 I 型 AIE 光诊疗试剂[1]。(ii) 通过深入研究分子结构与分子堆积方式之间的关系, 首次提出了一种“结构异构化诱导三维空间 D-A 互锁网络”策略, 在对 NIR-II 有机光诊疗试剂进行纳米封装过程中调控分子堆积方式, 设计了一种具有优异的光热稳定性、高光热转换效率和活性氧生成能力的 NIR-II 有机光诊疗试剂[2]。(iii) 为了实现生物体内高分辨率成像与高效抗肿瘤能力, 提出一种“氟化”分子设计策略构建同时提高 NIR-II 荧光量子产率和光热转换效率的平面 A-D-A 型光诊疗试剂, 得到一种兼具明亮的 NIR-II 发光和高光热转换效率的有机小分子光诊疗试剂, 并将其成功应用到 NIR-II 荧光成像引导的肿瘤治疗[3]。这些分子工程策略为 NIR 有机光诊疗试剂的设计与开发提供了一种新的思路, 在抗癌研究中具有潜在的生物学应用价值。

FB03-25

基于苯并[c]噻吩单元 NIR-II AIE 材料的设计及其光学诊疗性能研究

燕鼎元、王东*

深圳大学

近红外二区 (NIR-II, 1000–1700 nm) 生物成像窗口由于光散射程度低、生物自发荧光背景干扰小等特点使得其在生物成像中显示出卓越的性能。然而芳香稠环有机材料存在聚集导致荧光淬灭 (ACQ) 现象。所幸, 唐本忠院士于 2001 年首次发现了具有“聚集诱导发光 (AIE)”的性能的分子。具备扭曲结构的 AIE 分子可以很好的解决聚集状态下由于 $\pi-\pi$ 堆积造成的荧光亮度不足的问题。此外, 由于多转子单元的存在使得分子在聚集态下仍可以保持局部转动/振动, 从而产生热能用于光热治疗。

苯并[c]噻吩作为大位阻、富电子的电子给体/ π -桥, 有利于构筑 NIR-II AIE 材料。通过系统的研究, 我们团队首次使用苯并[c]噻吩构建出一系列 NIR-II AIE, 展现出优异的光学诊疗性能, 并将其成功的应用在抗肿瘤和抗菌中。

[1] Yan, D.; Xie, W.; Zhang, J.; Wang, L.; Wang, D.; Tang, B. Z, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 26769.

[2] Yan, D.; Wang, M.; Wu, Q.; Niu, N.; Li, M.; Song, R.; Rao, J.; Kang, M.; Zhang, Z.; Zhou, F.; Wang, D.; Tang, B. Z, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 61, e202202614.

[3] Yan, D.; Huang, Y.; Zhang, J.; Wu, Q.; Song, G.; Ji, J.; Jin, Q.; Wang D.; Tang, B. Z, *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 25705.

FB03-26

靶向并清除衰老细胞的荧光探针的构筑及其在骨质疏松治疗中的应用

高鑫¹、胡祎辰²、张应飞¹、黄嫣嫣²、张关心²、张晓¹、周永胜¹、张德清²

1. 北京大学口腔医学院

2. 中国科学院化学研究所

随着全球人口老龄化问题的加剧，衰老相关疾病的发病率不断上升，已成为一个重大的公共卫生问题。但是目前已知的抗衰老药物仍存在广谱性不强、特异性不高等问题。因此，如何特异性清除体内衰老细胞是目前需要解决的难题。

老年性骨质疏松症病理生理学的一个关键因素是骨组织中衰老细胞（SnCs）的积累。而这些细胞阻碍了骨形成细胞（如骨髓间充质干细胞和成骨细胞）的功能，导致了骨质流失。针对上述的问题，我们设计合成了一个含 β -D-半乳糖单元的四苯基乙烯衍生物（TPE-Gal）并开展了研究。其设计原理如下：TPE-Gal 中的 β -D-半乳糖单元可以被溶酶体衰老相关的 β -半乳糖苷酶（SA- β -Gal）选择性切除糖苷键，并生成 TPE-OH。而我们前期的工作表明 TPE-OH 具有强的细胞毒性，因此可以消除衰老细胞。实验结果表明， β -半乳糖苷酶选择性水解 TPE-Gal 生成的 TPE-OH 通过增加衰老细胞内的活性氧水平，导致了衰老细胞的非炎性凋亡。而进一步的衰老加速型小鼠（SAMP6）的活体实验表明这种靶向清除机制可以缓解骨质疏松症状，促进骨功能再生。

FB03-27

生物分子玻璃的可控构筑与功能应用

闫学海*

中国科学院过程工程研究所

玻璃是人类使用历史最悠久也是最广泛的材料之一，玻璃的发明和技术进步极大地加速了人类文明的进程。生物分子玻璃是玻璃家族的新成员，是由我国科学家在国际上率先开拓的玻璃材料研究的新领域。它是一类以氨基酸、肽等生物分子为原料，基于非共价作用形成的玻璃新体系，其具有超越于传统玻璃的独特性质，如更优异的透光率、灵活的可加工性、可生物降解性、生物相容性、生态环境友好等。该生物分子玻璃在使用期间保持结构稳定，具备玻璃“强硬度、光学透明、易加工”的特性，可在生物酶等特定条件下降解为环境无害的产物，并被生态系统循环再利用。因此，发展基于非共价键绿色化学的生物分子玻璃材料对于实现未来循环经济、绿色低碳的意义重大。生物分子玻璃的发现入选了维基百科生物技术年鉴，被评价为 2023 年度重要创新性（Notable Innovations）发现之一。

FB03-28

富氧高分子合成及其发光和导电功能

张兴宏*

浙江大学

本次汇报我们课题组在富氧高分子合成、发光高分子、高分子电解质研究领域的进展。在合成高分子领域，近期我们发展了性能媲美传统高分子材料的富氧族元素高分子，主要有，发展出了有机催化“逐步/加成聚合”和“环酸酐阳离子共聚”两种聚酯的合成新方法，得到了具有可化学循环和可降解的新型聚酯，力学性能类似聚烯烃；在发光高分子材料领域，我们在唐本忠院士指导下，提出了聚合诱导发光（Polymerization-induced emission, PIE）的策略，通过采用精准合成化学的手段，从不发光的小分子出发制备结构明确、丰富的非共轭高分子，揭示结构与性能关系，以期回答发光机制问题。近期我们成功制备了在蓝光到近红外光波段全谱发射的非共轭高分子；成功采用富氧聚酯制备了高分子电解质，具有优异的全电池性能。

FB03-29

机械互锁聚合物的拓扑设计合成与构效关系研究

颜徐州*
上海交通大学

机械互锁聚合物(Mechanically Interlocked Polymers)是一类由机械键(Mechanical Bonds)连接的特殊种类拓扑聚合物。因机械键互锁组分可进行非解离的分子内运动,机械互锁聚合物在理论上可兼具共价聚合物的机械性能和超分子聚合物的动态性能等优点,代表了一类“刚柔并济”的聚合物材料。因此,开展机械互锁聚合物精细化设计、高效制备与性能研究不仅对发展拓扑聚合物新材料具有重要意义,而且蕴藏着发现高分子物理新现象的契机。其背后的关键科学问题是机械互锁聚合物微观机械键运动和宏观机械性能间的构效关系。针对上述问题的思考,我们提出了“机械键高密度化”的研究策略,在以下三个方面开展研究工作:(1)发展了“动态互锁”、“先互锁再聚合”、“先超分子聚合再互锁”三类互锁聚合新策略,解决了运动模式多样化的高密度机械键体系的合成难题(物质基础);(2)研究了分子尺度的微观机械运动带来的宏观机械性能突破,建立微观机械运动和宏观机械性能间的构效关系,揭示了高密度机械键集成放大、连续能量耗散等高分子物理新现象(理论深化);(3)探索了源于机械互锁聚合物独特能量耗散机制在机械力自适应材料、气凝胶材料、储能材料等领域中的新应用(性能突破)。

FB03-30

新型稠杂环荧光功能高分子的制备及其应用

韩婷*¹、唐本忠²

1. 深圳大学

2. 香港中文大学(深圳)

用于制备功能高分子材料的新反应和新方法的开发和优化是高分子材料科学持续进步的关键,对于构筑具有新结构和新功能的高分子材料具有重要的推动作用。作为一类重要的功能高分子材料,稠杂环聚合物在耐高温材料、光电子器件、能源转换、荧光传感、膜分离技术、以及生物成像和治疗等领域均受到广泛关注。此类聚合物的传统合成方法主要依赖稠杂环活性单体参与的各种交叉偶联聚合或者利用含杂原子单体的环化缩合聚合来完成。然而,过渡金属催化的交叉偶联方法通常存在稠杂环活性单体合成成本高且难度大、反应原子经济性较低、反应副产物对环境不利等问题;环化缩聚反应大多聚合工艺较为繁琐,面临多官能度单体种类稀少且不易获得的挑战。当需要在稠杂环结构中引入多种功能性取代基时,更是会进一步加大这些传统方法的合成难度。因此,亟需发展能够将廉价易得的单体原料直接转化为稠杂环功能高分子的便捷、经济、高效的新型聚合反应,实现结构新颖多样且易于衍生的新型稠杂环功能高分子材料的快速构筑。

过渡金属催化的C-H活化及其与炔烃的环化串联反应(C-H活化/环化反应)是构建复杂稠杂环结构的高效合成手段,由此类反应发展而来的C-H活化/环化聚合反应具有简洁、经济、高效、环境友好等优点,能够打破传统方法在底物制备与产物结构多样性方面的局限,可将简单易得的非稠杂环单体直接转化为独特的稠杂环结构单元,为新型稠杂环聚合物的快速构筑提供了新途径。此外,由C-H活化/环化聚合生成的稠杂环结构单元具有多芳基取代的特点,是潜在的新型聚集诱导发光结构基元。本次报告将介绍近年来我们课题组在“新型稠杂环荧光功能高分子材料的制备及其应用”研究方向的最新进展,包括新型C-H活化/环化聚合反应的开发,新型稠杂环荧光功能高分子材料的设计、合成及其性质应用研究,在报告最后将对此领域的未来发展进行简单的展望。[1-2]

References

- [1] K. Wang, S. S. Yan, T. Han, D. Wang, B. Z. Tang, et al. J. Am. Chem. Soc., 144 (2022), 11788.
- [2] T. Han, Jacky W. Y. Lam, B. Z. Tang, et al. Nat. Commun., 10 (2019), 5483.

FB03-31

AIE Bioprobes for Clinical Laboratory Analysis

Lei Zheng (郑磊)*

Department of Laboratory Medicine, Nanfang Hospital, Southern Medical University (南方医科大学南方医院)

Laboratory medicine can provide clinical information to help diagnose and manage patient conditions and prevent disease. Advances in laboratory technology will determine the ability of clinical laboratories to provide reliable, timely and operable information. Fluorescent probe is an important technical basis for clinical laboratory medicine. Rapid development of fluorescence technology brings new opportunities for laboratory medicine. Fluorescent probes featured with aggregation-induced emission (AIE) attributes have emerged as ideal tools for high-performance bioprobes. AIE-bioprobes enjoy diverse superiorities, such as higher signal-to-noise ratio, lower background and better accuracy, sensitivity, and more prominent resistance to photobleaching. AIE bioprobes have been customized for a variety of uses, from cancer theronostics to chronic disease diagnosis to pathogen detection. In this review, a brief overview of recent advances in the application of AIE bioprobes in clinical laboratory medicine is given. Meanwhile, some important prospects and challenges are pointed out as well in the hope of intriguing more interests from researchers working in diverse areas into this exciting research field.

FB03-32

有机光致电荷转移络合物

黄文环, 张国庆*

合肥微尺度物质科学国家研究中心, 安徽省合肥市金寨路 96 号, 230026

有机分子之间的光诱导电荷转移通常导致基基缔合物(exciplex)或者自由基对(radical pair)的形成,但是这两类化学物种都不能稳定存在。具体来说,基基缔合物通常只有微秒级别的寿命,而自由基离子对则取决于周围的化学环境,在室温下的有机溶液中,通常也不能稳定存在。这里我们介绍一类新的光诱导的电荷转移产物——光致电荷转移络合物^[1](photo-induced charge-transfer complex, PCTC),以及其光物理性质、光谱表征和光化学应用的探索。我们发现某些有机电子给受体分子之间没有谱学上明显的基态相互作用,但是光照后可以导致光谱发生较大的差异,通过高分辨质谱、二维核磁共振、电子顺磁共振、吸收和时间分辨发射谱等多种谱学的表征,可以发现光的激发导致了分子间的偶联并且形成惰性气氛下、有机溶液中动力学稳定的化学物种PCTC。目前虽然无法通过实验或者理论计算模拟来判定PCTC是否为共价连接的化学物种,但相比起光照前的分子,PCTC明显具有更高的能量,并且能够跟分子氧快速发生化学反应而快速解离成为基态光照前的两个给受体组分。这些具有更高能量的PCTC可以用来进行高分子的光控自由基聚合(例如:聚丙烯酰胺的无杂端基可控催化聚合^[2])、二氧化碳的光催化还原反应、紫外光的储能和能量的释放等光化学反应。可以预期,这一类新的化学物种的研究能够为光化学领域带来新的理论和应用。

参考文献

- [1] Huang, W.; Zhang, X.; Su, H.; Zhang, B.; Feng, A.; Jiang, J.; Chen, B.*; Zhang, G*., *Chem*, **2024**, Accepted.
- [2] Huang, W.; Zhang, X.; Chen, J.; Zhang, B.; Chen, B.*; Zhang, G*. *ACS Catalysis*. **2023**, *4*: 2542.

FB03-33

金属团簇三重激发态动力学的超快谱学研究

周蒙*
中国科学技术大学

金属团簇是连接宏观和微观的重要桥梁，由于团簇的尺寸接近电子费米波长呈现出类似分子的性质。近年来，具有精确结构的金银等贵金属纳米团簇受到广泛关注，金属团簇的激发态过程由于其光电转换方面的应用至关重要。由于团簇中同时存在金属核与表面有机配体，导致团簇的激发态过程较为复杂，发光的机制尚不明确。近期，我们针对金属团簇的三重激发态动力学开展了系统研究。本报告将主要介绍团簇结构调控的激发态过程及其性质。瞬态光谱研究发现，金属团簇的激发态过程受到金属核尺寸、结构、形貌的调控，从而影响其发光与能量传递过程。同时，我们还发现团簇可以作为高效的三重态敏化剂将三重态能量传递给有机分子，从而实现激发态能量的高效利用。该结果对于进一步推动金属纳米团簇的应用具有重要意义。

FB03-34

非共价键作用力驱动下的复杂结构的精准构筑

李昊*
浙江大学

提高自组装合成的原子经济性、克服可逆化学键带来的产物易分解性，是超分子自组装领域尚需解决的重要科学问题。基于此科学问题，浙江大学李昊研究组取得了如下成果：1) 利用超分子驱动力提高目标分子的热力学稳定性，实现其精准构筑；2) 发展了基于亚胺杂原子衍生物的动态合成法，突破了“亚胺不适用于水相合成”的传统技术瓶颈；3) 利用多种超分子力的协同效应，驱动主客体识别，在水相体系实现了一系列特殊功能，如客体改性、同分异构体的拆分、手性光学纯度的快速标定；于水相中实现了高水合的阴离子的识别。

FB03-35

氢键诱导碳点自组装及其簇发光调控与应用

彭智利*
云南大学材料与能源学院

碳点在分散态 (dispersed state) 和聚集态 (aggregated state) 的发光显著不同，因此，如何实现碳点在聚集态的高效发光是近年来的一个研究热点。目前为止，研究人员对碳点的聚集诱导淬灭 (aggregation-caused-quenching, ACQ) 和聚集诱导发光 (aggregation-induced-emission, AIE) 两种聚集态下的典型发光行为研究比较深入；但是对其它类型的聚集态发光行为 (如聚集态下既有 ACQ，同时也有带隙的改变) 关注不足，研究不够深入。本报告中，作者拟探讨一种同时具备分散态和聚集态发光的碳点。在分散态下，该碳点的发光主要以碳点颗粒发光为主 (particle luminescence)；在聚集态下，其发光主要以碳点自组装后形成的团簇发光为主 (cluster luminescence)。机理研究表明，该碳点的颗粒、簇发光转化主要是通过调控碳点间氢键辅助下的空间共轭效应 (through-space conjugation) 来实现的。通过对分散条件的控制，可达到对该碳点颗粒、簇发光的细致调控，实现单一碳点的全光谱发光。该碳点的颗粒、簇双重发光特性在信息加密、防伪，LED 发光调控等领域也展现了潜在的应用。

FB03-36

Room Temperature Phosphorescent Nanofiber Membranes by Bio-fermentation

Xiaolin Nie¹, Junyi Gong¹, Zeyang Ding¹, Bo Wu¹, Wen-Jin Wang¹, Feng Gao¹, Guoqing Zhang⁴, Parvej Alam¹,
Yu Xiong³, Zheng Zhao¹, Zijie Qiu¹, Ben Zhong Tang^{*1,2}

1. The Chinese University of Hong Kong, Shenzhen
2. The Hong Kong University of Science and Technology
3. Shenzhen University
4. University of Science and Technology of China

Stimuli-responsive materials exhibiting exceptional room temperature phosphorescence (RTP) hold promise for emerging technologies. However, constructing such systems in a sustainable, scalable, and processable manner remains challenging. This work reports a bio-inspired strategy to develop RTP nanofiber materials using bacterial cellulose (BC) via bio-fermentation. The green fabrication process, high biocompatibility, non-toxicity, and abundant hydroxyl groups make BC an ideal biopolymer for constructing durable and stimuli-responsive RTP materials. Remarkable RTP performance is observed with long lifetimes of up to 1636.79 ms at room temperature. Moreover, moisture can repeatedly quench and activate phosphorescence in a dynamic and tunable fashion by disrupting cellulose rigidity and permeability. With capabilities for repeatable moisture-sensitive phosphorescence, these materials are highly suitable for applications such as anti-counterfeiting and information encryption. This pioneering bio-derived approach provides a reliable and sustainable blueprint for constructing dynamic, scalable, and processable RTP materials beyond synthetic polymers.

FB03-37

非常规晶相金属纳米材料的湿法合成及其催化性能研究

陈也*

The Chinese University of Hong Kong, China

金属纳米材料具有优异的本征电催化活性、高导电性和高稳定性，是应用前景广阔的催化剂材料。然而，传统的溶液法合成主要关注纳米晶体的形貌和组分控制，这篇报告将介绍我们近期在晶相控制方面取得的一些有趣发现。例如，传统 Au 纳米材料拥有同块体金同样的面心立方 (fcc) 的晶体结构，而我们发展了高产量制备非常规的 4H/fcc 异相的 Au 纳米棒。这些非常规晶相的金纳米棒有较高的热稳定性，是外延生长的优质晶种，我们因此进一步制备了非常规 4H/fcc 相的其他催化活性金属 (如 Pd 和 Cu) 包覆的一维核-壳纳米结构，并分别研究了这些新晶相的金属纳米材料在 [乙醇电氧化] 和 [二氧化碳电还原] 中的催化性能。这些工作展示了一种通过湿化学方法设计合成金属纳米材料晶相的替代策略，并探索晶相调控对金属纳米催化剂各种性能的影响。最后，我们进一步拓展这一合成策略，利用不同晶相的 Pd 基纳米晶作晶种，设计合成了不同晶相的 Pt 纳米晶面，并进行了不同晶相的 Pt 表面在有机异相催化反应中的相依赖性研究。

FB03-38

分子组装动力学与发光机制的多尺度理论模拟

郑小燕*

北京理工大学

分子组装发光材料广泛应用于能源和生命健康等领域，这主要归因于其“自下而上”形成的层级有序分子组装结构。其中分子间非共价弱相互作用是核心，是分子发挥功能的基础。在分子间非共价相互作用协同驱动下，由单体到多体的分子组装过程，中间体结构多样，分子组装动力学路径复杂。这赋予分子组装体多样的结构和超越于小分子之上丰富的性质与功能。另外，超分子发光体系在生物肿瘤光学诊疗应用中潜力巨大，但其与细胞膜相互作用及各激发态通道在肿瘤诊疗中的速率仍难以确定，给肿瘤诊疗荧光分子设计带来挑战。近年来，我们发展了针对分子组装过程的动力学网络模型，并结合多尺度理论模拟解析有机分子组装体结构与发光性能关系，并优化其生物肿瘤诊疗效率，为实验上有机超分子发光材料的分子设计和应用开发提供了理论依据。

FB03-39

分子聚集的非平衡态研究

林艺扬*

北京化工大学, 化工资源有效利用国家重点实验室

生物体系不仅具有平衡结构, 同时具有大量非平衡结构与状态, 他们是实现新陈代谢和生命过程的基础。自组装是生命和非生命体系形成有序聚集体和功能结构的基础。借助理论模拟与物理表征, 我们研究了热力学和动力学控制下多肽组装现象, 构建了迥异的超分子纳米结构, 包括处于动力学陷阱的纳米纤维和热力学稳定的二维结构, 这些结构表现出明显不同的催化活性。非平衡态的多肽组装可以通过加热或者溶剂化来诱导: 在升温条件下, 具有高催化活性的纳米纤维不可逆性地转变成低活性的层状结构, 这个现象类似于蛋白质在高温条件下的变性。此外, 基于液-液相分离构建凝聚液滴, 观察到了远离平衡态的分子聚集态; 利用氧化还原作用和光学激发来驱动溶液中的凝聚液滴的形成-解体-再生的循环, 实现时空耦合的图案化和周期性变化, 这种振荡行为可以在体相和界面上进行。

FB03-40

Generating electron density of organic system by convolutional residual network

Junyi Gong (龚隽一)*

Shenzhen MSU-BIT University (深圳北理莫斯科大学)

The importance of electron density in modern theoretical chemistry has been significant ever since the Hohenberg-Kohn theorem. However, deriving the electron density of a system through self-consistent field algorithms can be a lengthy process. In our research, we introduced an innovative method to predict electron density through machine learning with 3D convolutional residual networks. By inputting the promolecular density and nucleus potential field of sliced cubes, this new technique was found to be highly accurate and reliable in predicting density-related properties with fewer requirements on training examples than preliminary strategies and high transferability on different categories of systems, particularly in organic conjugated systems.

FB03-41

高性能 AIE 诊疗材料的设计及其抗细菌感染应用研究

康苗苗*、王东、唐本忠

深圳大学

细菌生物被膜感染严重威胁人类生命健康^[1]。多模态光学诊疗一体化在抗细菌生物被膜感染领域具有广阔的应用前景。聚集诱导发光 (Aggregation-induced emission, AIE) 分子是构筑多模态诊疗一体化材料的理想模板^[2]。多模态 AIE 诊疗材料的设计通常需要扭曲分子骨架来促进聚集态下的分子内运动, 以实现激发态能量的辐射和非辐射耗散之间的平衡以及多种诊疗功能的同时输出。然而, 高度扭曲的结构通常导致分子的摩尔吸光系数较低, 而高摩尔吸光系数能够保证足够的能量输入, 对于提高多模态 AIE 材料的诊疗性能输出至关重要。

基于此, 我们课题组通过合理的分子设计策略, 构建了一类高摩尔吸光系数的多模态 AIE 诊疗分子。这类分子具有优异的光热性能和活性氧产生能力, 且其发射波长可延伸至近红外二区 (大于 1000 nm)。借助具有酸响应性电荷反转能力的高分子载体, 所制备的具有高摩尔吸光系数的多模态 AIE 纳米诊疗材料在

酸性条件下表现为正电性，能够有效渗透入细菌生物被膜内部，并发挥光动力-光热联合清除生物被膜作用。此工作不仅为高性能多模态诊疗分子的开发提供了设计思路，也为细菌感染性疾病的治疗提供了参考性策略。

[1] H.-C. Flemming, J. Wingender, U. Szewzyk, P. Steinberg, S. A. Rice, S. Kjelleberg. Biofilms: an emergent form of bacterial life. *Nat. Rev. Microbiol.*, **2016**, 14, 563-75.

[2] Z. Zhang, M. Kang, H. Tan, N. Song, M. Li, P. Xiao, D. Yan, L. Zhang, D. Wang, B. Z. Tang, The fast-growing field of photo-driven theranostics based on aggregation-induced emission. *Chem. Soc. Rev.*, **2022**, 51, 1983-2030.

FB03-42

基于刺激响应 AIE 微胶囊的功能聚合物涂层

陈树生*

广东工业大学

微胶囊是指采用固体壳材封装液体芯材形成的具有核壳结构的微米级球状粒子。通过对功能性液体进行微胶囊化，可达到保护隔离、控制释放、提高操作性等目的。由于微胶囊化技术在制备方法、壳材与芯材的种类、产品功能等方面具有选择性多和可控性强的优点，其在药物递送、化妆品、食品、功能高分子等领域具有广泛而重要的应用。

作者长期从事微胶囊化技术及基于 AIE 微胶囊的功能聚合物材料的相关研究，先是使用聚集诱导发光 (AIE) 分子对异氰酸酯自修复剂芯材进行掺杂修饰，利用异氰酸酯能够与水汽自发反应生成聚脲产物及 AIE 分子聚集诱导发光的特性，开发了具有荧光自警示及自修复的双功能微胶囊型聚合物涂层。在此工作基础上，作者进一步使用具有分子内扭转电荷转移 (TICT) 效应的 AIE (TICT-AIE) 分子掺杂异氰酸酯自修复剂，利用 TICT-AIE 分子在环境极性降低和分子受限程度增加时，其发光波长蓝移和发光强度增加的特性，实现对聚合物涂层损伤-自警示-自修复全过程进行可视化监控。近期，作者利用具有手性的 AIE 分子掺杂相变材料，通过简单可控的策略实现了温敏变色圆偏振光切换的特性，并且通过对 AIE 分子掺杂相变材料进行微胶囊化封装，制备了一种适用性广泛，响应温度可控的温敏变色和圆偏振光切换的聚合物涂层。

微胶囊作为 AIE 分子的理想载体之一，刺激响应 AIE 微胶囊型聚合物涂层具有光明的应用前景，非常值得我们继续深入研究。

FB03-43

聚合物载体增强近红外二区光敏剂光动力和影像性能的研究

丁煜勋*

深圳大学材料学院

电子供体-受体 (D-A) 工程是构建近红外二区发光分子的有效策略，它通过增强分子内的推拉电子效应，可延长发光分子的吸收和发射波长。然而，在此过程中，发光分子的活性氧和荧光量子产率往往会受到抑制，从而导致光动力治疗和成像效果不佳。研究表明，分子在聚集状态下的光物理性能与分子间的相互作用密切相关。为此，我们通过利用不同的聚合物载体来负载发光分子，并利用载体中的电子供体单元与发光分子中的电子受体构建分子间的电子供体-受体相互作用，从而增强光敏剂在聚集态下的光动力和成像性能。该研究证实，富电子的聚合物载体可以与光敏剂的电子受体形成分子间的 D-A 相互作用，从而增强分子的光动力和成像性能。此外，该研究首次证明增强的幅度与电子受体的吸电子能力呈正相关关系，为近红外二区光学诊疗提供了一种新策略。

FB03-44

AIEgen-Based System for Smart Theranostic and Photocatalytic TherapyKun Zhou (周琨)¹, Zheng Zhao², Ben Zhong Tang^{*1,2}

1. Hong Kong University of Science and Technology

2. Chinese University of Hong Kong, Shenzhen

Drug-resistant microbial infection has become a worldwide public health problem. Early detection and intervention are necessary. Currently, clinical diagnostic methods in vitro are usually sampled and cultured, which is cumbersome and time consuming. Herein, a smart portable system that equips AIEgens (fluorescent sensor), a mini-double light channel on a cellphone, and intelligent software was presented to monitor infection within seconds and give minutes photodynamic therapy via low-power white light irradiation, anti-microbial activities over 96%, which realized one-week wound healing. The smart system integrated with remote communications and image analysis software can realize wireless data transmission, infection degree analysis, and medical advice given by doctors through the Internet. This smart system relieves the emergency of world antibiotic resistance and lays a foundation for developing smart wound dressing and potential application in preclinical research and diagnostics.

Moreover, oxygen-demanded PDT encounter challenge from anaerobic bacteria-infected diseases. we constructed an exceptionally potent photocatalytic system TBSMSPy⁺, which showed highly catalytic activities through the photo-induced intramolecular multi-step electron transfer. The designed catalyst TBSMSPy⁺ can effectively catalysis the oxidation of NADH, which disturb the normal metabolism, leading to the cell death. We termed this action as photoinduced redox imbalance (PIRI) and demonstrated this strategy in oxygen-free periodontitis treatment.

墙报

FB03-P01

通过修改取代位置以实现延迟荧光和放大手性的深红色圆偏振有机发光二极管

朱立洵*

香港中文大学（深圳）

Developing easily accessible deep-red/near-infrared circularly polarized emitters for practical organic light-emitting diodes remains a significant challenge. Here, a practical strategy has been proposed for developing deep-red circularly polarized delayed fluorescent emitters based on a novel chiral acceptor platform. By changing triphenylamine (TPA) substitution position from para to meta, R/S-M-TBBTCN demonstrated thermally activated delayed fluorescence (TADF) properties with a delayed lifetime of 6.6 μ s that R/S-P-TBBTCN doesn't have. Furthermore, R/S-M-TBBTCN showed a 65 nm red-shift in emission and a 10-fold enhancement in asymmetry factor (g_{lum}), compared with R/S-P-TBBTCN. The solution-processed nondoped circularly polarized organic light-emitting diodes (CP-OLEDs) based on R-M-TBBTCN display deep-red emission and 2.2% external quantum efficiency.

开发用于有机发光二极管的, 易于合成的深红/近红外圆偏振发射器仍然是一个重大挑战。在此工作中, 提出了一种基于新型手性受体骨架开发深红色圆偏振延迟荧光发射器的实用策略。通过将三苯胺 (TPA) 取代位置从对位更改为间位, R/S-M-TBBTCN 表现出热激活延迟荧光 (TADF) 特性, 延迟寿命为 6.6 μ s,

这是 R/S-P-TBBTCN 所不具备的。此外,与 R/S-P-TBBTCN 相比,R/S-M-TBBTCN 的发射红移为 65 nm,不对称因子 (g_{lum}) 增强了 10 倍。基于 R-M-TBBTCN 的,溶液法加工制成的非掺杂圆偏振有机发光二极管 (CP-OLED) 显示出深红色发射和 2.2% 的外量子效率。

FB03-P02

Restriction of Vibration and Rotation, which One Affords Brighter NIR-II AIE Probe?

Siyuan Wang¹, Kun Zhou^{1,2}, Xinyan Lyu¹, Shusheng Chen³, Bo Wu¹, Zaiyu Wang², Haozhe Tan¹, Zijie Qiu¹, Zheng Zhao¹, Ben Zhong Tang^{*1,2}

1. School of Science and Engineering, The Chinese University of Hong Kong, Shenzhen (CUHK-Shenzhen)
2. The Hong Kong Branch of the Chinese National Engineering Research Center for Tissue Restoration and Reconstruction, The Hong Kong University of Science and Technology
3. Jieyang Branch of Chemistry and Chemical Engineering Guangdong Laboratory (Rongjiang Laboratory), School of Advanced Manufacturing, Guangdong University of Technology

The second region of near-infrared (NIR-II) probes with aggregation-induced emission (AIE) characteristic has emerged as promising tools for high-resolution imaging of internal damage due to their high penetration depth and superior signal-to-noise ratio. However, designing NIR-II AIE probes with elevated quantum efficiency remains a formidable challenge. Here, we demonstrated a new strategy to construct bright NIR-II AIE probes by utilizing vibrational moiety. The designed COT_h-NDTA, featuring vibrational moieties, exhibited a quantum yield (QY) that is 30 times higher than that of the control molecule TTE-NDTA, which is featured by rotation units. This much enhanced QY of COT_h-NDTA than TTE-NDTA is attributed to its more rigid conformation and tighter stacking mode in aggregates, highlighting the advantage of vibration moieties in enhancing fluorescence. The superior attributes of COT_h-NDTA were further demonstrated in NIR-II imaging, particularly in the internal damage assessment of composites. This study not only illustrated an effective design strategy to construct efficient NIR-II AIE luminogen, but also underscores the NIR-II probes considerable potential for sophisticated imaging applications in materials science.

FB03-P03

基于卟啉衍生物的 ATP 驱动的非平衡自组装

董俊杰、李云峰*
吉林大学

在生物体内,许多生命过程与非平衡状态息息相关,这些非平衡过程大多由 ATP 和 GTP 驱动,形成了时空控制的瞬态结构,执行复杂的功能。例如 GTP 驱动的微管蛋白的组装。目前,一些 ATP 驱动的非平衡自组装体系已经被建立,但是该领域才刚刚起步,组装体的结构和功能也较为单一。在此,我们设计了一种水溶性阳离子卟啉,它能够选择性地被 ATP 诱导自组装,在水中形成尺寸均匀的组装体。同时,我们引入了碱性磷酸酶,利用 ATP 诱导自组装与 ATP 水解的不对称动力学,我们成功获得了卟啉的瞬态组装体。我们进一步地研究了瞬态组装体的宏观物理性质及光化学性质,并且实现了对瞬态组装体寿命的可编程调控。

FB03-P04

非传统聚集诱导发光材料

王昊然、赵征*
香港科技大学

自下而上的分子科学研究范式极大地推动了材料科学的进步。然而，一些有机分子在聚集时可以表现出明显不同的特性。理解这些性质的出现以及构效关系已成为新的研究热点。在这项工作中，我们以独特的封闭式罗丹明基聚集诱导发射（AIE）系统为模型化合物，从自上而下的角度深入研究了它们的发光特性和潜在机制。有趣的是，基于罗丹明的封闭式 AIE 系统在高粘度或低温条件下没有表现出预期的发射行为。另外，我们最终发现聚集时分子构象的变化诱导了分子内电荷转移发射，并对这些闭合形式罗丹明衍生物的 AIE 现象发挥了重要作用。探索了这些基于罗丹明的封闭式 AIE 探针在食品腐败检测中的应用。

FB03-P05

新型介离子聚集诱导发光材料

吴谦、丘子杰、赵征、唐本忠*

香港中文大学（深圳）

在过去的几十年中，有机光电材料的爆炸性发展已经在有机发光二极管、有机场效应晶体管、有机光伏电池、化学传感器和许多其他领域得到了见证。构建具有高效电荷传递的材料通常通过两种策略来实现：(1) 扩展 π 共轭和 (2) 增强给电子-接受电子 (Donor-Acceptor) 的强度。后者因其在有效缩小能隙方面的巨大贡献而被视为开发高性能有机材料的最有力工具，因此科学家在探索理想的电子供体或受体研究中花费了大量精力，也尝试通过推-拉电子不同的连接方式来构建性质优异的推-拉电子体系结构，包括 D-pai-A，D-A-D 和 A-D-A 等等。本工作基于电荷强分离的离子型推-拉电子结构，创新性地提出了一类用于有机发光材料的环内强推-拉电子的介离子结构，并首次对其聚集诱导发光光学性质和发光机理进行了探索，实现了生物活体脑成像和肿瘤的诊疗一体化研究。

首次构建了一类全新的具有优异聚集诱导发光性质的介离子化合物 TAOs。TAOs 在聚集态或固态下具有高量子产率的红色/近红外发射，这是目前报道具有红光发射的发光团中，分子量最小的化合物之一。首次解析了介离子型发光团的发光机理，并提出了全新的理论——环折叠的分子内电荷转移 (Bended intramolecular charge transfer state, BICT)，介离子环内极强的推-拉电子作用是实现长波长发射和聚集诱导发光的关键。TAOs 具有与跨血脑屏障中枢系统药物相似的物理化学性质，实现了跨越血脑屏障的脑部成像，这将有潜力应用于长时生物追踪和与阿尔茨海默病、胶质瘤和脑炎等脑部疾病诊断相关的病理研究。

通过对介离子环内推-拉电子相互作用的调节，作者构建了一系列悉尼酮结构的介离子聚集诱导发光分子 Syds。Syds 分子均具有优异的聚集诱导发光性质，并实现了反常的聚集诱导发射大幅红移的光学现象。通过理论计算和机理研究，首次提出了介离子超灵敏推-拉电子响应的发光调控机理，实现了细胞内超灵敏极性环境的检测。这为介离子发光体在分子设计，发光波长调控，聚集体性质研究提供了新的思路。

FB03-P06

聚集体中动态共价化学的探索：通过可逆光环加成反应构建新型聚集体结构用于光激活荧光开关

丁泽洋、丘子杰、唐本忠*

香港中文大学（深圳）

由于缺乏对分子间相互作用和分子堆积精准调控的手段，构筑具有特定发光特性的固态材料是现代材料科学中一个重大的挑战。在此，我们利用动态共价化学的强结合能力和可逆特性，构建了一种通过传统溶液生长方法无法获得的新型聚集体结构。我们通过 9-氰基菲（9CP）溶液中的 [2+2] 光环加成反应制备了一种具有分子内空间相互作用的菲折叠物 9CP-c。由于该反应可逆的特性，9CP-c 晶体可以进行光诱导分解，并产生独特的共面 $\pi-\pi$ 堆叠二聚体（9CP-d），晶体中受限制的分子运动使 9CP-d 中的两个 9CP 单元接近，促进了 π 电子的有效离域。因此，光刺激后的 9CP-c 晶体发射出比从溶液中生长的 9CP 晶体更红移的荧光。同时，9CP-c 晶体的光刺激过程还展现出明显的光激活行为，并在薄膜中得到了成功的证明，展示了其在信息加密中的潜在应用。实验和理论数据揭示了光环加成和光激活过程的潜在机制。这项工作为通过动态共价化学构建具有高效发光性能的独特聚集体材料开辟了新的可能性。

FB03-P07**Type-I AIE Photosensitizer Loaded Tumor Microenvironment Activable System Boosting Magroptosis to Inhibit Cancer Proliferation**

唐本忠*、郝梁

香港中文大学（深圳）

Biodegradable nanomaterials have been developed to harness the therapeutic effects of chemotherapy and phototherapy while avoiding their harmful side effects on normal tissues. These nanomaterials, specifically polydopamine-coated MgO_2 nanoparticles, are used to supply reactive oxygen species (ROS) that can degrade in acidic environments, releasing H_2O_2 and nontoxic Mg^{2+} . Additionally, the polydopamine shell provides binding sites for aggregation-induced-emission photosensitizers (AIE PSs), such as TDSPN. TDSPN, the photosensitizer compound, demonstrates significant ROS generation and emits near-infrared (NIR-II) fluorescent light for deep tissue imaging. The isothiocyanate group of TDSPN, when bonded with the amino group of polydopamine, allows for a larger loading of AIE photosensitizer compared to traditional electrostatic interaction. This work combines the benefits of peroxide and AIE PSs to enhance ROS generation, while the NIR-II emission from AIE PSs enables the development of a diagnostic and therapeutic platform for cancer therapy.