化学所等在团簇超原子用于新材料基因研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/11601.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

腐蚀、防腐及催化等化学化工过程均涉及金属团簇的研究，团簇已成为化学和材料研究的前沿和热点。深入理解原子到分子、团簇、纳米结构，再到宏观物质的结构和功能演变，将推动化学走向“微观化”、“精准化”和“交叉融合”。

在国家自然科学基金委、财政部、中国科学院的支持下，中科院化学研究所分子动态与稳态结构实验室研究员骆智训课题组研制出多套团簇科学仪器装置，在金属团簇与超原子的高效制备及反应性研究中取得系列进展（图1）。团簇超原子作为一类具有固定几何结构和电子结构的类比于原子的团簇（*Acc. Chem. Res.* 2014，47，2931-2940），可通过金属团簇精准化学反应（*Chem. Rev.*2016，116，23，14456），设计具有团簇基因的功能新材料（*Coord. Chem. Rev.* 2019，400，213053），可应用于催化，并且有望拓展至更广泛的光化学、自旋电子学等领域，体现从“超原子化学”到“团簇材料基因”的新视角（*Coord.Chem. Rev.* 2020， CCR_213643）。

近期，在中科院院士、化学所研究员姚建年的指导下，研究团队与北大深圳化学院教授潘锋、清华大学教授李隽等合作，发现并气相合成一种具有特殊稳定性的类钙钛矿结构的金属氧立方中性团簇$Co_{13}O_8$。理论研究表明，该团簇具有独特的立方芳香性（图2）。研究进一步揭示其独特的稳定性与体心立方结构、突出的前线轨道能隙、乃至芳香性相关，讨论从二十面体Co_{13}到立方$Co_{13}O_8$的结构演化的热力学和反应动力学过程；通过计算其核独立化学位移与磁感应电流密度，结合电子结构及轨道分析，诠释$Co_{13}O_8$的立方芳香性及其化学本质。这类新型的氧钝化金属团簇（Oxygen-passivated metal cluster）有望用作新材料基因，研究人员将其命名为“金属氧立方”（metalloxocubes）。相关研究成果发表在*National Science Review*，博士研究生耿丽君为论文第一作者。

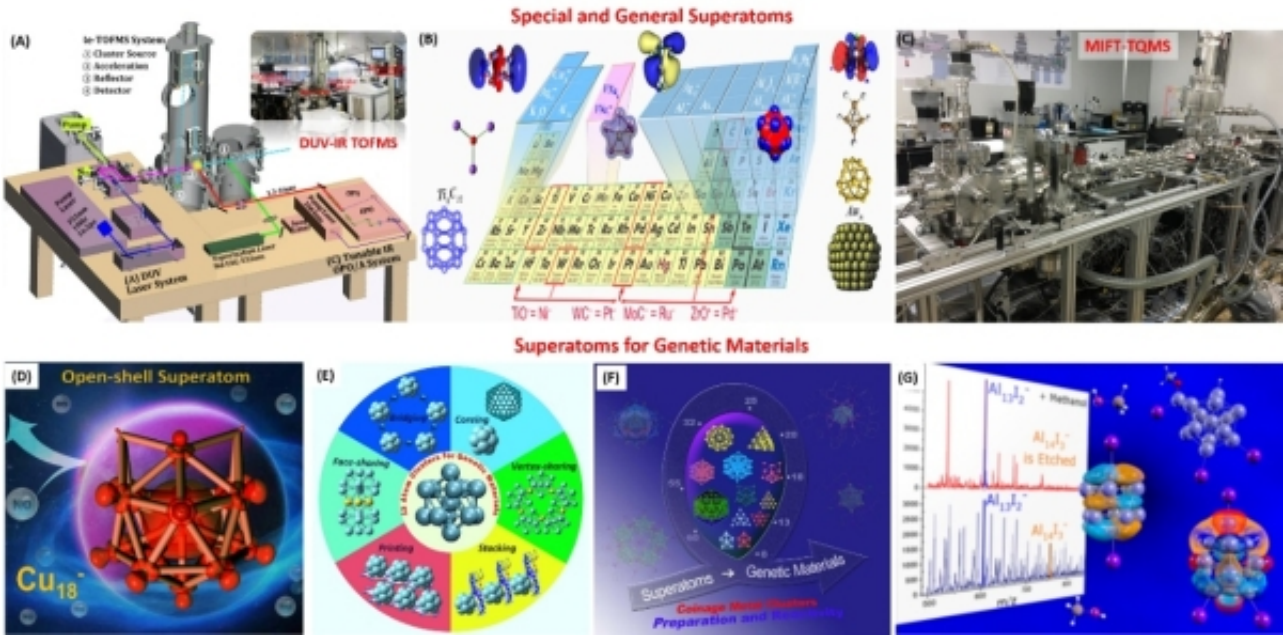


图1.（A） 自主研制的国家重大仪器（深紫外二期子项目）DUV+IR质谱光谱仪；（B）狭义和广义超原子概念的提出（*Acc. Chem. Res.* 2014，47，2931）；（C）基于科学院仪器研制项目支持的离子层流反应管串联自定义多重四极质谱系统；（D）开壳层超原子团簇Cu_{18}^-的发现（*J. Phys. Chem. Lett.* 2020，11，5807）；（E/F）金属团簇应用于材料基因（*Coord. Chem. Rev.* 2019，400，213053；2020，213643）；（G）卤素配体保护/活化超原子团簇（*Chem. Sci.* 2016，7，3067）

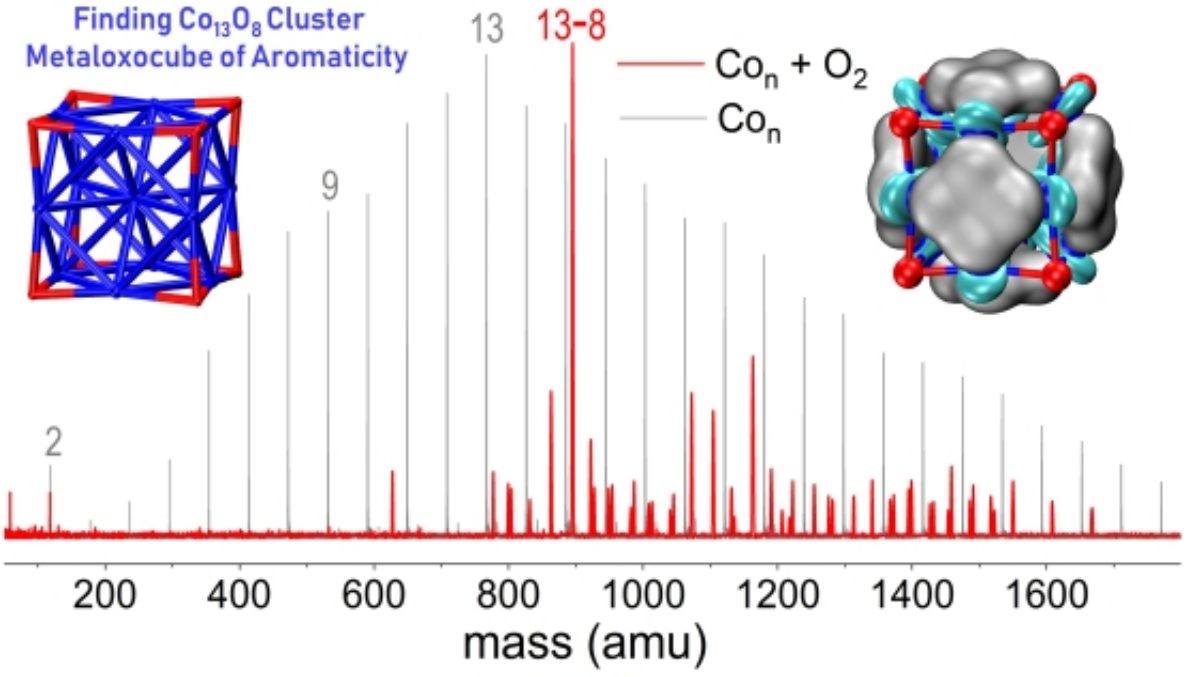


图2.中性Co_n
纯金属团簇质谱分布及其与大量氧气反应后的质谱。插图为$Co_{13}O_8$氧立方结构及其芳香性描述

研究团队单位：化学研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发