

材料基因组学研究取得新进展

作者：writer 来源：北京化工大学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/3401.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！



ARTICLE

<https://doi.org/10.1038/s41467-018-07720-6>

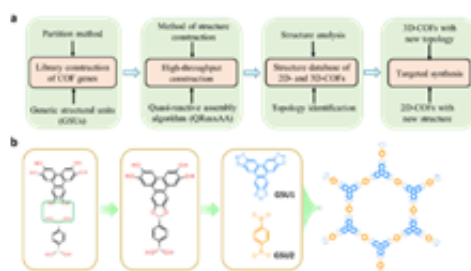
OPEN

Materials genomics methods for high-throughput construction of COFs and targeted synthesis

Youshi Lan¹, Xianghao Han², Minman Tong³, Hongliang Huang⁴, Qingyuan Yang¹, Dahuan Liu¹,
Xin Zhao² & Chongli Zhong^{1,4}

在国家自然科学基金和国家重点研发计划等项目资助下，北京化工大学化学工程学院阳庆元教授与仲崇立教授研究团队近期在材料基因组学领域取得重要进展，在国际上提出纳米多孔材料高通量构筑的全新基因组学方法论，并与上海有机所的赵新教授团队合作，通过定向实验实现了所设计的新型拓扑结构材料。研究成果以Materials genomics methods for high-throughput construction of COFs and targeted synthesis为题，于2018年12月10日在《自然 通讯》上在线发表。该期刊主要刊登自然科学领域最新的科研进展，其最新发布的影响因子为12.353。

论文的第一作者为化学工程学院博士生兰友世，通讯作者为阳庆元教授、仲崇立教授和赵新教授。科学技术的革新和经济社会的发展越来越依赖于新材料的进步，其中COFs为有机单体通过强共价键相互连接而形成的一类新型晶态多孔聚合物材料，近年来在诸多潜在应用领域开始崭露头角。当前，材料基因组计划(MGI)正引领一种崭新的材料研发模式，其中一个重要的挑战在于融合高通量计算技术，基于材料基因组学理念构筑出具有丰富拓扑类型和孔道化学性质的庞大结构空间，以用于识别最佳的可能材料。



为此，该工作中创造性地提出了仿化学反应划分COF材料基因的学术思想，并通过概念创新和计

算构筑方法创新，提出含反应位点信息的遗传结构单元新概念(GSU)和开发出基于似反应连接组装算法的高通量构筑方法(QReaxAA)，并针对2D材料的构筑提出一种自适应算法来解决如何设置材料层间距的问题，在此基础上建立了相应的基因库和包含约47万种材料的庞大数据库，并利用其中的四个材料作为概念验证示例进行了定向合成，成功地证明了所建立基因组学方法论的有用性和可靠性。因此，本工作不仅为高通量材料构筑提供了有用的方法和工具，而且可为如何利用材料基因组学思想进行新材料开发给予借鉴，有助于材料研发模式的变革，使材料开发更环保和高效。(来源：北京化工大学)

图1. 左图：研究思路与基于GSU的材料基因的划分方法;右图：基于QReaxFF方法的2D和3D COF材料的组装过程。

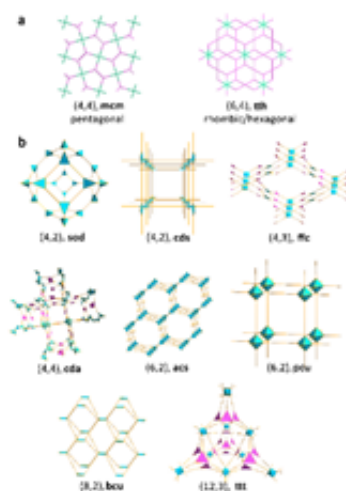


图2. 左图：发现的COF材料新型拓扑结构;右图：COF材料合成，其中基于全新ffc拓扑的材料采用的是具有四边形几何形状的GSU作为核心构建单元

相关论文信息：<https://www.nature.com/articles/s41467-018-07720-x>

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](https://www.iikx.com)转发