北京正负电子对撞机国家实验室

北京同步辐射装置
2018 年用户年报

北京同步辐射装置用户办公室编印

2019 年 6 月

北京同步辐射装置专业委员会、用户委员会委员名单

北京同步辐射装置专业委员会名单

主　任：冼鼎昌

副主任：丁　洪

委　员：牛立文、金晓峰、陈同斌、叶甜春、匡廷云、王建国、吴自玉、苏晓东、邹广田、麦振洪、孙冬柏、谭若兵、姜晓明、赵宇亮、肖体乔、柴之芳、董宇辉、阎永廉

北京同步辐射装置用户委员会名单

主　任：韦世强

副主任：李宏年、尉志武

委　员：安玉凯、陈忠周、崔启良、高愈希、胡小方、姜　政、蒋世春、梁宏斌、门永锋、潘　纲、沈月全、施积炎、石庚辰、谭伟石、谭文峰、王惠琼、王同敏、谢常青、杨茂君、易荣清、禹日成、张吉东、张建玲

北京同步辐射装置简介

北京同步辐射装置（Beijing Synchrotron Radiation Facility，BSRF）（http://bsrf.ihep.cas.cn）是一个向社会开放的大型公共科研设施，贯彻“开放、联合、开拓、创新”的方针，对国内外的科研单位、高等院校和企业全面免费开放。在过去 20 多年的开放过程中，BSRF 为我国凝聚态物理、化学化工、生命科学、材料科学和环境科学的研究提供了一个坚实的实验平台，并且取得了一系列研究成果。

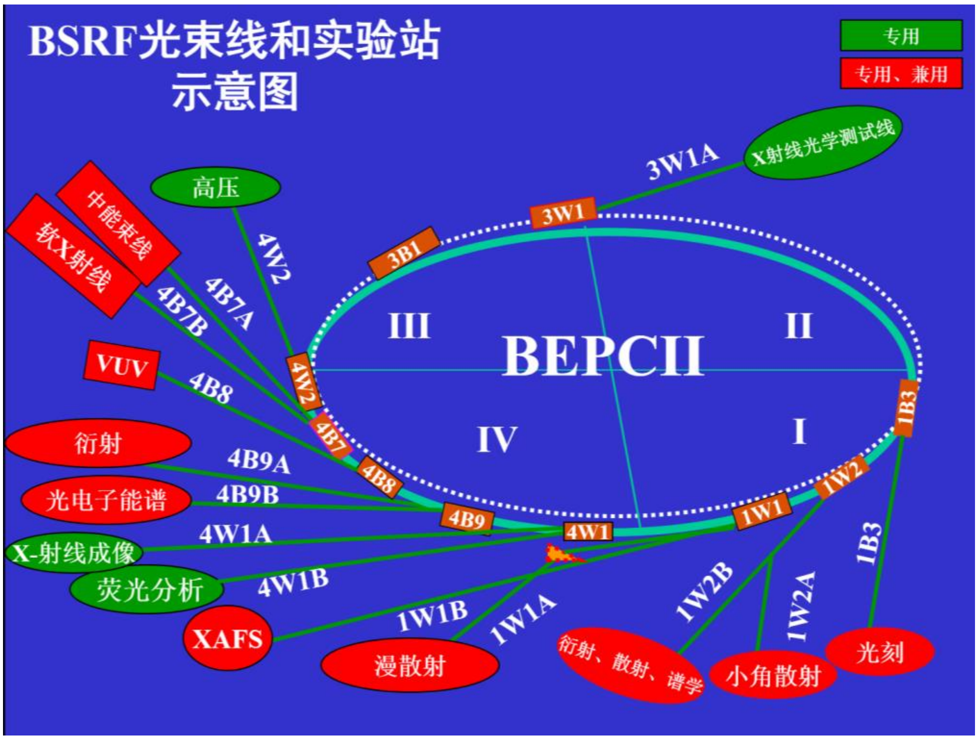


图 1 北京同步辐射装置（BSRF）光束线和实验站示意图

BSRF 建有 3 个实验大厅，共有 5 个插入件，14 条光束线和实验站（图 1），提供从真空紫外到硬 X 波段的同步辐射光，提供 X 射线形貌术、X 射线成像、X 射线衍射、X 射线小角散射、漫散射、生物大分子结构、X 射线荧光微分析、X 射线吸收精细结构、光电子能谱、圆二色谱、软 X 射线刻度和计量、中能 X 射线光学、高压结构研究、X 射线光刻等实验技术，可以为凝聚态物理、高压物理、化学化工、材料科学、生命科学、地球科学、环境科学、微电子、微机械加工、计量学、光学及探测技术等广泛学科的基础研究和应用基础研究提供强有力的实验研究手段。BSRF 每年为国内外用户提供 3 个月左右的同步辐射专用光运行。

除此之外，在 BEPCII（Beijing Electron Positron Collider II）进行高能物理对撞的模式下，BSRF 实验站积极开展兼用光运行模式。从 2009 年至今，4B8-真空紫外实验站、4B7A-中能实验站、4B7B-软 X 射线实验站、4B9B-光电子能谱实验站、1W2A-小角散射实验站、1W2B-衍

射谱学综合实验站、1W1A-漫散射实验站、1W1B-XAFS 实验站、4B9A-衍射实验站、1B3-X 射线光刻实验站等共计 10 个实验站先后成功完成了兼用模式的调试并正式对用户开放使用。兼用模式的成功运行，为 BSRF 争取了更多的机时这对于一些国家的急需研究项目而言非常重要。

现在，每年有来自国内外的 100 多个研究机构和大学的 1000 多名用户来 BSRF 进行 500 多个实验。

如何到北京同步辐射装置开展工作

一、课题的申请

1. 申请人（在职科研人员、企业研发人员）可以在中国科学院重大科技基础设置开放共享平台（http://lssf.cas.cn/）注册后在线申请北京正负电子对撞机/北京同步辐射装置的普通课题。

2. 在填写课题申请前，申请人须与北京同步辐射装置实验站的科研人员取得联系，探讨实验技术方案的可行性并确定一位实验站人员为联系人。

3. 申请人应认真填写《北京同步辐射装置普通课题申请》，并邮寄一份（须签字并盖章）至北京同步辐射装置用户办公室。北京同步辐射装置用户办公室全年接收课题申请。

4. 欲申请重点课题的用户（须在北京同步辐射装置开展实验两年以上）也需在中国科学院重大科技基础设置开放共享平台（http://lssf.cas.cn/）进行在线申请，并邮寄一份（须签字并盖章）至北京同步辐射装置用户办公室。重点课题申请具体接收时间以北京同步辐射装置用户办公室发出的通知为准。

5. 未提出正式申请而要求先试一试的用户，必须经实验站负责人同意，并经北京同步辐射装置用户办公室认可，方可安排一次用光。确认实验可以继续开展的，补填申请表，并列入正式用户，若不办理申请手续，将不再安排机时。

二、课题的评审和管理

北京同步辐射装置用户办公室收到课题申请后，将按下列程序组织评审：

1. 北京同步辐射装置相应实验站工作人员对课题所提出的实验方案进行技术可行性评议。

2. 北京同步辐射装置每年集中送审两次课题申请（分别为 3 月份和 9 月份），由两位同行专家对申请课题进行科学意义和学术重要性的评议。

3. 由专业委员会或其委托的机构对课题进行评审。重点课题则必须经过专业委员会审定，每年评审一次。

4. 将评审结果通知申请人，申请课题一经批准即在北京同步辐射装置立项管理。

5. 对特别重要、时效紧、机时需要不多的实验，用户可直接与北京同步辐射装置负责人联系安排急需的实验机时。

三、机时安排和使用

1. 在课题审批时确定课题的总机时及年度机时的大致安排计划。

2. 每次实验的机时由课题负责人在中国科学院重大科技基础设置开放共享平台（http://lssf.cas.cn/）在线提出申请，经实验站管理员审核后确定具体机时数。

3. 由北京同步辐射装置运行负责人及北京同步辐射装置用户办公室协调处理机时分配中遇到的问题。

4. 机时安排一经商定，原则上不得私自变动。若遇特殊情况必须临时变动的，需得到用户及北京同步辐射装置实验站工作人员双方的同意，并报北京同步辐射装置用户办公室备案。

5. 若遇加速器或束线仪器设备的故障致使实验无法进行，原则上用户的机时不往后顺延。机时的补偿由用户与实验站负责人协商解决。

6. 用户若不能按时来做实验，必须提前一个星期通知北京同步辐射装置的联系人。因用户违反此规定造成实验站机时轮空的，或用户准备不足造成机时浪费的，将视情况轻重酌情减少其用机时间，直至暂停其用户资格。

7. 不得利用获得的机时开展与批准课题无关的实验。一经发现，将予以取消机时的处罚。

四、北京同步辐射装置用户办公室联系方式

地　址：北京市石景山区玉泉路 19 号乙 高能所 12 号厅 北京同步辐射装置用户办公室

邮　编：100049

联系人：何伟，于梅娟

Email ：bsrfhew@ihep.ac.cn，yumj@ihep.ac.cn

电　话：010-88235027，010-88236229

网　址：http://bsrf.ihep.cas.cn/（中文）；http://english.bsrf.ihep.cas.cn/（英文）

中国科学院重大科技基础设施开放共享平台网址：

http://lssf.cas.cn/（中文）；http://lssf.cas.cn/en/index.jsp（英文）

中国科学院重大科技基础设施开放共享平台微信公众号：

目 录

2018 年度开放运行总结

2018 年 6 月 17 日到 2018 年 7 月 27 日，BEPCII 为用户提供了本年度第一次同步辐射专用光。在此次同步辐射专用模式运行期间，BSRF 为用户提供 893.07 小时的有效机时。BSRF 的 13 光束线和实验站投入了对外开放运行，共为 310 个研究课题提供同步辐射实验，用户课题涉及材料科学、化学化工、环境地学、生命科学、凝聚态物理、方法学、科技考古和光电器件研究等多个领域。BSRF 不仅为基础研究和应用研究提供实验机时，还重点支持了部分国家重大科技项目。用户来自国内 106 个研究机构和国外 6 个研究单位，其中，国内的研究机构包括中科院 23 个研究所、教育部 73 所大学和其他 10 个科研单位。

2018 年 10 月 1 日到 2018 年 11 月 12 日，BEPCII 为用户提供了本年度第二次同步辐射专用光。在此次同步辐射专用模式运行期间，为同步辐射提供了 936.15 小时的有效机时。BSRF 的 13 条光束线和实验站投入了对外开放运行，为 336 个研究课题提供同步辐射实验，用户课题涉及材料科学、化学化工、环境地学、生命科学、凝聚态物理、光电器件研究等多个领域，除了为基础研究、应用研究和国家一些重大科技项目提供实验机时外，还重点支持了部分国家重大科技项目。用户来自国内 110 个研究机构和国外 7 个研究单位，其中，国内研究机构包括中科院 29 个研究所、73 所高等院校、其他部委 7 个科研单位及 1 家企业。

图 1 1W1A-漫散射实验站（左）、4W1A-X 射线成像实验站（右）的工作人员和用户正在收集实验数据。

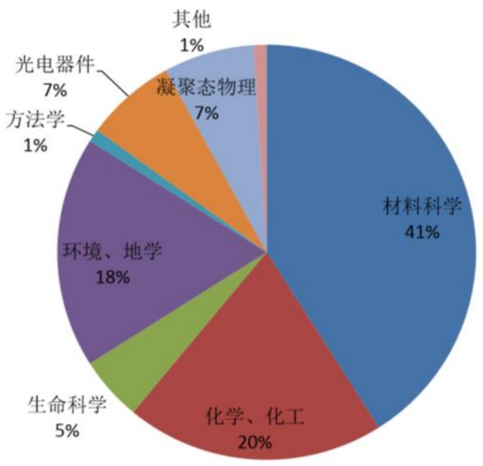


图 2（左）用户课题学科分布图示意图;（右）用户分布 28 个省、自治区、直辖市、特别行政区

2018 年度科研 Highlights

2018 年，北京同步辐射装置用户共发表文章 491 篇，其中一区文章 184 篇，包括 Science1 篇。

“相界面应变”制备出超强铁电薄膜

功能材料是通过光、电、磁、热等作用后具有特定功能的新型材料,在国家的重大建设工程、国民经济发展以及各个领域中具有重要应用。铁电智能材料作为一种特殊的功能材料，广泛应用在军工和通信中的铁电存储器、可调谐微波器件、大容量电容、压电传感器件等领域。如何精确调控和优化功能材料以及铁电智能材料的结构与性能是世界性难题，目前也是国内材料领域的薄弱环节。

功能材料物理化学性质依赖于晶格的变化，调控材料的晶格应变可促使材料物理化学性质发生显著的变化，晶格应变调控也因此广泛地应用在超导、巨磁阻、多铁、催化等领域。研究者们通常采用应力应变工程法，即通过薄膜与基体的晶格失配引入一定的应变，达到调控材料性质的目的。然而，薄膜与基体的晶格失配程度不能无限制地增加，晶格应变调控的范围也有限。在北京同步辐射装置的大力支持下，北京科技大学邢献然教授团队提出一种可简单实现应变工程的新方法——“相界面应变”（Interphase Strain），并成功制备出“超强”铁电体薄膜。研究成果以“Giant polarization in super-tetragonal thin films through interphase strain”（通过相界面应变制备巨大极化的超四方薄膜）为题，于 2018 年 8 月 3 日发表在美国《Science》[Science 361, 494 (2018)]杂志上，受到国内外研究者的高度关注和报道。

铁电材料是一种重要的功能材料，铁电材料的丰富性质都利用了铁电极化这一基本的功能基元。该工作的主要创新——“相界面应变”具体的设想如下：将两种晶格常数不同的物质形成晶格匹配的外延薄膜，小晶格的物质必然受到大晶格物质的拉应力，进而引入巨大应变，如图 1 所示。该想法首先在 $SrTiO_3$ 基底上将不同晶格参数的 $PbTiO_3$ 铁电体和 PbO 非铁电体形成晶格完全匹配的外延薄膜。由此将 $PbTiO_3$ 的晶格畸变提升到 $c/a = 1.238$，而体相仅为 1.065，薄膜剩余极化值高达 236.3 μC/cm^2，是目前已知铁电体最高值的近 2 倍。这种铁电薄膜非常稳定，铁电相稳定温度从体相的 490 ℃提高到了 725 ℃。这种“相界面应变”方法为设计新颖铁电体提供了新思路，有望应用在其他多功能材料的设计当中。

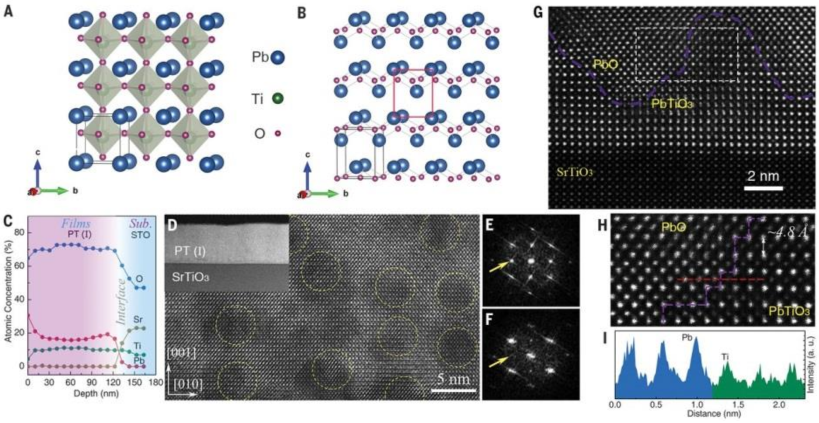


图 1 $PbTiO_3$/PbO 外延薄膜的微观结构

北京同步辐射装置 4B9B-光电子能谱实验站的电子结构轨道杂化的表征解析和 1W1A-漫散射实验站的外延膜微观结构表征对该工作的研究起到了重要的作用。该研究工作提升了国内在铁电、薄膜等相关领域的学术影响力。

发表文章：

Linxing Zhang, Jun Chen*, Longlong Fan, Oswaldo Diéguez, Jiangli Cao, Zhao Pan, Yilin Wang, Jinguo Wang, Moon Kim, Shiqing Deng, Jiaou Wang, Huanhua Wang, Jinxia Deng, Ranbo Yu, James F. Scott, Xianran Xing*, Giant polarization in super-tetragonal thin films through interphase strain. Science, 2018, 361, 494-497.

石墨烯基 MN_4C_4 型单原子电催化剂的结构解析及其构效关系

鉴于能源危机和环境问题日益严峻，构建清洁高效、全球规模的可持续能源体系已成为当务之急。电催化析氧反应（OER）是电解水、燃料电池以及金属-空气电池等技术的关键反应，在可再生清洁能源转换和储存中起着重要作用。但是 OER 缓慢的动力学过程和较高的过电位严重制约了相关技术的产业化，因此开发高活性、稳定且廉价的 OER 电催化剂具有重要现实意义。单原子催化剂兼具了均相催化剂和异相催化剂的优势，是近几年来研究的热点与前沿。然而，单原子催化剂活性位点的结构解析一直是该领域的研究难题，严重限制了催化机理和构效关系的研究，阻碍了新型高效单原子催化剂的合理设计。这种困境主要来源于传统方法制备的催化剂成分与结构的复杂性，同时亟需有效、精确的结构表征手段。

加州大学洛杉矶分校的段镶锋课题组与北京同步辐射装置的研究人员合作，开发出一种简单易行的普适性合成方法，用以制备氮掺杂石墨烯负载的不同种类金属（Fe，Co，Ni）单原子催化剂，并对金属原子的配位结构进行了系统详尽的解析。合成过程中，前驱体为富含缺陷位点的氧化石墨烯，经与金属前驱体混合后，再在氨气气氛下进行热处理。利用在北京同步辐射装置 1W1B 和 1W2B 两个实验站获得的金属元素 K 边 XAFS 结果显示，该系列催化剂中金属元素完全呈单原子形式分散，排除了金属颗粒对结构解析和性能表征的干扰。利用 EXAFS 和 XANES 分别对中心吸收原子周围配位原子的径向分布和三维空间构型敏感的特点，北京同步辐射装置的研究人员采用全局化 XAFS 分析技术（包括 EXAFS-FT，EXAFS-WT，EXAFS 拟合，XANES 模拟和拟合）对金属原子的配位构型进行了深入系统的解析，明确给出了石墨烯基 MN_4C_4 型单原子的谱学特征。TEM 结果进一步证实了 XAFS 的结果。与传统制备方法相比，以氧化石墨烯为起始物不需要引入过多的金属来帮助形成高导电性的石墨型碳，而且微量金属的加入只起到形成单原子金属的作用，对材料的比表面积、导电性、孔洞结构等不产生影响。经该制备方法得到的不同金属单原子催化剂，具有相似的组成、形貌、结构和金属原子配位构型，为建立单原子催化剂的构效关系提供了非常理想的研究对象。研究人员以 MN_4C_4 配位结构为模型，结合密度泛函理论计算研究了电催化析氧反应活性、催化机理与金属种类之间的关联，并被电化学实验测试结果证实。

这项工作为石墨烯基单原子催化剂提供了一种普适性的合成方法，为今后其在电催化和能源转换中的广泛应用提供了指导。同时，该项工作为单原子催化剂的结构解析提供了重要依据与参考，并为相关的机理研究、构效关系研究以及新型高效催化剂的合理开发和设计奠定了基础。相关研究成果以首刊封面文章发表在 2018 年 1 月 8 日《自然-催化》上(*Nature Catalysis* 1, 63, 2018)。

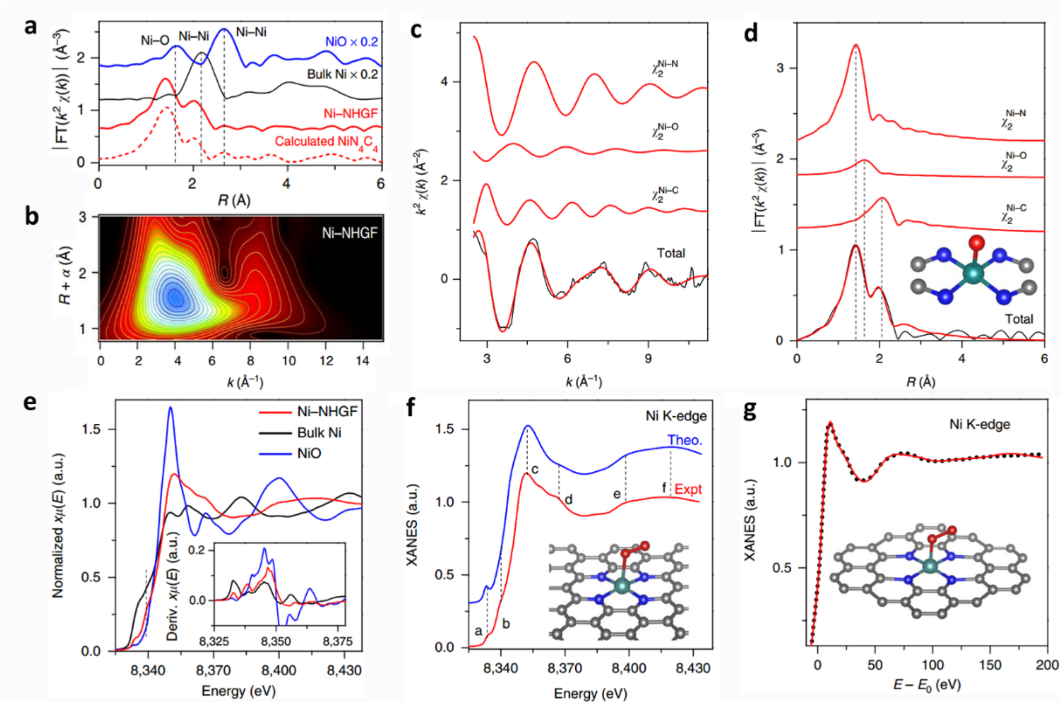


图 1 全局化 XAFS 分析技术（包括 EXAFS-FT，EXAFS-WT，EXAFS 拟合，XANES 模拟和拟合）在 Ni 原子局域配位构型解析中的应用。

发表文章：

Huilong Fei, Juncai Dong, Yexin Feng, Christopher S. Allen, Chengzhang Wan, Boris Volosskiy, Mufan Li, Zipeng Zhao, Yiliu Wang, Hongtao Sun, Pengfei An, Wenxing Chen, Zhiying Guo, Chain Lee, Dongliang Chen, Imran Shakir*, Mingjie Liu, Tiandou Hu, Yadong Li, Angus I. Kirkland, Xiangfeng Duan* and Yu Huang*, General synthesis and definitive structural identification of MN4C4 single-atom catalysts with tunable electrocatalytic activities, Nature Catalysis, 1, 63-72, 2018.

具有“鲁班凳”结构的非致密性硼酸盐线性零压缩（ZLC）材料

深海、深地等极端环境是国家战略资源的重要基地，构建空、天、地、水下立体网络，实现多维度、多源头、海量信息的采集、处理和传输，不仅是学科发展的前沿，更是国家海洋、深地发展的重大需求。水下/地下信息处理以及通讯比日常生活中困难得多，如何在高压/压力涨落中保持精密仪器光学性能的稳定性和精确性是深海、深地环境进行信息处理和光学通讯亟待解决的关键性难题。因此，探索具有反常力学性能的光学材料成为了现代光电信息功能材料领域的重要前沿方向。线性零压缩材料是指在静水压力下沿着某个方向的尺寸保持不变的材料。在外界环境压力变化时，线性零压缩材料由于这种独特的压力响应特性，其与某个维度尺寸相关的物理化学性质呈现出高度的稳定性，是解决某些在高压力涨落复杂环境中应用的高精度仪器性能稳定性的唯一途径。到目前为止，对线性零压缩材料的探索主要集中在具有密实结构的材料中，使得这一力学性质在若干超硬材料中被发现。然而非密实结构材料的线性零压缩材料尚未被系统地研究过。非密实结构材料由于其晶格中较大的孔洞，具有较高的结构容忍性，其结构具有更高的可调谐性，在某些特殊的领域例如客体分子存储及功能调控等方面具有天然的优势。

中国科学院理化技术研究所林哲帅研究员课题组系统地研究了非致密结构线性零压缩性质发生的条件，提出了线性零压缩性质的“鲁班凳”模型。在“鲁班凳”模型的指导下，发现硼酸盐材料 AEB_2O_4(AE=Ca 或 Sr)满足这一结构特征。课题组相关研究人员借助于在北京同步辐射装置 4W2-高压实验站采集的高压 X 射线衍射数据表明两个材料在 0~8GPa 未发生相变，其中 CaB_2O_4 和 SrB_2O_4 沿 a 轴方向的压缩率分别为 0.3/TPa 与 0.0/TPa, 均低于自然界最硬的材料金刚石（0.75/TPa），证实了 AEB_2O_4 具有线性零压缩性质。

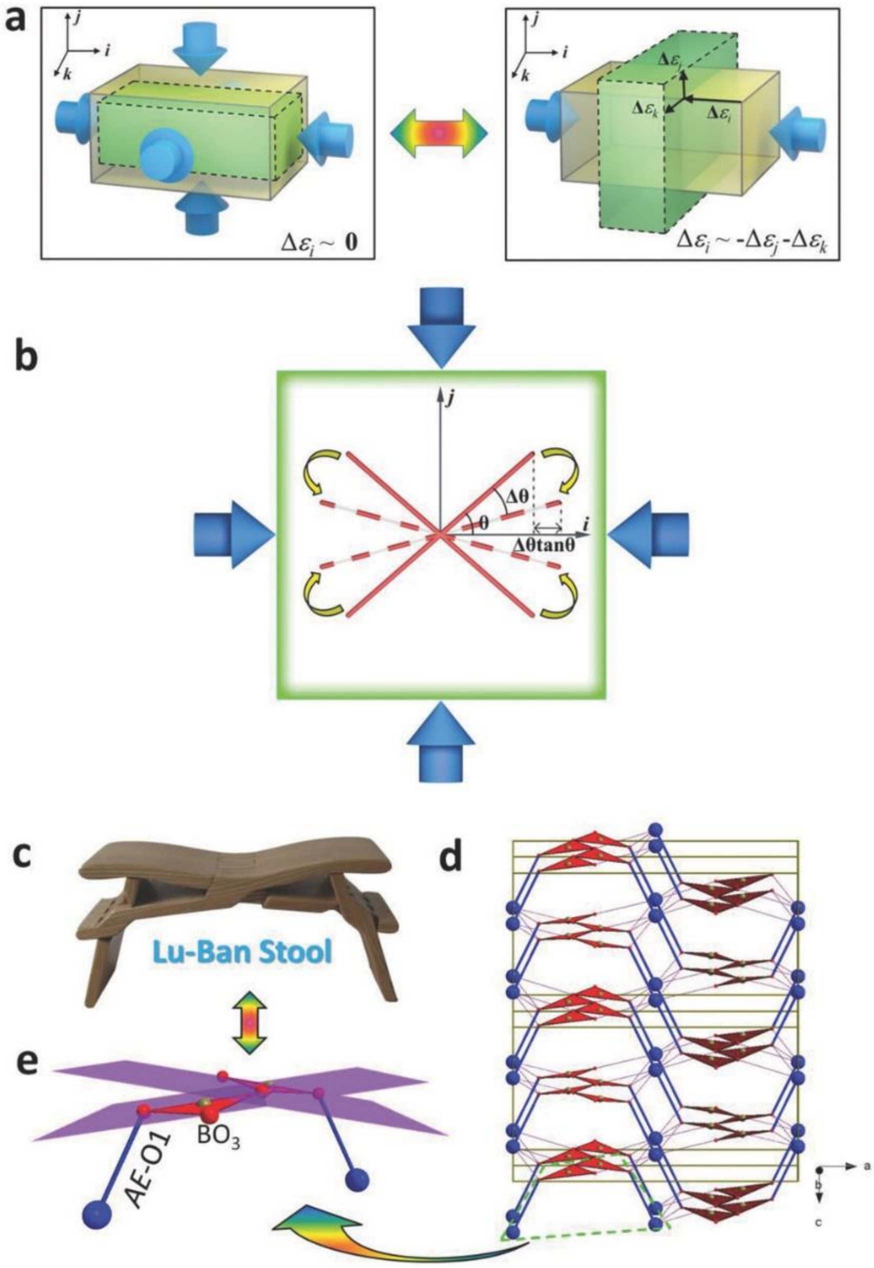


图 1 AEB_2O_4 的线性零压缩性质及相关机制

为了进一步研究 AEB_2O_4 罕见的线性零压缩性质的微观机制，研究人员对其压力下的晶体结构进行了第一性原理的模拟。发现由于硼氧基团之间强的共价相互作用 BO_3 基团的构型随着压力的变化基本保持不变，而相邻 BO_3 基团之间的二面角随着压力的增大发生了严重的变小，产生了压致膨胀的效应。然而 AE-O 键随着压力的增大发生了收缩，导致了压致收缩的效应。压致膨胀和压制收缩效应相互抵消，导致了线性零压缩效应。同时发现 CaB_2O_4 和 SrB_2O_4 零压缩性质的微小差别来自于 Ca-O 键和 Sr-O 键键序的微弱不同。另外光学透过测试表明，两个材料的紫外截止边均在 170nm 左右，是所有已知线性零压缩材料中最短的。基于 AEB_2O_4 的线性零压缩性质和优异的紫外光学性质，研究人员对其在高压力涨落环境中应用的

光学传感器件进行了设计。

该研究工作中，在北京同步辐射实验装置 4W2-高压实验站采集的高压衍射数据提供了最重要的实验数据支撑，相关工作发表在《Advanced Materials》上（Adv. Mater. 2018, 32, 1801313），并被 Advanced Science News 以 Video Abstract 的形式作为亮点工作报道。

发表文章：

Xingxing Jiang, Yi Yang, Maxim S. Molokeev, Pifu Gong, Fei Liang, Shuaihua Wang, Lei Liu, Xiang Wu, Xiaodong Li, Yanchun Li, Shaofan Wu, Wei Li, Yicheng Wu, and Zheshuai Lin* , Zero Linear Compressibility in Nondense Borates with a “Lu-Ban Stool”-Like Structure. Adv. Mater. 2018, 30, 1801313.

SiO_2 保护壳模板法合成 Fe-N 掺杂碳纳米纤维及其增强氧还原反应性能

氧还原反应(ORR)在诸如燃料电池和氯碱电解槽等许多储能和转换系统的商业化中起着重要作用。Pt 及其合金是目前最有效的 ORR 催化剂。然而，Pt 的高昂成本和稀缺性严重阻碍了这些涉及 ORR 的能源设备的广泛应用。为了解决这个棘手的问题，大量的研究工作致力于制备可替代、低成本和高性能的无金属和非贵金属(NPM)催化剂。碳负载的氮配位金属(Me/N/C，Me= Fe 和/或 Co)催化剂已被认为是替代 Pt 基催化剂的最有希望的候选者。但是目前，大部分 Me/N/C 催化剂在碱性条件下与 Pt/C 催化剂具备可比性，但是在酸性条件下性能不好。提升酸性电解质中 Me/N/C 催化剂的催化性能是目前亟待解决的问题。

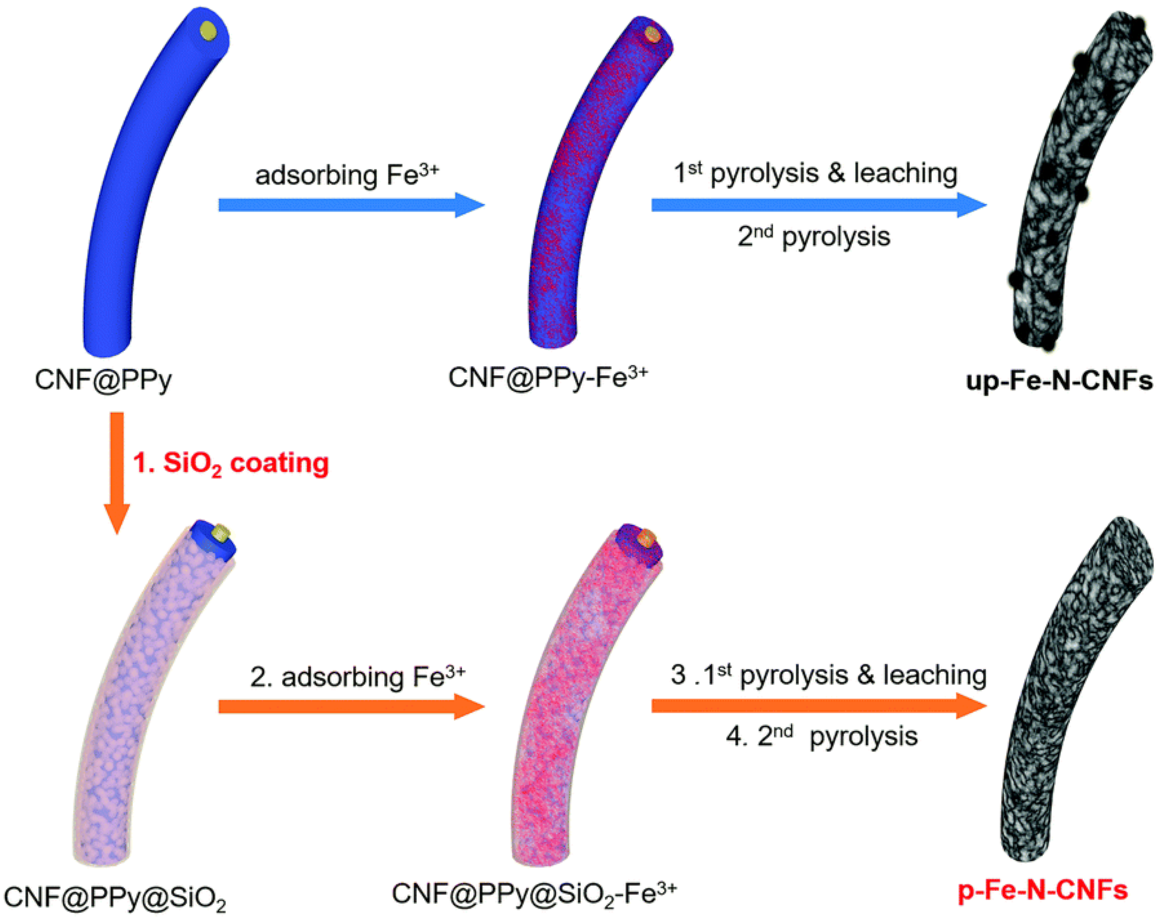


图 1 多重模板法制备介孔/微孔铁、氮共掺杂碳纳米纤维过程示意图

为了解决上述问题，中国科学技术大学**俞书宏教授**和**梁海伟教授**（共同通讯作者）等人报道了一种简单的基于聚吡咯(PPy)涂覆的碳质纳米纤维(CNF@PPy)、以 SiO_2 保护壳为介导的热解法来制备 Fe/N/C 催化剂。研究表明，SiO_2 壳不仅可以限制铁元素的自由迁移，还可以抑制

热解过程中无机 Fe 基纳米颗粒的生长，因此促进了高活性 Fe-Nx 位点的形成。该方法的另一个优点是形成具有 941 m^2 g^{-1} 的高比表面积的分层多孔碳纳米纤维结构(CNFs)。所制备的催化剂在 0.1 M HClO4 中具有 0.74 V (vs. RHE)的半波电位，扩散限制电流为 5.5 mA cm^{-2}，电子转移数在 0.2-0.4 V (vs. RHE)下为 3.99，使其成为性能最好的 NMP 催化剂之一。

该课题组在北京同步辐射装置 1W1B-XAFS 实验站上采集了 Fe 的 K 边 XAS 谱，利用 XANES 和 EXAFS 分析，从结构上证明了该催化剂在 SiO_2 保护壳下，不仅可以限制 Fe 活性位点的迁移，而且还限制了高温热解过程中挥发性气态物质的捕获，同时优化了 Fe-N-CNFs 催化剂的表面官能和多孔结构。与没有 SiO_2 保护壳制备的催化剂相比，Fe-N-CNFs 催化剂在酸性介质中具有显着提高的 ORR 活性和优异的稳定性。相关文章"SiO_2-protected shell mediated templating synthesis of Fe-N-doped carbon nanofibers and their enhanced oxygen reduction reaction performance"发表在 Energy Environ. Sci.上（Energy Environ. Sci., 2018, 11, 2208-2215）。

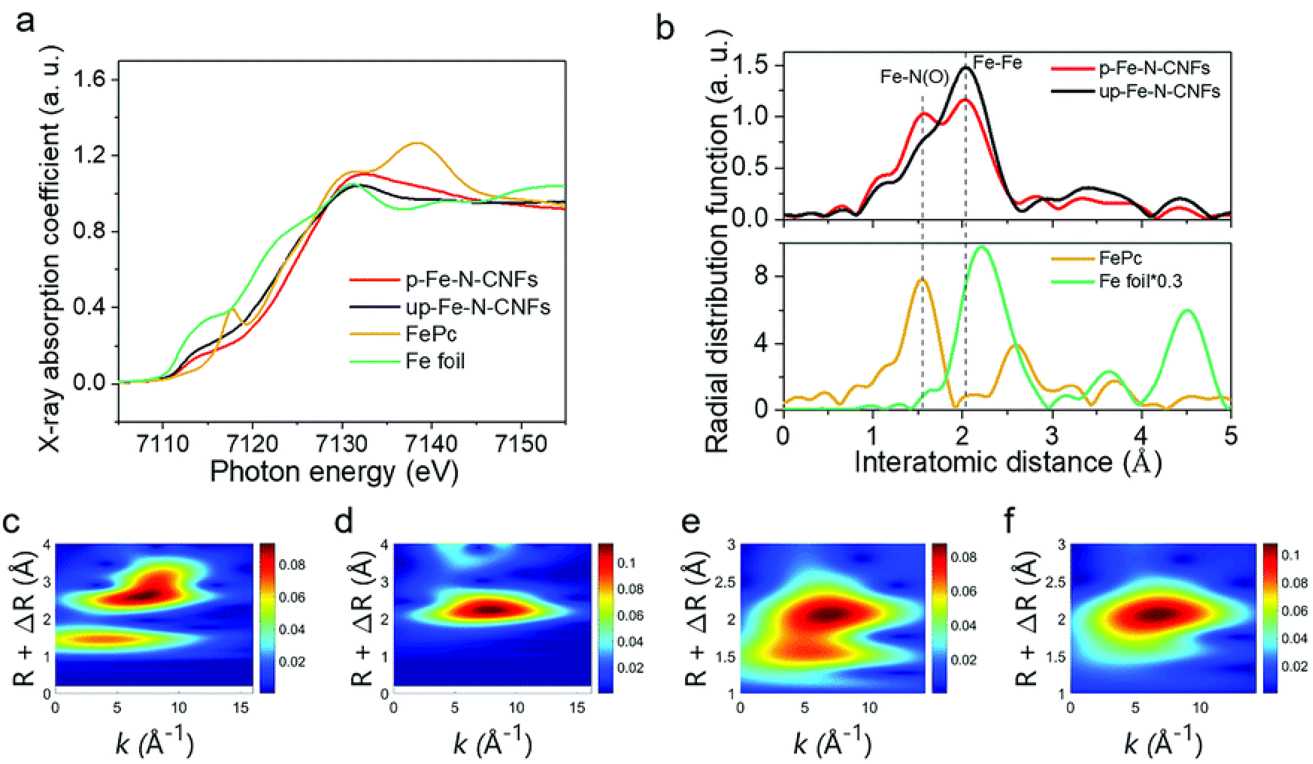


图 2 Fe 的 K 边 X 射线吸收谱数据及分析结果

该研究工作创新性地采用 SiO_2 包覆在 Fe/N/C 催化剂表面，以改善催化剂的表面官能度和多孔结构；合成的含 SiO_2 保护壳的 Fe-N-CNFs 催化剂(p-Fe-N-CNFs)催化剂在酸性和碱性条件下都具备良好的 ORR 活性和稳定性，稳定性较 Pt/C 更好。本工作开发了一种有效的 SiO_2 保护壳热解方法，合成高活性的中孔/微孔 Fe-N-CNFs 催化剂。与未经 SiO_2 保护的催化剂相比，该方法合成的催化剂在起始电位，半波电位和电子转移数方面表现出很大的 ORR 性能。该催化剂优异的 ORR 性能与其较多的铁/氮活性位点，高比表面积，分层中孔/微孔结构和高度石

墨化碳密切相关。这种 SiO_2 保护的热解策略，可以应用于制备其他用于析氢反应，析氧反应和非均相催化反应的具有高性能的碳基 NPM 催化剂。值得注意的是，本文不是采用含金属卟啉或沸石咪唑酯骨架作为前体，而是选用价格较低的热液碳纳米纤维和吡咯为前驱。此外，这种方法将更容易扩展为制备其他金属/N/C（Co，Ni，Mo 等）催化剂或双金属/N/C 催化剂以及其他电催化反应。

发表文章：

Bi-Cheng Hu, Zhen-Yu Wu, Sheng-Qi Chu, Hong-Wu Zhu, Hai-Wei Liang,* Jing Zhang and Shu-Hong Yu*, SiO_2-protected shell mediated templating synthesis of Fe–N-doped carbon nanofibers and their enhanced oxygen reduction reaction performance. Energy Environ. Sci., 2018, 11, 2208-2215.

电子超晶格对蓝磷电子性能的调制

蓝磷作为一种之前未知的磷的材料相，被理论预言具有类黑磷的层状结构、好的稳定性、小的电子有效质量以及高的电子迁移率等特点，因此受到了广泛的关注。另外，由于蓝磷具有极好的可伸缩性，以及与磷基半导体材料的兼容性，使得其在下一代光电器件中具有广泛的应用前景。最近，实验上通过分子束外延的方法，利用衬底与蓝磷之间的相互作用力，制备出了具有蜂窝状结构的蓝磷。同时，衬底与蓝磷之间具有较大的晶格错位，导致蓝磷受到衬底的较强的张应力的影响，进而影响了蓝磷的原有的电子性能。这些张应力以何种形式存在于蓝磷的结构中，以及是否可以得到多层的蓝磷材料，依然不清楚。而作为决定蓝磷器件应用的一个重要参数，蓝磷的电子性能也没有得到详细地研究。

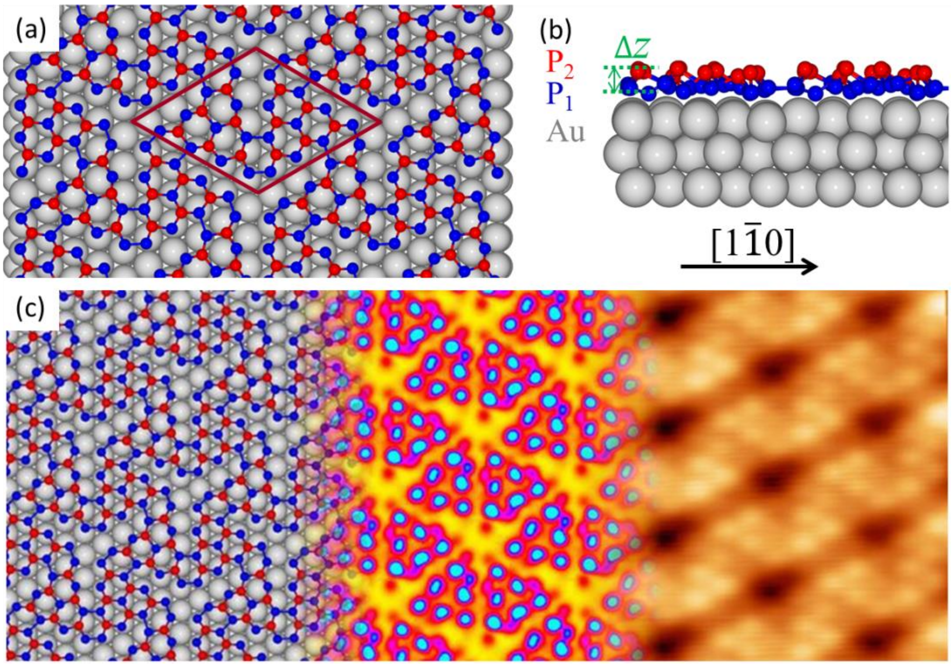


图 1：(a)和(b) 沿着 Au [1$\bar{1}$0] 方向的 4×4 蓝磷/5×5Au(111) 原子结构图。P_2 和 P_1 代表具有不同曲翘结构的 P 原子，红色的菱形代表 4×4 蓝磷的元包，Δz 是 4×4 蓝磷的曲翘高度. (c) 从左到右为结构模型到模拟的 STM 图到实验得到的 STM 图的演变。

在本研究工作中，澳大利亚伍伦贡大学杜轶课题组与北京同步辐射装置 4B9B-光电子能谱实验站联合研究，在 Au(111)衬底上成功制备出了高质量的蓝磷样品(ACS Nano, 12, 5059 (2018))。在此基础上，通过延长制备时间，发现无法得到第二层的蓝磷。但是在室温下继续在蓝磷上蒸镀磷原子，该研究组观测到蒸镀的磷可以吸附在大周期中的谷位，表明谷位具有较大的空间让磷原子寄存在上面。他们利用第一性原理计算结合这个实验结果，给出了蓝磷的结构模型。理论模拟的 STM 图和实验数据吻合（图 1），表明了衬底对于蓝磷的强的张应力的影响主要在谷位。同时，北京同步辐射装置 4B9B-光电子能谱实验站工作人员利用该实

验站的角分辨光电子能谱（ARPES），首次研究了蓝磷的能量色散关系以及衬底对于蓝磷电子结构的影响。研究结果显示蓝磷在 Au(111)衬底上形成了电子超晶格，进而对 Au 的 *sp* 带产生了强烈的带折叠现象。ARPES 结果清晰地给出了带隙确实存在于蓝磷中，由于衬底与蓝磷之间的相互作用力，蓝磷的带隙由理论预言的 2 eV 被调制到 1.18 eV，如图 2 所示。基于图 1 中的结构模型，通过第一性原理计算得到的能带结果与 ARPES 结果一致。同时计算结果显示，受到 Au(111)衬底上的调制，蓝磷具有很小的载流子有效质量和比黑磷更大的电子迁移率，具有很好的应用前景。这些工作为蓝磷的电子结构进一步地调控以及其电子器件的应用奠定了基础。

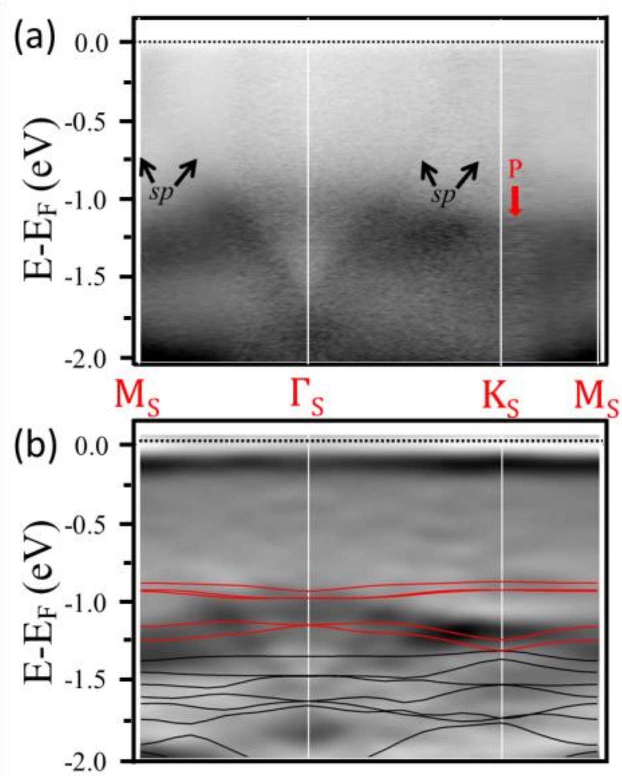


图 2：(a) 沿 M_S-Γ_S-K_S-M_S 方向的 Au(111)的 ARPES 谱。P 和 *sp* 分别代表沉积的 P 的信号以及 Au(111)衬底的 *sp* 带。(b)图（a）中的二次微分图以及 DFT 计算结果。红色的实线代表计算结果中价带顶。

发表文章：

Jincheng Zhuang, Chen Liu, Qian Gao,| Yani Liu, Haifeng Fen, Xun Xu, Jiaou Wang, Jijun Zhao, Shi Xue Dou, Zhenpeng Hu, and Yi Du*, Band Gap Modulated by Electronic Superlattice in Blue Phosphorene, ACS Nano 12, 5059, 2018.

自组装体结构的同步辐射小角 X 射线散射分析

以分子、原子簇、纳米粒子等作为基本构建单元自组装可形成具有一定几何规律的有序超晶格结构。在有序堆叠体内部，构建单元的周期性排布，增强了构建单元之间的光、电、磁等的相互耦合，使得自组装体表现出与构建单元以及块体均不同的物理和化学性质。因此，周期性结构的超晶体材料在光学、电学以及传感等应用领域具有很大的发展潜力。利用同步辐射小角 X 射线散射技术实现对超晶结构的解析，从而研究组装结构差异以及因结构差异导致的性质差异的关系。

中国科学院化学研究所王铁课题组，利用自组装技术得到了金超粒子（gold superparticles）@金属有机骨架（MOFs）的核壳结构，通过 MOFs 的多孔结构，降低气体分子在靠近表面增强拉曼散射（SERS）热点时的流动速度，并对气体分子进行吸附和有效捕获。在 SERS 基底表面接枝拉曼活性分子，通过活性分子暴露的官能团与待测物进行特异性反应，实现了复杂混合物的特异性捕获以及检测，从而可实现对特定的人体呼出物中癌症标志物的定量检测，实现疾病相关生物分子的痕量检测，建立重大疾病的早期筛查的新方法（*Adv. Mater.* 2018, 30, 1702275）。本研究利用北京同步辐射装置 1W2A 线站的小角 X 射线散射技术表征了纳米材料自组装体为紧密面心立方堆积（fcc），并且计算出超晶体的晶格常数(a)为 11.0±0.3nm，为等离子体表面的电磁场模拟提供有效依据。

同时，该课题组还利用与不同分子长度直链巯基烷酸连接的银簇具有不同的亲疏水体积比的特性，设计得到了六方相和层状相堆积结构的寡核原子簇组装体。根据 Israelachvili 理论，巯基乙酸与银簇的复合物由于亲水基团体积相对较大，趋向于形成柱状相组装结构（六方相）；随着碳链的增长，亲水基团与疏水基团体积比趋于一致，使得长链端与银簇形成层状相组装结构（Adv. Mater., 2018, 30, 1706327）。该实验通过北京同步辐射装置 1W2A 线站的小角 X 射线散射技术分别分析了各自结构所对应的晶格参数。Ag-MAA 散射环获得其为六方相结构；而从 Ag-MPA 至 Ag-MUA 的层状结构，随着碳原子数增加，（100）峰位逐渐左移，说明晶格间距随碳链长度增加而增大。同时，不同的组装体结构的机械性能差异明显。SAXS 技术为探索因组装结构差异导致的机械性能差异提供了有效手段。

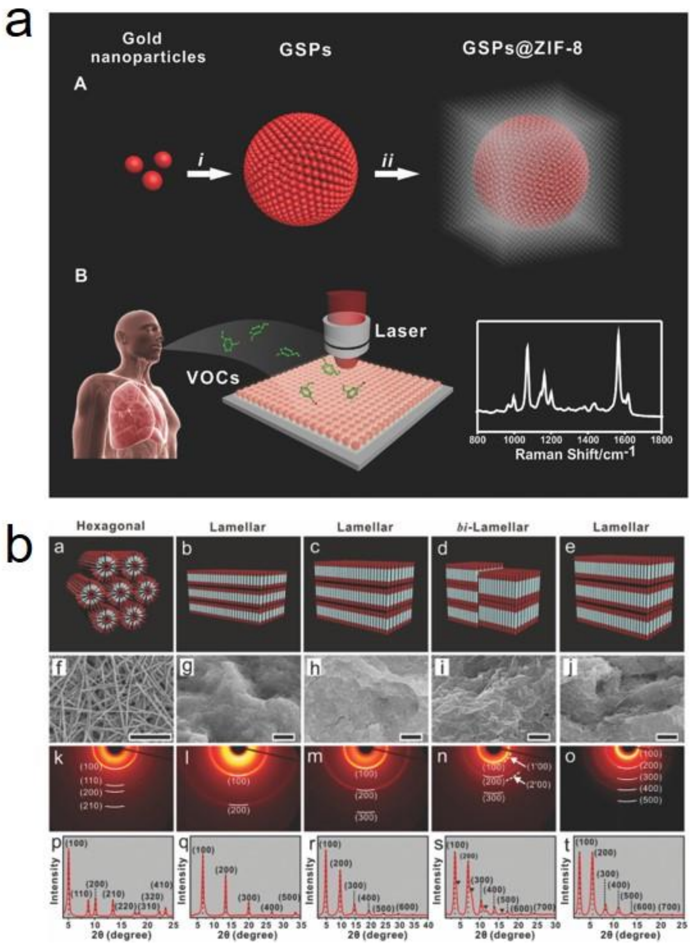


图 1（a）以金纳米颗粒自组装体@MOF 材料为检测基底进行人体呼出物中挥发性有机化合物（VOCs）的检测。（b）用银离子和直链巯基烷酸分子制备了寡核银簇的六方相及层状相组装体。通过 SAXS 分别分析了各自结构所对应的晶格参数。

发表文章：

1. Xiaoyun Qin, Dan Luo, Zhenjie Xue, Qian Song, and Tie Wang*, Self-Assembled Ag-MXA Superclusters with Structure-Dependent Mechanical Properties, Adv. Mater. 2018, 30, 1706327.
2. Xuezhi Qiao, Bensheng Su, Cong Liu, Qian Song, Dan Luo, Guang Mo, and Tie Wang*, Selective Surface Enhanced Raman Scattering for Quantitative Detection of Lung Cancer Biomarkers in Superparticle@MOF Structure, Adv. Mater. 2018, 30, 1702275

利用刚–柔两亲性嵌段共聚物制备聚合物立方晶和六方晶

两亲性嵌段共聚物在近几十年来已经被广泛研究。在两亲性嵌段共聚物的组装中，疏水相互作用是最主要的作用力之一，可以被嵌段共聚物的浓度和形状、水含量、溶剂的性质、温度等多种因素影响。在溶液组装中，堆积参数 P 可以用来定性描述以上影响因素的一个综合作用（$P = V/(a_0 l_c)$，V 和 l_c 分别代表疏水段的体积和长度，a_0 代表亲水段截面面积）。随着 P 的增大，两亲性嵌段共聚物可以组装成囊泡、胶束、片层状结构、聚合物立方晶等多种结构。有着三维周期最小表面的聚合物立方晶和脂质自组装中的立方晶非常相似，都是在三维周期最小表面中含有两个互相穿插互不连接的连续网络。最近，聚合物立方晶在一些嵌段共聚物体系中也开始有报道出现。在聚合物立方晶形成的时候，P 通常大于 1。与脂质组装的立方晶对比，聚合物立方晶有着更大的周期尺寸，可以被应用到纳米模板、生化反应器、药物传输等多个领域。但是，到目前为止，溶剂、聚合物的几何结构、浓度等因素是如何影响聚合物立方晶的形成的，仍然没有被研究清楚。聚{2，5-二[(4-甲氧基苯基)氧羰基]苯乙烯}（PMPCS）是典型的甲壳型液晶高分子，在本体和溶液中都会采取伸直的链构象。

北京大学周其凤、范星河、沈志豪课题组利用 ATRP 方法制备了含聚环氧乙烷（PEO）和聚乙烯基对苯二甲酸二对甲氧基苯酯（PMPCS）的刚柔两亲性嵌段共聚物 PEO-b-PMPCS（$E_{45}M_x$），通过在 THF 和 H_2O 中对其进行组装，在分别控制疏水链段的分子量和聚合物的初始浓度这两个条件时，PEO-b-PMPCS 可以在溶液当中形成具有 $Im\bar{3}m$ 和 $Pn\bar{3}m$ 对称性的聚合物立方晶以及具有 p6mm 对称性的聚合物六方晶。该团队从而提出通过控制亲水头部和疏水尾链之间的头尾不对称性，可以精确调控聚合物立方晶和六方晶的形成。同时，本工作制备得到的聚合物立方晶和六方晶由于具有双连续网络孔道或者六方网络孔道，从而可以将其应用到多孔模板、化学分离等领域。借助北京同步辐射装置 1W2A 线站的 SAXS 技术对聚合物结构的系统表征，该研究组证实了聚合物立方晶和六方晶的形成。以上相关成果发表在 Angew. Chem. Int. Ed.（Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 10132–10136）上。

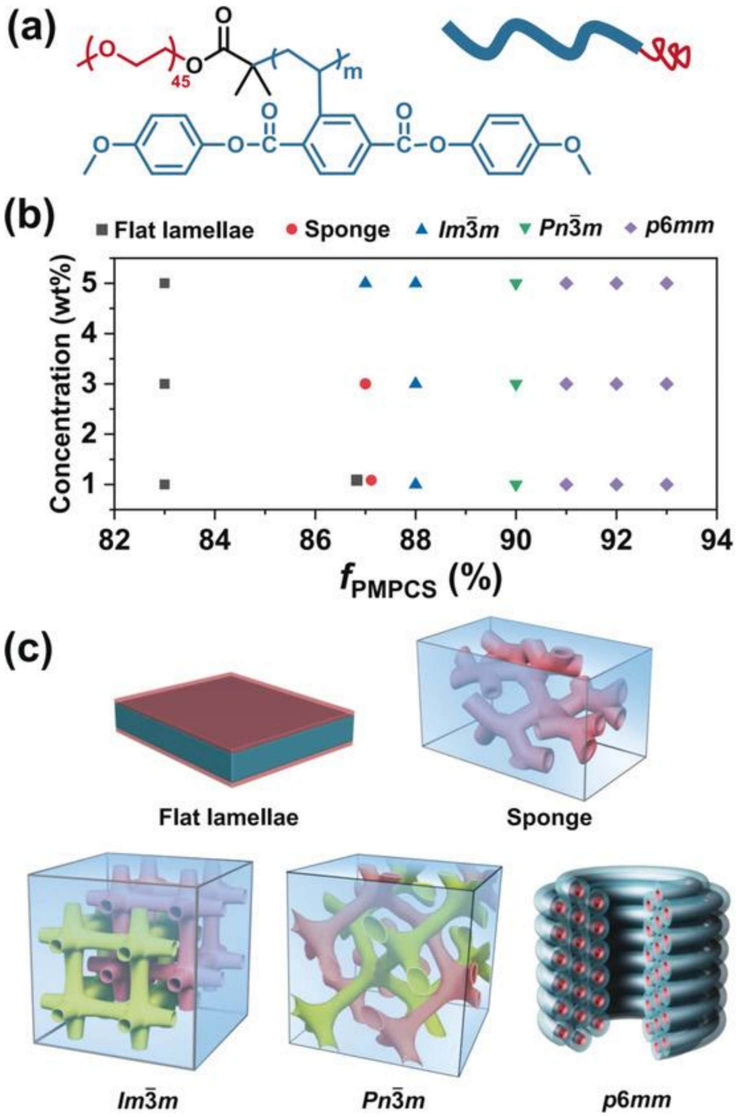


图 1 嵌段共聚物的组装结构随头–尾不对称性的增加而发生变化的示意图。

发表文章：

Xiaolin Lyu, Anqi Xiao, Wei Zhang, Pingping Hou, Kehua Gu, Zhehao Tang, Hongbing Pan, Fan Wu, Zhihao Shen,* and Xing-He Fan, Head–Tail Asymmetry as the Determining Factor in the Formation of Polymer Cubosomes or Hexasomes in a Rod–Coil Amphiphilic Block Copolymer. Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 10132.

锂–空气电池电化学产物相变的原位 X 射线衍射研究

锂-空气电池是一类高效的金属空气燃料电池。具有比容量高、质量轻、污染小、原料易得、造价低、可逆性良好等优点。特别是锂空气电池直接使用金属锂作为负极时，其理论能量密度能达到 11700 $Wh\cdot kg^{-1}$，被认为是最具潜力的二次电池体系之一。然而，在电池反应中，正极反应（氧还原反应 ORR 和氧析出反应 OER）的动力学过程极其缓慢，并造成了极化大、效率低、循环稳定性差、副反应多等一系列问题，限制了锂空气电池的实际应用。因此，设计、开发具有氧还原/氧析出双重催化功能的新型高效催化剂体系以改善 ORR、OER 反应动力学是目前锂-空气电池亟待解决的关键问题之一。要设计开发出具有双功能氧催化特性的催化剂，对于锂-空气电池在电化学场作用下的作用机制研究，就显得尤为重要，且具有重大的指导意义。特别是催化剂和电池产物的电化学原位研究，对于深入了解反应机理，改善反应体系，合理设计催化剂十分重要。

近些年逐步发展起来的电化学 X 射线衍射、电化学红外光谱 、电化学拉曼光谱等原位技术极大地推动了对于锂空气电池催化反应过程的机理认知。其中，电化学 XRD 的应用具有历程碑式的意义，通过对电池进行原位 XRD 测试，成功地证明了锂空气电池的可逆放电产物。然而，传统的 X 射线衍射仪虽然易于实现，但对于原位电池样品要求严格，测试时间长，测试环境难以控制，空间分辨率低等缺点。相比而言，同步辐射 X 射线衍射具有强度大、空间分辨率高、偏振性好、测试速度快等优点。利用同步辐射 X 射线衍射配合 Mythen 探测器，可以原位、高效、快速地监测锂-空气电池在电化学场中催化剂的相变、产物相变和副反应相变等。其对于深入揭示锂空气电池中的反应机理，推动锂空气电池的应用具有十分重要的作用。

目前，基于北京同步辐射装置 4B9A-衍射实验站的同步衍射设备配合高效 Mythen 检测器，中国科学院大学刘向峰课题组成功地搭建了“基于同步辐射的原位电化学衍射装置”，该装置可以有效的应用于锂空气电池、钠空气电池和金属离子电池等的原位电化学衍射研究。通过与 4B9A-衍射实验站的合作，使用该衍射装置，一些关于锂空气电池和钠空气电池的重要问题已经被报道：

1）通过原位电化学衍射研究，该研究组证明了含有缺陷 Co_3O_4 催化锂空气电池主产物 Li_2O_2 形成的可逆过程，并研究了电极产物的产生时间等问题

2）通过原位电化学衍射研究，该研究组模拟了在实际空气条件下特别是在高湿度空气中的电化学反应。结果表明单一暴露（111）晶面的 Co_3O_4 在环境条件下催化产物率先生成 LiOH 产物，最终生成 LiOH 与 Li_2O_2 混合产物。

3）通过原位电化学衍射研究，该研究组证明了在 CoP/CoO 催化的钠-空气电池中存在的

副反应情况，已及明显的观察到了放电产物中 Na_2O_2 与 NaOH 的相变行为。本项研究成果发表在国际知名期刊 ACS Catal.上（ACS Catal. 2018, 8, 8953−8960）。

随着对于锂-空气电池的理解不断深入和对于同步衍射技术的不断发展，我们相信，未来，电化学同步衍射技术将在锂空气电池失效机制、瞬态中间产物表征、非晶产物表征等方面起到更重要的应用。这也正是该研究组未来的努力方向之一。

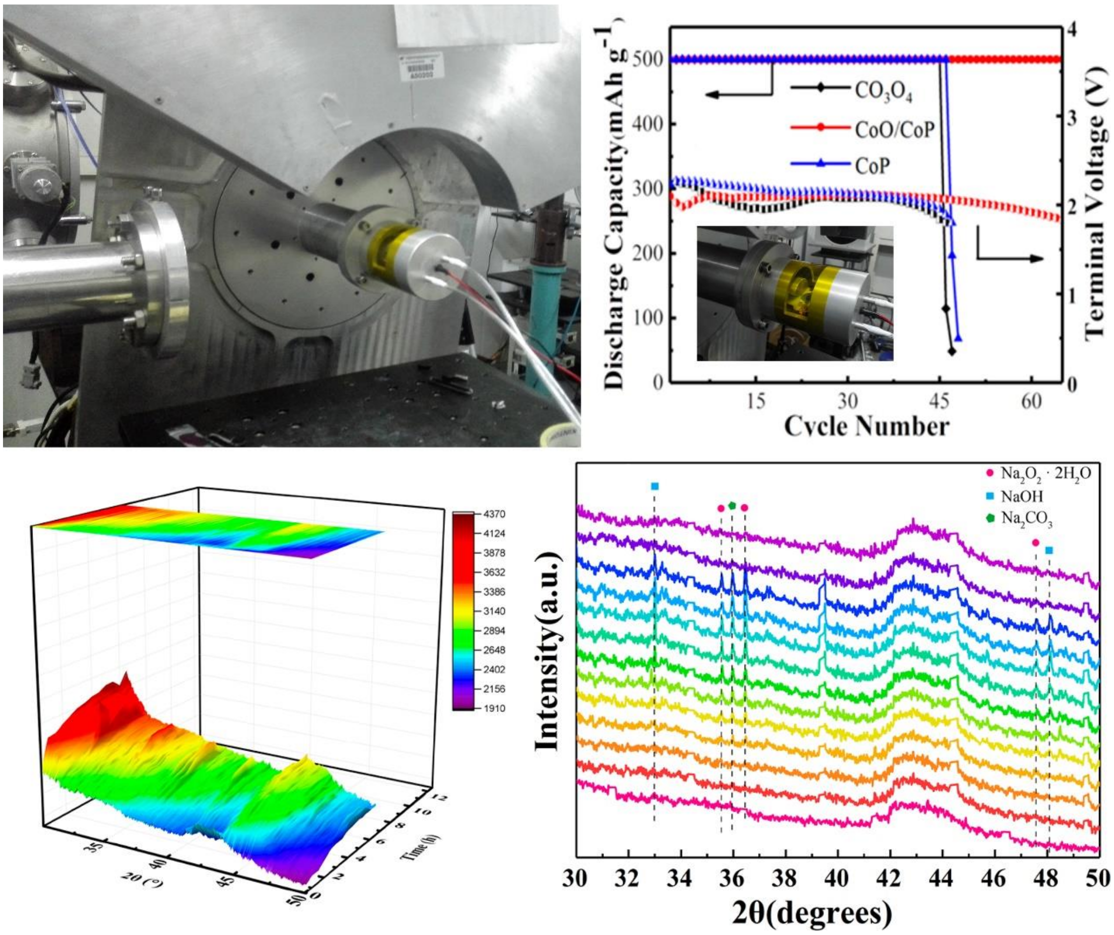


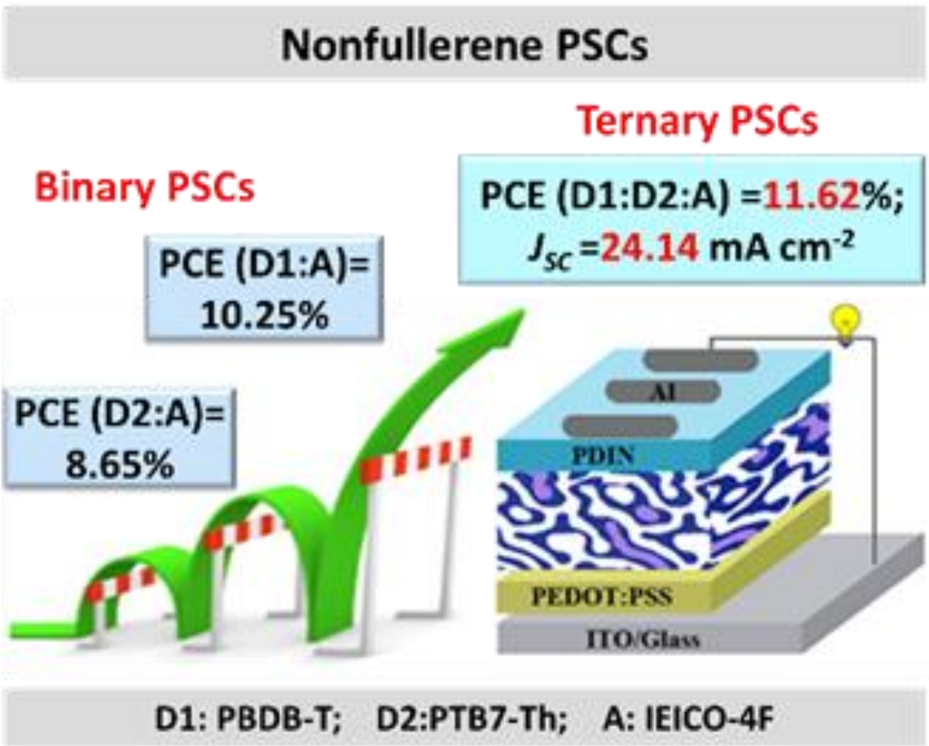
图 1 基于同步辐射的原位电化学衍射装置（左上），Co_3O_4, CoO/CoP 和 CoP 催化的 Na-O_2 电池的电化学性能（右上）及其三维（左下）和二维（右下）原位 XRD 图。

发表文章：

Junkai Wang, Rui Gao, Lirong Zheng, Zhongjun Chen, Zhonghua Wu, Limei Sun*, Zhongbo Hu, Xiangfeng Liu*, CoO/CoP Heterostructured Nanosheets with an O–P Interpenetrated Interface as a Bifunctional Electrocatalyst for Na–O_2 Battery. ACS Catal. 2018, 8, 8953−8960.

基于双给体体系的三元非富勒烯聚合物太阳能电池

在该工作中，我们以超窄带隙非富勒烯材料 IEICO-4F 为受体，宽带隙给体材料 PBDB-T 为给体制备非富勒烯聚合物太阳能电池。中等带隙给体 PTB7-Th 被选为第三组分，由于 PTB7-Th 和 PBDB-T 的 HOMO 能级非常相似，以及其与主体系互补的吸收光谱。通过掺入 20 wt%的 PTB7-Th，器件的光电转换效率从 10.25%提高到 11.62%。最优器件的短路电流提升到 24.14 mA cm^{-2}，填充因子提升到 65.03%。PTB7-Th 的主要贡献可以总结为增强的光子俘获能力以及给体间的能量转移促使的激子利用率的提高。PTB7-Th 也可以作为一种调节剂来优化 PBDB-T 的分子排布以及电荷传输，这有利于填充因子的优化。三元器件的开路电压和二元器件保持一致，这是由于给体材料间相似的 HOMO 能级。相关工作发表于 *Adv. Energy Mater.*, 2018, **8**, 1702854。



该工作自2018年4月出版以来，受到了国内外同行的广泛关注。目前该工作被引60次（Web of Science），被ESI高被引收录（Highly Cited Paper）。

http://apps.webofknowledge.com/full_record.do?product=UA&search_mode=GeneralSearch&qid=13&SID=5BSXBbDg5ZNCDBPq3bL&page=1&doc=3

在北京同步辐射装置（BSRF）1W1A-漫散射实验站，通过掠入射 X 射线衍射（GIXD）测量，我们研究了不同 PTB7-Th 含量对混合薄膜内分子排布方式的影响。在三元混合薄膜

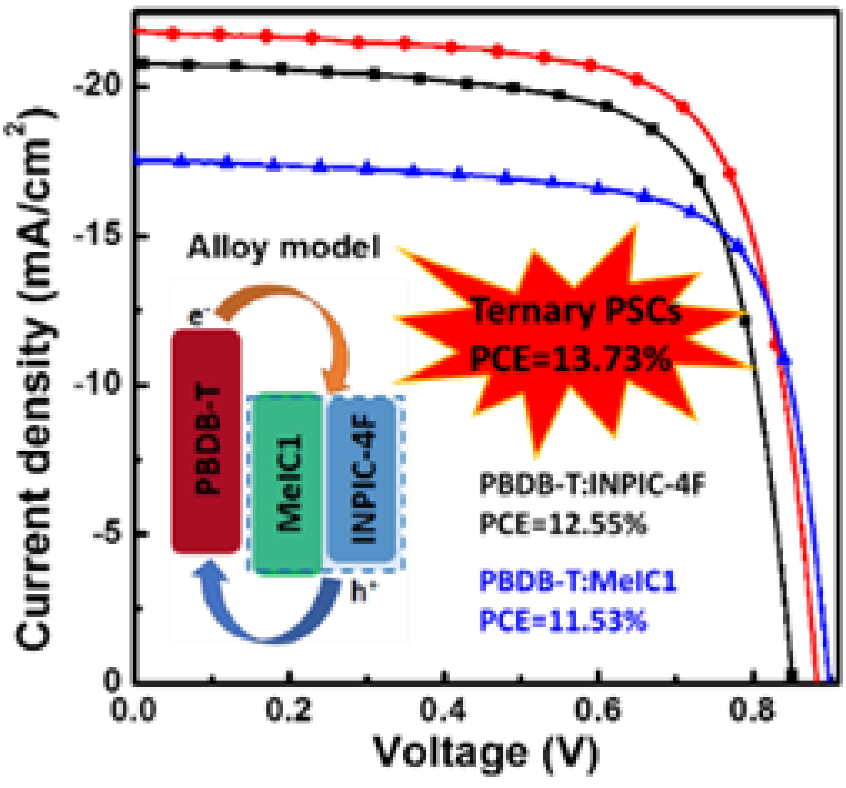
中，（100）衍射峰的增强及（200）衍射峰的出现可以在面内，面外方向上同时被观察到，这表明在三元混合薄膜中形成了 3D（混合的 edge-on 和 face-on 取向）的分子排布。Face-on 分子排布的出现有利于电荷沿着垂直基底方向传输。

发表文章：

Xiaoling Ma, Yang Mi, Fujun Zhang*, Qiaoshi An, Miao Zhang, Zhenghao Hu, Xinfeng Liu*, Jian Zhang, and Weihua Tang. Efficient Ternary Polymer Solar Cells with Two Well-Compatible Donors and One Ultranarrow Bandgap Nonfullerene Acceptor. Adv. Energy Mater., 2018, 8, 1702854.

通过集成二元器件及材料的优势制备高效率三元器件

三元策略已经被证明是一种提高器件性能的有效方法。在三元体系中，通常选用与主体系吸收光谱互补的材料作为第三组分，从而实现增强有源层内光子俘获的目的。我们在该工作中提出了一个新的选择材料选择方法来制备高效率三元器件：除了所采用的材料具有互补的吸收光谱之外，相应的两种二元器件之间也需要有互补的光伏参数。基于该选择方法，两个兼容性较好的小分子非富勒烯受体 (INPIC-4F 和 MeIC1)以及一个聚合物给体 PBDB-T 被用来制备有源层。两种二元器件相比，基于 INPIC-4F 的二元器件展示了相对较高的短路电流，基于 MeIC1 为受体的二元器件展示了相对较高的开路电压和填充因子，其效率分别为 12.55% 和 11.53%。通过采用三元策略，两种二元器件的优势被集成在一个器件中，使器件的性能得以提升。当 MeIC1 在受体中的含量达到 50wt%时，器件短路电流提升到 21.86 mA cm^{-2},开路电压提升至 0.88 V, 填充因子提升至 71.39%，器件效率达到最优为 13.73%。器件性能的提高应该被归功于有源层的光子俘获的增强和薄膜形貌的优化。基于该选择方法，另外两种材料 IT-M 和 MeIC 被选为第三组分，使器件性能分别提升至 13.05%和 13.4%，这进一步证明了该方法的普适性。相关工作发表于 Energy & Environmental Science, 11, 2018, 2134。



该工作自2018年8月出版以来，受到了国内外同行的广泛关注。目前该工作被引42次（Web of Science），被ESI高被引收录（Highly Cited Paper）。

http://apps.webofknowledge.com/full_record.do?product=UA&search_mode=GeneralSearch&qid=2&SID=5BSXBbDg5ZNCDBPq3bL&page=1&doc=1

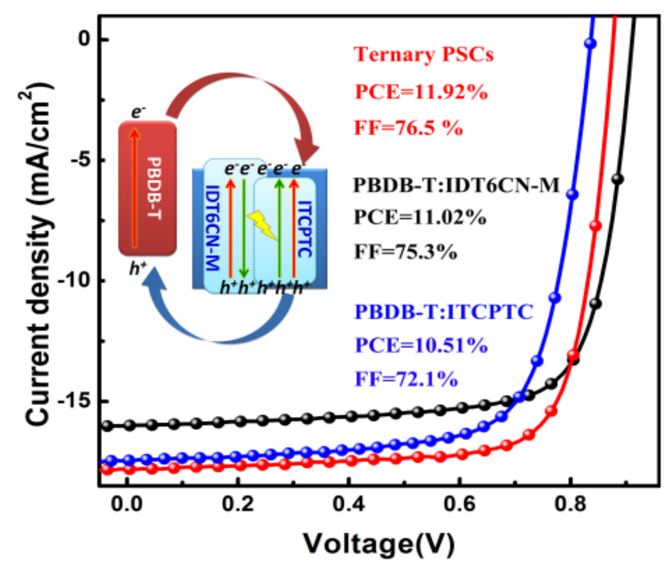
在北京同步辐射装置（BSRF）1W1A-漫散射实验站，通过掠入射 X 射线衍射（GIXD）测量，我们研究了不同 MeIC1 含量对混合薄膜内分子排布方式的影响。随着 MeIC1 引入，混合薄膜的衍射峰先增强后减弱，当 MeIC1 在受体中掺杂比例为 50 wt%时，衍射强度达到最优。同时面外方向（100）衍射峰位置也随着 MeIC1 的引入逐渐朝高 q 值方向移动，表明层间分子排布更加紧密。实验结果表明在优化的三元混合薄膜中，分子排布方式更加有序，这有利于电荷的传输。

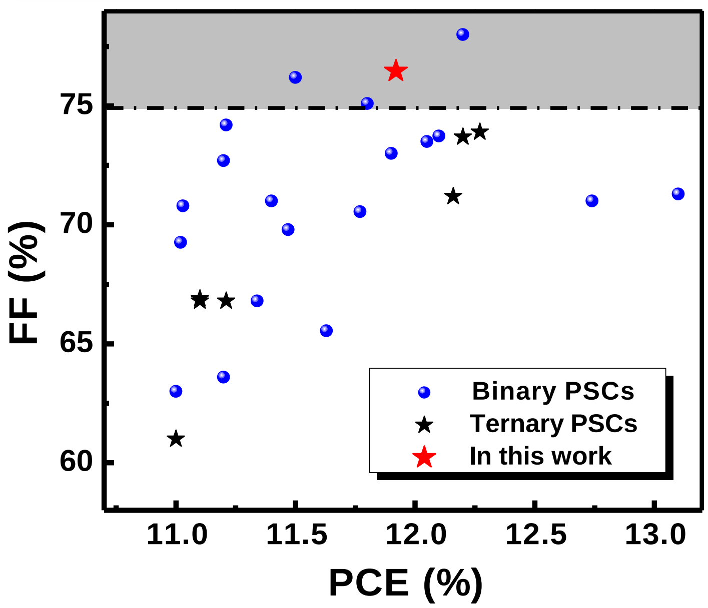
发表文章：

Xiaoling Ma, Wei Gao, Jiangsheng Yu, Qiaoshi An, Miao Zhang, Zhenghao Hu, Jianxiao Wang, Weihua Tang,* Chuluo Yang,* and Fujun Zhang*. Efficient ternary non-fullerene polymer solar cells with PCE of 11.92% and FF of 76.5%. Energy & Environmental Science, 11, 2018, 2134.

高填充因子三元非富勒烯聚合物太阳能电池的研制

近年来，由于非富勒烯受体材料的快速发展，基于双受体体系的三元 PSCs 被广泛研究。我们成功制备了活性层为 PBDB-T:ITCPTC:IDT6CN-M 的三元非富勒烯 PSCs。基于 PBDB-T:ITCPTC 的二元器件展现了较高的 J_{SC} (17.44 mA/cm2), 基于 PBDB-T:IDT6CN-M 的二元器件展现了较高的 FF（75.3%）和 V_{OC} (0.915 V)， 两个二元器件展现了明显互补的光伏参数。三元器件很好地结合了对应两个二元器件的优势，最优三元器件实现 76.5%的 FF 和 11.92%的 PCE，76.5%的 FF 处于三元非富勒烯 PSCs 最高值之中。相比于 PCE 为 11.02%（IDT6CN-M）和 10.51%（ITCPTC）的二元器件，三元器件性能分别提高了 8% 和 13%。器件性能的提高主要归因于三元活性层中增强的光子俘获、提高的激子利用和载流子传输。通过该工作我们提出除了互补的吸收光谱，二元器件互补的光伏参数也是制备高效率三元 PSCs 的一个重要参考标准。相关工作发表于 Energy & Environmental Science, 11, 2018, 841-849。





该工作自2018年2月出版以来，受到了国内外同行的广泛关注。目前该工作被引52次（Web of Science），被ESI高被引收录（Highly Cited Paper）并且为热点论文（Hot Paper）。

http://apps.webofknowledge.com/full_record.do?product=UA&search_mode=GeneralSearch&qid=1&SID=7ACRKyeWKphMwTDtuhm&page=1&doc=1

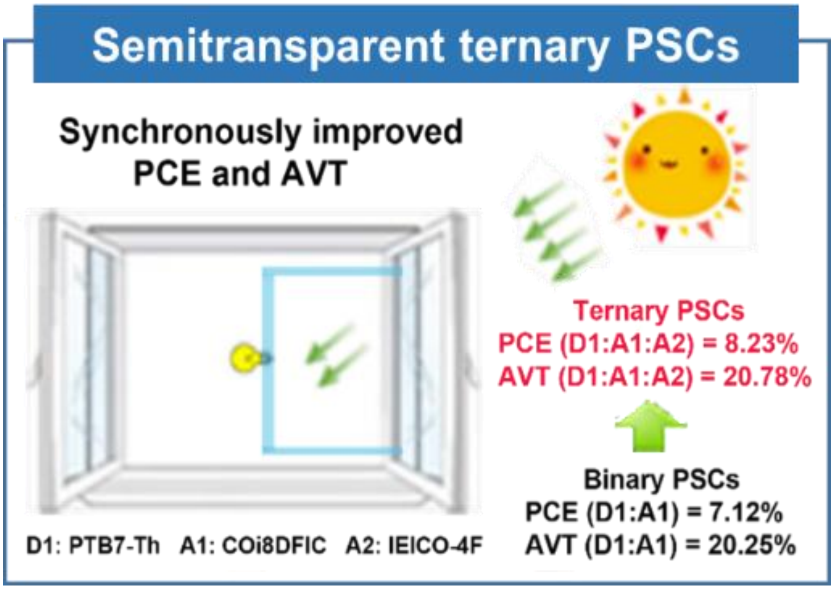
在北京同步辐射装置（BSRF）1W1A-漫散射实验站，通过掠入射 X 射线衍射（GIXD）测量，我们研究了不同 ITCPTC 含量对混合薄膜内分子排布方式的影响。随着受体中 ITCPTC 含量的增多，混合薄膜的衍射峰位置没有发生改变，表明两个受体应该很好地混合到给体形成的网格中。当受体中 ITCPTC 的含量为 60 wt%时，三元混合薄膜在面外方向的（100）衍射峰最弱，同时面内方向的(100)衍射峰最强。实验结果表明在优化的三元混合薄膜中，face-on 的分子排布方式增加，这有利于载流子沿着垂直于基底的方向传输。

发表文章：

Miao Zhang, Wei Gao, Fujun Zhang*, Yang Mi, Wenbin Wang, Qiaoshi An, Jian Wang, Xiaoling Ma, Jianli Miao, Zhenghao Hu, Xinfeng Liu, Jian Zhang and Chuluo Yang*, Efficient ternary non-fullerene polymer solar cells with PCE of 11.92% and FF of 76.5%. Energy & Environmental Science, 2018,11, 841-849.

基于两个超窄带隙非富勒烯受体的半透明聚合物太阳能电池

半透明太阳能电池（PSCs）由于其在建筑光伏等领域的潜在应用而受到广泛关注。功率转换效率(PCE)和平均可见透过率(AVT)是半透明 PSCs 的两个主要参数。PCE 与 AVT 之间通常存在竞争关系，如何同时提高半透明 PSCs 的 PCE 和 AVT 是一个很大的挑战。本工作以窄或超窄带隙材料为活性层，制备了半透明三元 PSCs。半透明三元 PSCs 的 PCE 和 AVT 可以同时得到改善，这在其他文献中从未报道过。我们首先以 100 nm 银为电极，在不透明 PSCs 中优化了第三组分 IEICO-4F 的含量。通过在受体中加入 15% wt% IEICO-4F，不透明 PSCs 的 PCE 提高到 11.94%，其短路电流，开路电压和填充因子均得到优化。一个有趣的现象还被观察到：三元混合薄膜的吸收边和比两种二元混合薄膜的吸收边相比明显地红移。近红外区域光子捕获的增强将有助于性能的提高，特别是对于没有 AVT 损失的半透明 PSCs。在不透明 PSCs 的最佳实验条件基础上，我们以 15 nm 银为电极，制备了导电率和透射率相对平衡的半透明 PSCs。与基于 PTB7-Th: COi8DFIC 的半透明二元 PSCs 相比，半透明三元的 PCE 和 AVT 同时提高到 8.23%和 20.78%。



该工作自 2018 年 10 月出版至今被引 10 次（谷歌学术）。https://cc.glgoo.top/scholar?q=Simultaneously+improved+efficiency+and+average+visible+transmittance+of+semitransparent+polymer+solar+cells+with+two+ultra-narrow+bandgap+nonfullerene+acceptors%E2%80%A0

在北京同步辐射装置（BSRF）1W1A-漫散射实验站，通过掠入射 X 射线衍射（GIXD）测量，我们研究了不同 IEICO-4F 的含量对混合薄膜内分子排布方式的影响。随着受体中 IEICO-4F 含量的增多，混合薄膜面内方向的（100）衍射峰强度先增大后减小。增加和减少的

（100）衍射峰强度表明，适量的 IEICO-4F 可以调节 PTB7-Th 分子排列，这很好地解释了相应有源层中迁移率的变化。同时，混合薄膜面外方向的（010）衍射峰略向高衍射矢量（q）值偏移，这表明更紧密的 π - π 堆积。更加有序的 face-on 取向和更加紧密的 π - π 堆积有利于电荷沿着垂直基底方向传输，这可以很好地解释优化后的三元 PSCs 的电荷迁移率增强和相对较大的 FF。

发表文章：

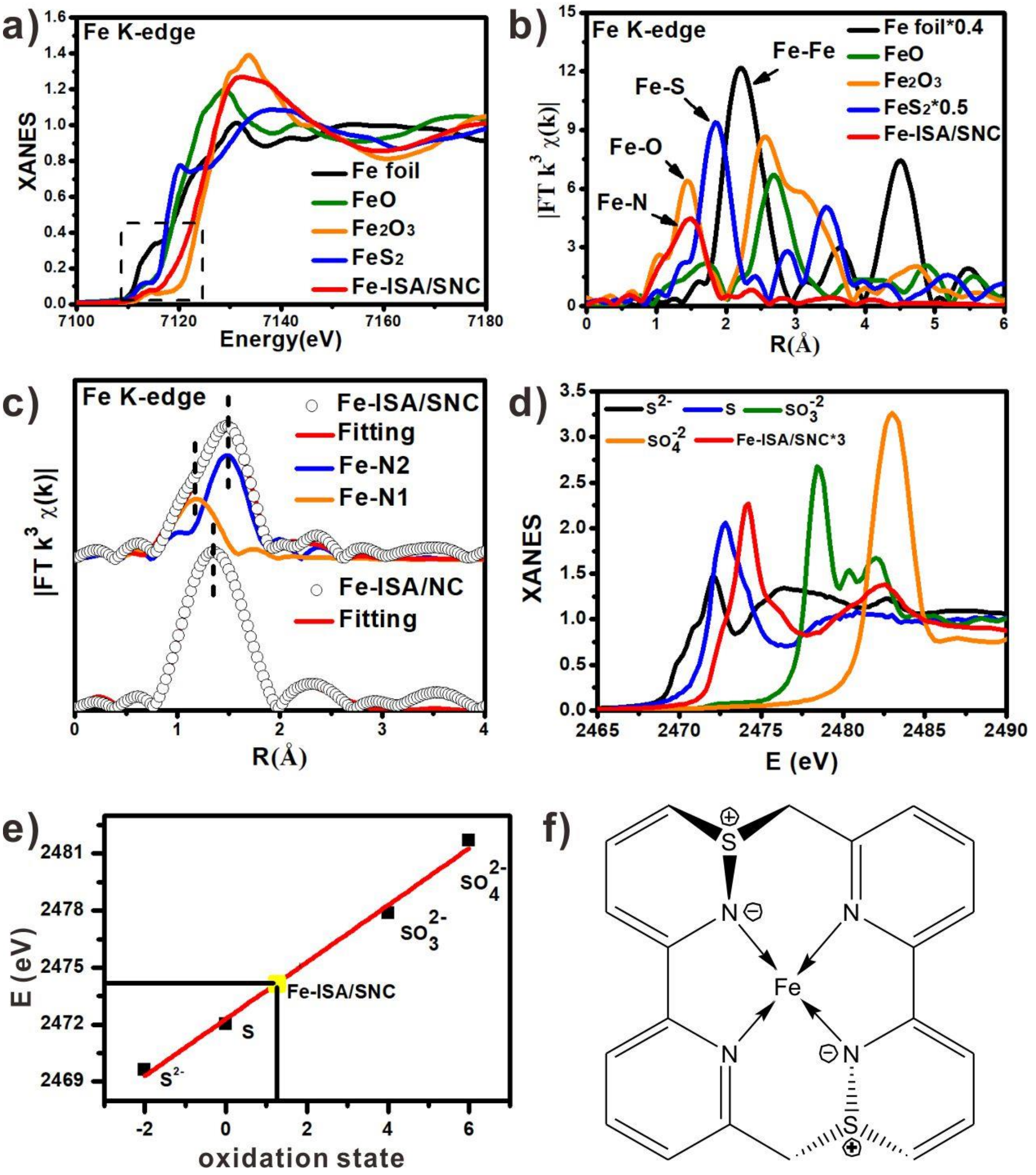
Xiaoling Ma, Zuo Xiao, Qiaoshi An, Miao Zhang, Zhenghao Hu, Jianxiao Wang, Liming Ding * and Fujun Zhang*, Simultaneously improved efficiency and average visible transmittance of semitransparent polymer solar cells with two ultra-narrow bandgap nonfullerene acceptors. J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 21485.

新型单原子分散铁基催化剂的合成

下一代能量转换和存储装置的发展，如燃料电池和金属空气电池，严重依赖于电催化剂的氧还原反应(ORR)。铁/氮掺杂碳(Fe/NC)催化剂近年来已成为有希望替代贵金属的有希望的新一代催化材料。对铁基催化剂结构参数的精确控制，以及对 ORR 机制的透彻理解，有望进一步优化其催化效率。单原子材料具有原子利用率高、活性位点均一可控等特点，因此，构筑结构可控的、单原子分散的以均匀分布的单原子点为基础设计 Fe -基电催化剂是提高催化效率和理解催化机理的一种理想策略。相关工作发表在 ***Advanced Materials*** 上。

利用热解吡咯-噻吩共聚物的策略，实现了在氮和硫共掺杂的碳载体上，单原子分散的铁基催化剂的合成。该合成策略主要由以下三步组成：首先是合成吡咯和噻吩的共聚物(PPy-*co*-PTh)，然后将其浸入乙酰丙酮铁盐溶液搅拌过夜，以吸收 Fe 前驱体。样品离心烘干后，最终将其置于 900℃的 Ar 气氛中热解，负载乙酰丙酮铁的聚合物被高温碳化，转化为负载 Fe 单原子的氮和硫共掺杂的多孔碳催化剂 (Fe-ISA/SNC)。通过高分辨电镜和球差矫正电镜的表征显示，材料表面 Fe、N、S 等元素均匀分布，且 Fe 以单原子形式分布在材料表面。

通过北京同步辐射装置（BSRF）获得的 XAFS 数据进一步分析了 Fe-ISA/SNC 中 Fe 原子的局域结构参数。拟合曲线表明，Fe 原子在 Fe-ISA/SNC 中由 4 个 N 原子配位，但 4 个 Fe-N 键劈裂为两组 Fe-N 键长。同时，通过对 S K-edge XANES 谱可以分析样品中 S 的价态，并进一步猜测得到 S 与比起电负性更高的原子配位成键导致正价的出现。于此相反的是，没有硫掺杂的样品仅显示一组 Fe-N 键长，这可能是硫原子的掺杂影响了配位的 Fe 和 N 原子，导致 Fe-N 键长的偏差。随后通过 DFT 计算的结果，该设想得到了进一步的证实和优化，并最终提出了 FeN_4S_2 活性中心结构的猜想。



该催化剂在 0.1M KOH 溶液中展现出良好的电化学氧还原活性和选择性。通过对比实验，我们发现，N, S 共掺杂样品比纯 N 掺杂样品具有更高的半波电位，这意味着硫的掺杂有助于提高催化剂的活性。同时，催化剂也展现出了良好的稳定性和氧还原反应的选择性。该研究为制备原子级分散非贵金属电化学氧还原催化剂提供了新的思路。

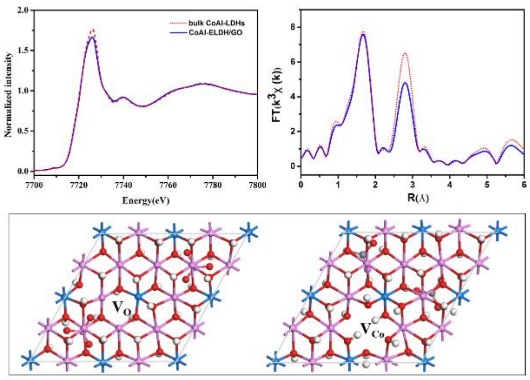
发表文章：

Q. H. Li, Dr. W. X. Chen, Prof. H. Xiao, Dr. Z. Li, W.-C. Cheong, R. A. Shen, N. H. Fu, Prof. C. Chen, Prof. D. S. Wang, Fe Isolated Single Atoms on S, N Codoped Carbon by Copolymer Pyrolysis Strategy for Highly Efficient Oxygen Reduction Reaction, Adv. Mater., 2018, 1800588.

缺陷结构增强 LDHs 层状催化材料在醇氧化反应中的本征活性

醇催化氧化反应是精细化工的关键技术之一，其产物醛或酮用途广、附加值高、需求量大，在国民经济可持续发展中占据非常重要的地位。钴基层状双金属氢氧化物（LDHs）材料因其层板内活性组分均匀分散和表面具有丰富的羟基阵列的优点，是一种在醇氧化反应中具有潜在应用价值的催化材料。然而，由于 LDHs 层间距的限制，与最外侧层板相比，位于其他层板中的活性金属的可接近性较低，因此如何提高 LDHs 结构中具有催化活性的金属组分在反应过程中的可接近性，从而大幅度提高催化剂的催化性能是亟待解决的关键问题。北京化工大学化工资源有效利用重点实验室的李殿卿、冯俊婷课题组提出采用层板剥离组装法得到纳米尺度分散的超薄 LDHs 纳米片，提高活性中心的暴露程度，同时利用剥层过程中产生的缺陷位点实现醇类选择性氧化性能强化，相关的研究成果发表在 2018 年 3 月 7 日的《ACS Catalysis》上。

该课题组采用剥层组装法获得了超薄 CoAl-ELDH/氧化石墨（GO）复合催化材料，通过 XAFS、PAS、HRTEM、AFM 等多种表征发现剥层过程中产生的 LDHs 晶格畸变引起 Co-Co 和 Co-O 配位数降低，诱导形成大量钴缺陷和氧空位。在苯甲醇氧化探针反应中，该催化剂的 TOF 较普通块体 CoAl-LDHs 提高了 4 倍。通过实验和理论计算结果，从分子尺度上揭示了钴和氧缺陷提高催化剂本征活性的作用机制。由于与钴缺陷相邻的 Co-OHδ−位点及氧缺陷位点具有与苯甲醇分子轨道相匹配的独特电子环境，使其成为吸附和活化醇底物的优势位点；而催化剂表面的氧缺陷与具有较强的给电子能力的晶格 O2-物种一同促进了 O2 分子的吸附和解离，进一步提高了催化活性。



利用北京同步辐射装置（BSRF）获得的块体 CoAl-LDHs 和超薄 CoAl-ELDH/GO 复合催化材料的 XAFS 谱图，及 CoAl-ELDH/GO 材料内的缺陷结构示意图。EXAFS 结果表明，CoAl-ELDH/GO 催化剂中的 Co-O 和 Co-Co 配位数（5.5 和 2.8）明显低于块体 CoAl-LDHs 中的相应值（6.0 和 3.8），表明形成氧空位和钴空位。

该研究通过提高活性位点可接近性和构筑缺陷结构为提高层状材料的本征活性提供了有效的策略，并从分子尺度揭示了缺陷结构在醇氧化反应中的构效关系。在这项工作中，同步辐射光源为团队揭示剥层前后材料的精细结构提供了必不可少的帮助。

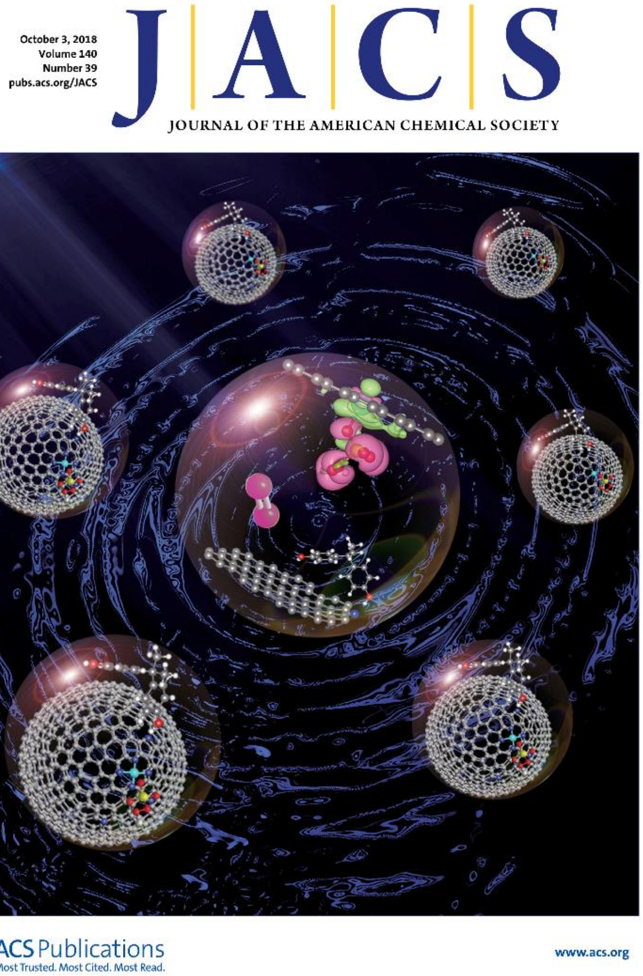
（https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acscatal.7b03655）

发表文章：

Qian Wang, Lifang Chen, Shaoliang Guan, Xin Zhang, Bin Wang, Xingzhong Cao, Zhi Yu, Yufei He, David G. Evans, Junting Feng*, Dianqing Li*, Ultrathin and Vacancy-rich CoAl-Layered Double Hydroxide/Graphite Oxide Catalysts: Promotional Effect of Cobalt Vacancies and Oxygen Vacancies in Alcohol Oxidation. *ACS Catal.*2018, 8, 43104-3115

氮掺杂石墨烯锚定单原子-双位点催化剂应用于类芬顿反应

中国科学院大连化学物理研究所黄延强研究员、张涛院士团队与新加坡南洋理工大学刘彬教授合作，首次将氮掺杂石墨烯锚定的Co单原子催化剂应用于类芬顿反应中并取得了重要进展。相关研究结果以全文的形式发表在《美国化学会志》上（J. Am. Chem. Soc., 2018, DOI: 10.1021/jacs.8b05992），并被邀请作为JACS当期封面文章。



近年来，以催化过硫酸盐（PMS）产生自由基实现有机污染物分子高效降解的类芬顿反应受到广泛的关注，设计高效的催化剂以提高 PMS 活化效率和实现有机物分子的高效降解是 PMS 类芬顿反应研究的重点。然而，作为自由基主导的反应，自由基的半衰期通常极短，因此，缩短自由基从 PMS 催化位点到有机物分子吸附位点的迁移距离是高效类芬顿反应催化剂开发的关键。

为此，该团队开发了一类氮掺杂石墨烯锚定的 Co 单原子类芬顿反应催化剂应用于催化活化 PMS 降解有机污染物分子双酚 A（BPA）。利用同步辐射光源、X 射线光电子能谱等多种表征手段并结合 DFT 理论计算证明：催化剂中的吡咯 N 为有机物分子的吸附位点，单原子

CoN_4位点为PMS的催化位点，单线态氧为整个反应的主要活性中间物种。并由此首次提出了单原子-双位点的类芬顿反应催化机理：单原子 CoN_4 位点催化 PMS 产生的单线态氧自由基，快速迁移到吸附 BPA 分子的吡咯 N 位点，实现有机物分子的高效降解。该类氮掺杂石墨烯锚定的 Co 单原子催化剂在催化 PMS 的类芬顿反应中表现出远高于已报道催化剂的优异性能（$TOF = 12.52\ min^{-1}$）。

在该研究工作中，北京同步辐射装置为揭示催化剂中 N 配位的单原子 Co 位点的结构和配位环境提供了直接证据，相关研究成果拓展了单原子催化剂在类芬顿反应领域的应用，与此同时，双位点催化机理的提出为单原子催化剂的设计提供了新思路。

发表文章：

Xuning Li, Xiang Huang, Shibo Xi, Shu Miao, Jie Ding, Weizheng Cai, Song Liu, Xiaoli Yang, Hongbin Yang, Jiajian Gao, Junhu Wang, Yanqiang Huang,* Tao Zhang, and Bin Liu*. Single cobalt atoms anchored on porous N-doped graphene with dual reaction sites for efficient Fenton-like catalysis, J. Am. Chem. Soc. 140 (2018) 12469.

金属缺陷调控：$Co_{3-x}O_4$ 的设计、合成及 OER 应用

在半导体催化材料中引入缺陷是一种调节电子状态的有效手段，不仅可以提高材料导电性，而且能为催化反应提供更多更优质的活性位点。目前电催化材料缺陷的研究集中于氧空位的制造和应用，然而氧空位结构在高压氧化状态下存在稳定性差的问题，因此在电解水产氧反应（OER）中表现出了一定的劣势。因此，我们针对性的构建了原位制备钴缺陷 $Co_{3-x}O_4$ 的方法，该缺陷材料在电催化 OER 反应中表现出了优异的活性、选择性和稳定性。这一成果于 2018 年 3 月 27 号发表在《ACS Catalysis》上，截至 2019 年四月底被引用 33 次。

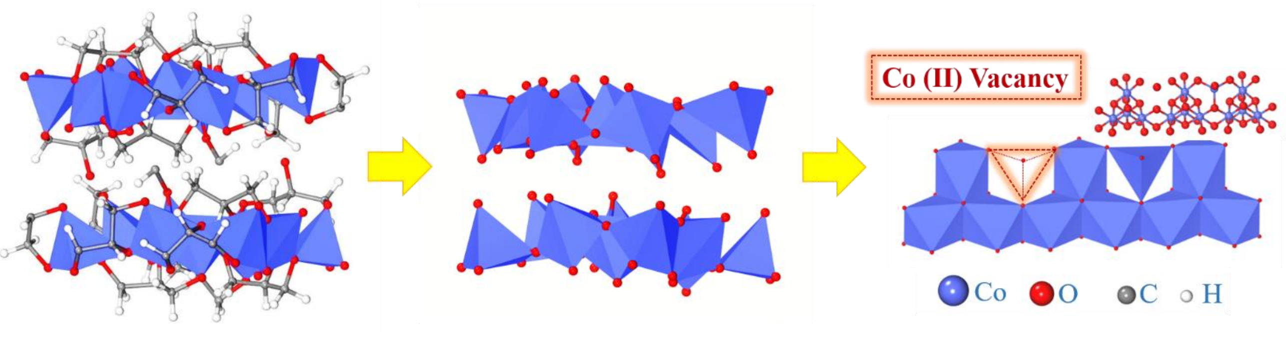


图 1 Co 缺陷 $Co_{3-x}O_4$ 生成过程示意图

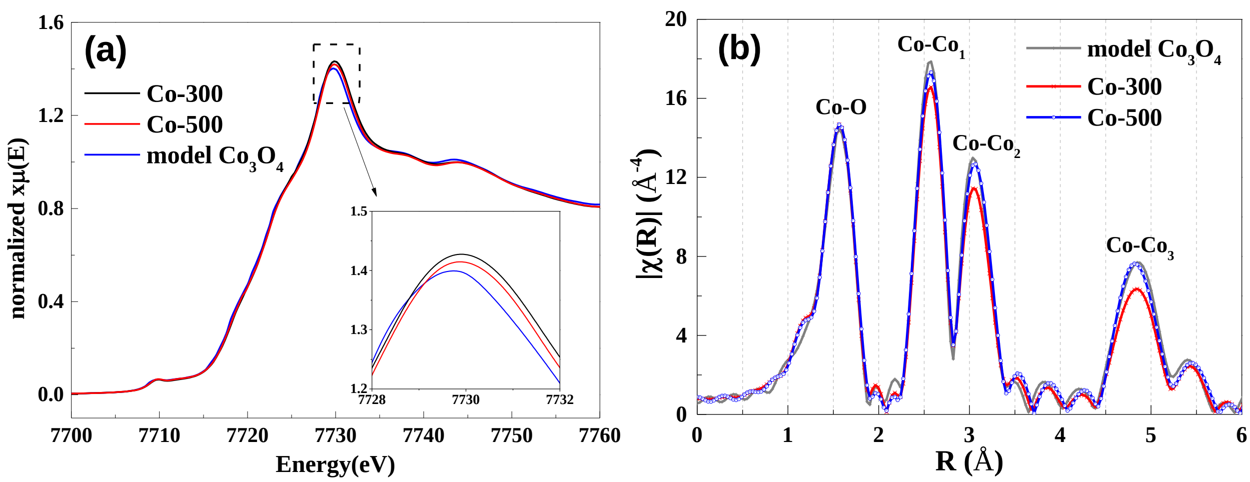


图 2 不同缺陷含量样品的 XANES 与 EXAFS

同步辐射 X 射线吸收测试在对于证明金属缺陷的存在起到了很重要的作用：利用北京同步辐射装置（BSRF）检测了不同温度焙烧样品的 Co 原子 k 边吸收谱。通过对 XANES 的白线峰的对比，发现焙烧温度越低，金属原子的价态越高，说明可能含有更多金属缺陷（图 2a）。进一步借助 X 射线吸收精细结构表征（EXAFS），发现 O 原子个数基本不变，Co 原子个数减少，从而证明了 Co 缺陷的存在（图 2b）。此外，金属缺陷的证明还结合了其它一些表征：元素分析方法（XPS 和 EDS）证明焙烧样品组成为非化学计量比，Co/O<0.75。正电子湮灭

（PALS）测试结果说明，对于 Co-300 来说，大多数缺陷是点空穴；而焙烧温度的提高不仅减少缺陷含量，且大大增加团簇空穴比例，这跟高能量下原子重排和晶界弛豫有关。

密度泛函理论（DFT）计算表明，金属缺陷导致了明显的电子离域现象，加快了电子传输。并且该电子离域状态促进了反应水分子的吸附、活化和分解。在 1M KOH 电解质中，电流密度达到 10 mA·cm^{-2} 时，钴缺陷 $Co_{3-x}O_4$ 的过电位为 268 mV，Tafel 斜率仅为 38.2 mV / dec，均优于标准贵金属催化剂（IrO_2，RuO_2）。本工作为高性能电化学催化剂的设计提供了新思路，并揭示了缺陷在电催化反应中所起的作用。

发表文章：

Rongrong Zhang, Yong-Chao Zhang, Lun Pan,* Guo-Qiang Shen, Nasir Mahmood, Yu-Hang Ma, Yang Shi, Wenyan Jia, Li Wang, Xiangwen Zhang, Wei Xu, Ji-Jun Zou*, Engineering cobalt defects in cobalt oxide for highly efficient electrocatalytic oxygen evolution,ACS Catalysis,8,5,3803-3811, 2018.

镍纳米颗粒原位热扩散为表面富集镍单原子催化剂用于二氧化碳电还原反应

理想的非均相电还原 CO_2 催化剂应在载体上含有高度分散的活性物质和足够的可接触表面以避免传质问题。因此，采用多孔载体不仅可以稳定反应位点，而且可以保证反应物的快速吸附和产物的解吸。最近，单原子催化剂由于其 CO_2 电还原性能和原子经济性而引起了人们的关注。然而，大多数单原子催化剂合成方法都是基于自下而上的策略，其中金属离子吸附在含有缺陷的基质上，然后在整个载体中还原形成单个原子。基于这种自下而上的方法，多孔载体不能将大多数原子金属物质限制在表面，因为其难以避免金属在载体基质内迁移，使得单金属位点是在整个基质内而不是在表面上均匀分布，并导致大量传质问题以及催化过程的失活。中国科学技术大学吴宇恩教授、李震宇教授(共同通讯作者)**等**人利用新型的自上而下策略将负载的镍金属纳米颗粒转变成热稳定的镍单原子，其大多数位于载体的表面上，并在 ***Angew. Chem. Int. Ed.***上发表了题为“**In Situ Thermal Atomization to Convert Supported Nickel Nanoparticles into Surface-Bound Nickel Single-Atom Catalysts**”的研究论文。

在具有丰富缺陷的氮掺杂碳的辅助下，上述合成工艺不仅可将纳米颗粒转化为单原子，而且还产生许多孔隙以促进溶解的CO_2和单一镍位点的接触。其可能的反应机理如下：镍纳米颗粒可以破坏表面C-C键钻入碳基质，在表面留下孔隙。当Ni纳米颗粒暴露于氮掺杂碳时，强配位作用将镍原子与镍金属颗粒分离。镍原子稳定在碳基底的表面内。镍纳米颗粒中原子镍物种的连续损失最终会导致镍纳米颗粒的原子化。CO_2电还原测试表明，富含镍单原子的表面比负载的镍纳米颗粒以及其他同类催化剂具有更优异的性能。

利用北京同步辐射装置（BSRF），X-射线吸收精细结构（XAFS）测量表征Ni原子周围的局部配位结构。如图所示的镍的K边近边吸收谱，样品Ni NPs@C的白线峰值几乎Ni foil的位置重合，表明在XC-72载体中，加热后变成了零价态Ni NPs。相比之下，SE-Ni SAs@PNC的位置在Ni foil上面，表明部分镍原子携带了正面荷。Ni原子的配位结构信息可以从X射线吸收的扩展边中获得（EXAFS）。在加热过程之前，Ni NPs@NC前驱体在2.15 Å处显示出主要的配位峰，可归属于Ni-Ni键的散射路径。之后，经过热处理后，位于2.15 Å处的Ni-Ni散射峰消失，同时，新的位于1.32 Å的主峰出现，可归于Ni-N的配位。这个结果强有力的支持热处理前后镍原子的周围配位环境发生全完改变。从Ni-Ni配位到Ni-N配位。当NC载体替换成XC-72时候，EXAFS显示出很强的金属配位峰为镍镍散射，不存在Ni-N散射，证明在无缺陷的碳上并不发生热扩散。进一步采用小波变换（WT）分析Ni K-edge EXAFS振荡。样品SE-Ni SAs@PNC等值面图中仅显示一个强度最大值在4.1 $Å^{-1}$处，可以归属为Ni-N配位。没有强度最大值对应于Ni-Ni键。相比之下，Ni NPs@NC和Ni NPs@C的最大值为6.7和6.8 $Å^{-1}$，可以都归属给Ni-Ni键。为了获得定量镍周围化学构型，基于定量EXAFS拟合进行提取结构参数，从而得到SE-Ni SAs@PNC样品中的Ni原子第一壳层配位数为4.3，平均键长为1.89 $Å^{-1}$，而Ni

NPs@NC显示出几乎满的配位数为12和2.48 Å^{-1}键长。因此，北京同步辐射装置对我们所制备的催化剂从原子层面上给出了确切的具有结构模型，为我们后面理解真实的催化活性位点提供强有力的帮助。

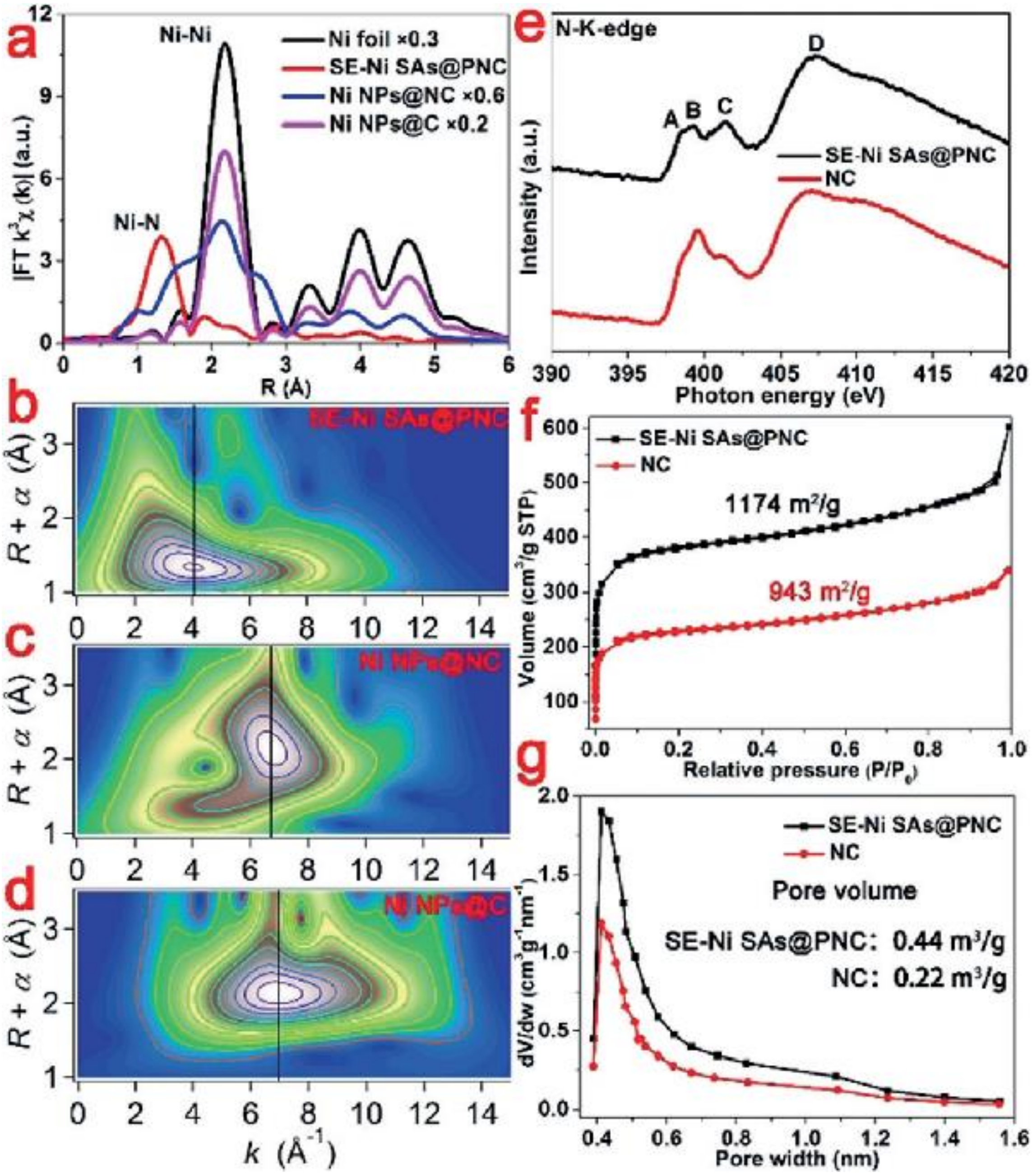


图1. a) 镍箔、SE-Ni SAs@PNC、Ni NPs@NC 和 Ni NPs@C 的 FT-EXAFS 光谱；b-d) SE-Ni SAs@PNC、Ni NPs@NC 和 Ni NPs@C 的 WT-EXAFS 光谱；e) NC 和 SE-Ni SAs@PNC 的 N K 边 NEXAFS 光谱；f) NC 和 SE-Ni SAs@PNC 的 N_2吸-脱附等温线；g) NC 和 SE-Ni SAs@PNC 相应的孔径分布曲线。

总之，研究人员通过热原子化诱导了 Ni 单原子在多孔氮掺杂碳表面的富集。与镍单原子分布于整个基底中的体系相比，多孔 NC 载体上的表面镍单原子更有利于电还原 CO_2 传质过

程，进而产生了更高的活性、选择性和稳定性。上述研究成果可为合成单原子富集表面提供新的机遇，进一步提高原子利用率。

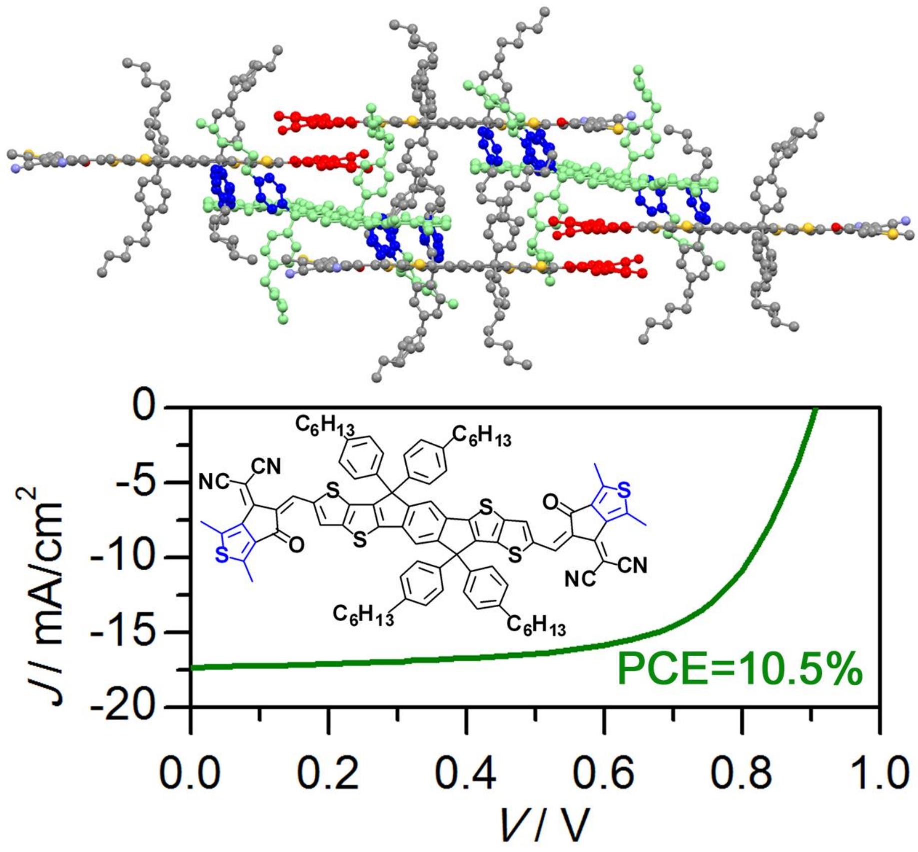
发表文章：

Jian Yang, Zongyang Qiu, Changming Zhao, Weichen Wei, Wenxing Chen, Zhijun Li, Yunteng Qu, Juncai Dong, Jun Luo, Zhenyu Li,* and Yuen Wu,* In Situ Thermal Atomization To Convert Supported Nickel Nanoparticles into Surface−Bound Nickel Single−Atom Catalysts. *Angewandte Chemie International Edition* 57, 43(2018), 14095-14100.

透视并杂环受体分子在给受体共混膜中的聚集结构

非富勒烯受体材料分子在有机光伏器件光活性层中的聚集结构决定了电池器件的光电转换性能。然而，受体分子在给受体共混膜中的聚集结构依然十分模糊，与聚集结构密切相关的掠角入射 X-射线衍射（GIXRD）谱峰的归属亦十分模糊。中国科学院化学研究所的一个研究组合成了一个新的受体分子，通过把这个分子的单晶数据和掠角入射 X-射线衍射（GIXRD）数据关联，不仅给出了这个分子在给受体共混膜中更清晰的聚集结构，也对 GIXRD 中的部分关键谱峰给出了更清晰的结构归属。相关的研究成果发表在 2018 年 9 月 21 日的《*Adv. Energy Mater.*》上。

该研究组发现，这个分子形成两种J-二聚体，并以这两种J-二聚体为重复结构单元，形成了三维互穿网状的π–π堆积结构，该结构有利于激子和电子在三维方向上的扩散与传输。利用北京同步辐射装置（BSRF）1W1A-漫散射实验站的技术，他们测试得到了这个分子在不同条件下形成的给受体共混博的GIXRD数据，通过将单晶数据和GIXRD数据关联，他们回答了，在给受体共混膜的GIXRD数据中，为什么受体材料会在面外方向上，给出一个宽的（010）衍射峰？为什么会在面内和面外方向上，各出现一个强的（100）衍射峰？为什么会在0.4-0.45nm处出现一个弱的衍射峰？他们亦指出，和面内方向上的（100）衍射峰相比，面外方向上的衍射峰更适合用来判断，在给受体共混膜中，受体分子在面外方向上的结晶性的强弱。



他们也详细研究了，热退火和溶剂添加剂（1,8-二碘辛烷，DIO）对给受体结晶性的影响，发现，和DIO相比，热退火可以更有效地增加受体材料相的结晶性，提升短路电流，而DIO的使用，则可以协助得到更为精细平整的薄膜形貌，提高填充因子，两者结合，给出更好的器件性能，最终得到了10.5%的光电转换效率。

发表文章：

Dong Yan[#], Wenxu Liu[#], Jiannian Yao and Chuanlang Zhan*, Fused-Ring Nonfullerene Acceptor Forming Interpenetrating *J*-Architecture for Fullerene-Free Polymer Solar Cells, *Adv. Energy Mater.*, 2018, 8 (31), 1800204.

镍单原子表面修饰分级 MoS_2 纳米片及其增强电催化析氢性能

在新型电催化材料中，二硫化钼(MoS_2)由于其分层结构和独特的电子结构而成为最富前景的备选材料之一。经理论计算和实验研究证明，MoS_2 的 HER 活性位点主要来自边缘位置的 S 原子。然而，高比例的电化学无活性 MoS_2 基面大大限制了其催化活性。此外，MoS_2 的低电子转移能力也会阻碍电子传输途径，从而产生缓慢的电催化动力学。因此，提高本征活性和增加反应电子的传递效率是提高 MoS_2 电催化效率的两种有效策略。

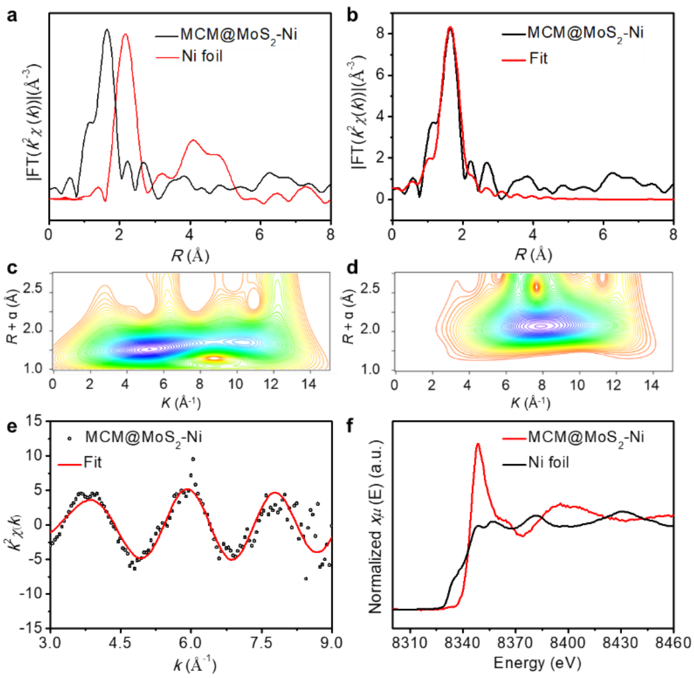


图 1. (a) MCM@MoS_2-Ni 和 Ni 箔的 Ni K 边 EXAFS 光谱；(b) MCM@ MoS_2-Ni 的 R 空间中的实验和拟合的 EXAFS 光谱能够很好的吻合; (c) MCM@ MoS_2-Ni 的 k^3 加权 EXAFS 信号小波变换；(d) Ni 箔的 k^3 加权 EXAFS 信号小波变换；(e) MCM@MoS_2-Ni 在 K 空间中的实验和拟合 EXAFS 光谱能够很好的吻合；(f) MCM@MoS_2-Ni 和 Ni 箔的实验 XANES 光谱。

近日，新加坡南洋理工大学楼雄文教授(通讯作者)与**北京同步辐射装置(BSRF)**合作将孤立的镍原子修饰生长在多通道碳纳米纤维支撑的分层 MoS_2 纳米片，充分证实了表面调控策略可有效地提高析氢活性。得益于独特的管状结构和基面调控，所得 MoS_2 催化剂具有出色的析氢活性和稳定性。上述单原子修饰策略为调节电催化分解水和其他能源相关过程的本征催化活性开辟了新的途径。

作者通过 EXAFS 和 XANES 光谱研究了 Ni 中心的配位环境。EXAFS 光谱表明 MCM@MoS_2-Ni 中无 Ni-Ni 键，因此排除了 Ni 粒子或簇的存在。之后通过小波变换(WT)模拟得到 K 空间中的径向距离分辨率。MCM@ MoS_2-Ni 中由 Ni-S 配位带来的 WT 强度最大值接

近 5.25 Å^{-1}，可在 1.0-3.0Å 处较好地分辨，而没有观察到与 Ni-Ni 连接相关的强度最大值≈7.96 Å^{-1}。上述结果进一步说明 MCM@MoS_2-Ni 中的 Ni 组分处于原子分散状态而没有聚集。然后通过最小二乘法 EXAFS 曲线拟合分析进一步量化原子分散中心的配位范围。最佳拟合结果清楚地证实 Ni-S 的键长为 2.19 Å，远短于 MoS_2 中的 Mo-S 键(2.37 Å)。如 XANES 光谱所示，MCM@MoS_2-Ni 中的 Ni L_3 边缘的强度远高于 Ni 箔的强度。这种现象表明，MCM@MoS_2-Ni 中的电子通过 Ni-S 键合而实现从 Ni 转移到 S，导致带正电荷的 Ni 中心的形成。DFT 计算表明，孤立的镍原子修饰可以形成新的电子态，以调节氢原子在配位硫原子上的吸附行为，进而实现对 S 原子的活化。所合成的 MCM@MoS_2-Ni 电催化剂具有较高的 HER 活性和稳定性。该工作提供了一种很好的策略和研究思路，并在原子水平上清晰地证明了异原子对 MoS_2 的活化机制。相关成果发表在 ***Adv. Funct. Mater.***, 2018, 28, 1807086)

发表文章：

Huabin Zhang, Le Yu, Tao Chen, Wei Zhou, and Xiong Wen (David) Lou*, Surface Modulation of Hierarchical MoS_2 Nanosheets by Ni Single Atoms for Enhanced Electrocatalytic Hydrogen Evolution, *Adv. Funct. Mater*. 2018, *28*, 1807086.

通过模块策略实现具有高效电催化氧还原活性的单原子催化剂的构筑

电催化氧还原反应(ORR)在燃料电池和其他可再生能源技术中扮演着非常重要的角色。然而，由于该反应涉及了多步电子传递路径，而表现出动力学延迟现象。目前，铂(Pt)催化剂以及 Pt 基合金催化剂被应用于 ORR 催化反应中。然而，其高成本和不可持续的供应阻碍了其在 ORR 中的广泛应用。因此开发非贵金属的 ORR 催化剂显得尤为重要。单原子催化剂(SAC)，通过将孤立的催化活性中心固定于基质材料中，而成为非均相催化领域的一个新前沿。作为连接均相催化和非均相催化之间的理想模型，SAC 的催化性能与其催化活性中心的构型和配位环境高度相关。而结构上的微小变化也会引起其催化反应活性的显著变化，因此建立具有原子级精确度的合成方法是至关重要的。单原子催化剂在过去几年里得到了快速发展，目前已经开发了几种用于构建 SAC 的合成策略，包括原子层沉积，共沉淀，湿浸渍和光沉积。与此同时，这一新兴领域仍面临重大挑战。一个主要难点是如何设计合成具有精确配位数和特定构型的反应中心，这对于理解催化过程和设计高效催化剂具有非常重要的意义.

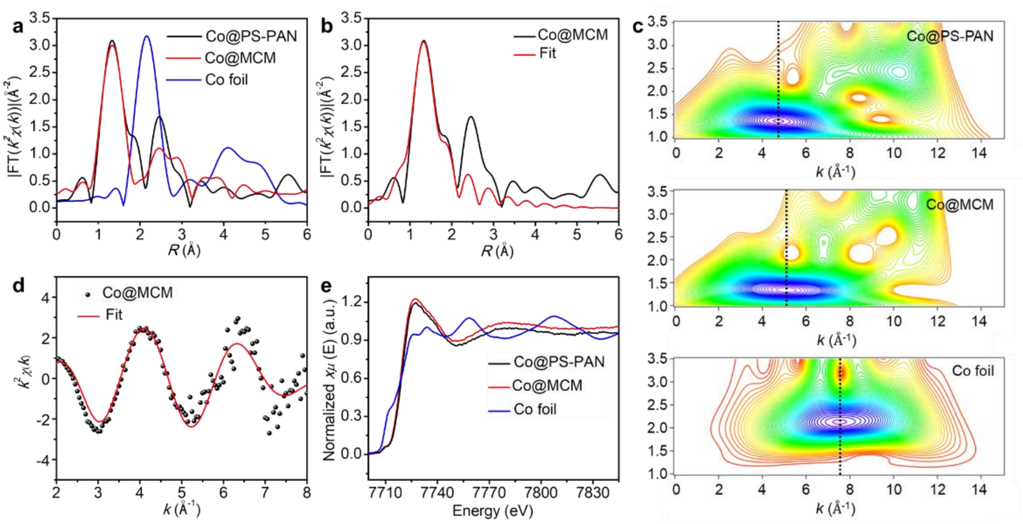


图 1. (a) Co@PS-PAN，Co@MCM 和 Co 箔的 Co K-边 EXAFS 谱图。(b)实验 EXAFS 光谱在 K 空间中的傅里叶变换以及 Co@MCM 的最佳拟合结果。(c) Co@PS-PAN，Co@MCM 和 Co 箔的小波分析衍射图谱。(d)R 空间中 EXAFS 谱的傅立叶变换以及 Co@MCM 的最佳拟合结果。(e)Co@PS-PAN，Co@MCM 和 Co 箔的 Co K-edge XANES 实验光谱。

新加坡南洋理工大学楼雄文教授(通讯作者)与**北京同步辐射装置(BSRF)合作**，通过模块化策略实现具有高效电催化氧还原活性的单原子催化剂的构筑。正如 X 射线吸收精细结构研究所证实的那样，预先设计的 CoN_4 几何构型在新开发的 Co@MCM 中得到很好的保持。CoN_4 结构基元的活性中心与具有高电导率和多孔性的多通道碳基质一起赋予催化剂优异的氧还原反应(ORR)活性。研究结果不仅为纳米结构催化剂在原子尺度上准确调控提供了思路，同时

也揭示了催化活性增强的结构起源。研究人员制定了一个简单可重复合成策略实现了将具有特定配位构型的单原子催化活性中心修饰于互连多通道碳基体中(Co@MCM)，其中 Co 位点具有不饱和配位和重新分布的电子云密度。 X 射线吸收精细结构研究清晰地表明：预先设计的 CoN_4 构型在新开发的催化剂中得以很好的保持。具有清晰构型的 CoN_4 中心允许我们使用应用密度泛函理论(DFT)来模拟催化过程并理解其中的构效关系。这种 Co@MCM 催化剂的优异的 ORR 活性可以归因于以下两个原因：(i)单原子 Co 与周围的非金属原子杂化实现电荷的再分配，从而提高了 O_2 的吸附和还原效率; (ii)碳基质的多孔性保证了催化剂的最大曝露和高效的反应动力学。

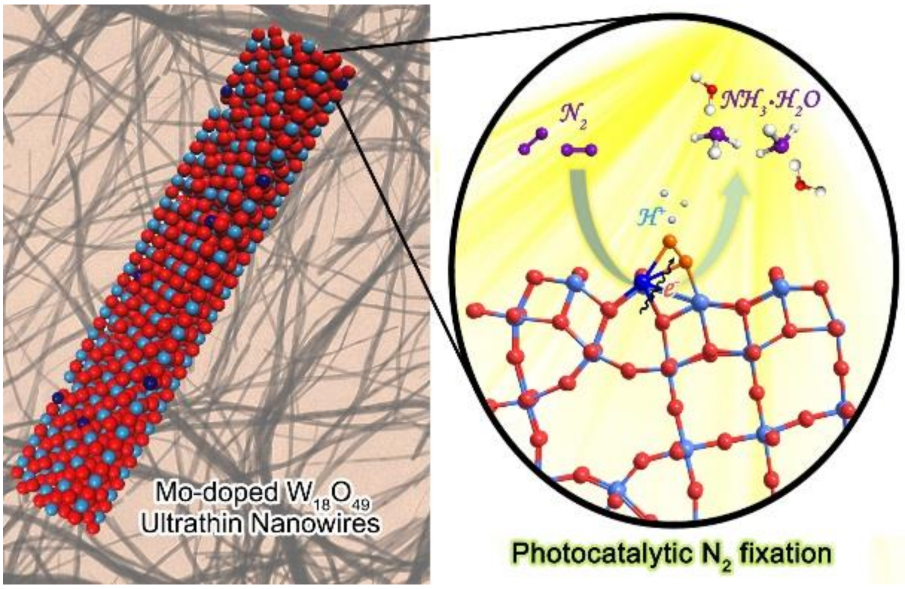
研究人员通过模块策略实现具有高效电催化氧还原活性的单原子催化剂的构筑。EXAFS 和 XANES 分析清晰地确定了 Co@MCM 中的单原子催化活性 Co 中心采用相同的 CoN_4 构型。DFT 计算证实单分散的 Co 位点可以大大加速对 O_2*组分的吸附与还原。实验结果表明得益于单分散的活性中心和多通道的碳基质，Co@MCM 表现出优异的电催化活性以及良好稳定性和甲醇耐受性。目前的工作为单原子催化剂定义了一种通用且高效的合成策略，从而可以将该合成策略推广至其他催化反应。相关成果发表在 *Energy Environ. Sci.*, **2018**, *11*, 1980-1984。

发表文章：

Huabin Zhang, Wei Zhou, Tao Chen, Bu Yuan Guan, Zhen Li, and Xiong Wen (David) Lou*, A modular strategy for decorating isolated cobalt atoms into multichannel carbon matrix for electrocatalytic oxygen reduction, *Energy Environ. Sci.*, 2018, *11*, 1980-1984.

基于钼掺杂精修缺陷态的 $W_{18}O_{49}$ 催化剂用于光驱动固氮合成氨

当前工业合成氨技术以使用铁基催化剂的哈柏法（Haber-Bosch）为主，其反应条件非常苛刻（250 大气压、400 摄氏度），同时需要巨大的能耗。光催化技术能够直接将太阳能转化为化学能，为降低合成氨能耗提供了一种非常具有前景的方法。然而，氮-氮叁键的超高键能使得氮分子体现出了稳定的化学特性，从而导致常规的光催化材料很难活化氮分子。因此，开发高效的固氮合成氨光催化剂依然是巨大的挑战。中国科学技术大学熊宇杰教授团队与武晓君教授理论课题组合作，基于金属氧化物光催化剂的缺陷工程调控，发现通过掺杂的方式来精修催化剂的缺陷态，可以促进缺陷位点对氮分子的高效活化，有效地提高光催化固氮合成氨的效率。该工作在线发表于国际化学重要期刊《美国化学会志》（J. Am. Chem. Soc. DOI: 10.1021/jacs.8b02076）。



基于钼掺杂精修缺陷态的 $W_{18}O_{49}$ 催化剂用于光驱动固氮合成氨示意图

从动力学上来看，鉴于氮分子超高的化学稳定性，氮分子活化一般被认为是氮还原的先决条件。对于光催化材料，表面缺陷位点可以作为氮分子化学吸附的活性位点，同时局域在缺陷处的电子可以转移进入吸附氮分子的反键 π 轨道，从而实现对氮-氮叁键的弱化作用。虽然目前已有相关文献成功报道了基于缺陷构筑的催化剂材料可用于光催化固氮合成氨反应，但是其活性仍有待进一步的提高。其瓶颈来自于多个方面：首先需要进一步调控催化位点对于氮分子的吸附作用，促进光生电子从催化剂向吸附氮分子的转移，以提高对氮分子的活化能力；其次需要抑制光生电子在缺陷处的能量驰豫过程，以减少电子传递过程中的能量损

耗。

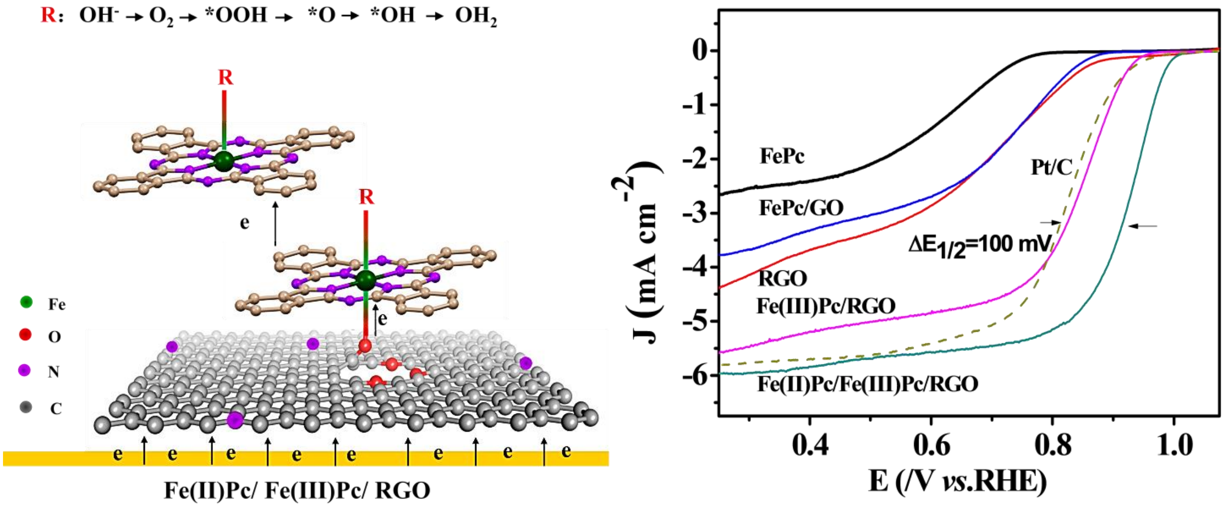
熊宇杰团队针对该系列挑战，将钼原子掺杂在 $W_{18}O_{49}$ 催化剂的缺陷位点处，实现了光催化体系中氮分子的高效活化。**利用在北京同步辐射装置（BSRF）开展的 X 射线吸收谱（XAS）得到催化剂的重要精细结构信息，其中 W 的 L 边 X 射线近边吸收光谱（XANES）表明 Mo 的掺杂使 W 原子的电子密度降低，同时扩展 X 射线吸收精细结构谱（EXAFS）表明 Mo 掺杂没有改变 W-O 键长却使 W/Mo-W 键长减小。这些精细结构变化信息可以推断出 Mo 取代 $W_{18}O_{49}$ 中 W 原子形成 Mo-W 键。O 的 K 边 XAS 表明 Mo 的掺杂使缺陷位点处金属-氧键的共价性增强，有利于电子从催化剂往吸附 N_2 的转移。**研究人员结合同步辐射技术表征、原位红外光谱检测和理论计算模拟，揭示了掺杂钼原子对缺陷状态的精修作用。一方面，钼掺杂提升了催化剂缺陷能级，减少了电子能量驰豫过程带来的能量损耗；另一方面，钼掺杂形成的钼-钨异质位点调控了吸附氮分子的电荷状态，增大了氮原子之间的电荷差，同时提高了金属-氧键的共价性，促进了光生电子转移过程。通过这些钼掺杂带来的不同效应之间的协同作用，有效地促进了催化位点对氮分子的活化，实现了催化剂光驱动固氮合成氨效率的大幅提升。该进展为开发高效的固氮光催化剂以及调控催化剂缺陷的状态提供了一种新的思路,并展示了催化位点电子结构的调控对催化反应的重要性。

发表文章：

Ning Zhang,† Abdul Jalil,† Daoxiong Wu,† Shuangming Chen, Yifei Liu, Chao Gao,* Wei Ye, Zeming Qi, Huanxin Ju, Chengming Wang, Xiaojun Wu,* Li Song, Junfa Zhu, and Yujie Xiong*, Refining Defect States in W18O49 by Mo Doping: A Strategy for Tuning N_2 Activation towards Solar-Driven Nitrogen Fixation. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 9434–9443.

碳基铁酞菁单原子催化剂的构筑及其 ORR 催化性能

众多研究证实：含有 Fe-N-C 基元的材料对氧还原反应(ORR)具有很好的潜在催化作用。随着碳材料，尤其是石墨烯的发展，使得含有 Fe-N-C 基元的单原子催化剂的制备成为可能。铁酞菁（FePc），作为本征含有 Fe-N-C 的小分子，在上世纪 60 年代已被证实对 ORR 具有催化作用。但因 FePc 易团聚、导电性低等性质一直限制着它的 ORR 催化活性。那么，如何基于碳材料构筑含有 FePc 的高效单原子催化剂？目前，各种碳基 FePc 复合材料，无论是通过化学方法还是物理方法合成，甚至通过粉末研磨，均能使其对 ORR 的催化性能得到显著提高。流行的解释是：FePc 与碳材料间存在比较强的非共价键作用。原因仅仅如此吗？



Fe(II)Pc/Fe(III)Pc/rGO 变价单分子异质结及 ORR 催化活性

中国科学院福建物质结构研究所康龙田课题组以氧化石墨烯（GO）作为基底，通过控制 FePc 的前驱体高氯酸铁酞菁与 GO 的比例，最终成功制备了 FePc 均匀分散的 FePc/rGO 复合材料。在对 ORR 催化过程中，相对于商业 Pt/C，该材料的起始电位（1.000 vs 0.973 V）与半波电位（$\triangle E_{1/2}$ =100 mV）更正。SEM、TEM、XRD、FRIR、XPS 等分析结果强烈暗示：FePc 与石墨烯之间存在化学键。

得益于北京同步辐射装置（BSRF），我们利用 1W1B-XAFS 实验站的技术比较了 Fe 箔、FePc、FePc/rGO 的 XANES 与 XAFS，直接证实了铁酞菁与 rGO 之间存在 Fe(III)-O-C 键。通过第一性原理计算，我们也从理论上证实了该化学键的形成对 ORR 催化性能的提高起了关键作用。我们进一步研究发现：Fe-O-C 键的形成使得我们首次获得了 Fe(II)Pc/Fe(III)Pc/rGO 这种对 ORR 具有高效协同催化作用的变价分子异质结，如上图所示。相关成果以“The synthesis and synergistic catalysis of iron phthalocyanine and its graphene-based axial complex for enhanced oxygen reduction”的题目发表于 2018 年发表在 **Nano Energy** 上。

相关连接：https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2018.02.026

在进一步的实验中，我们尝试以含氧的碳纳米管作为基底，在液相中分别采用化学法、物理法也成功制备了 FePc 均匀分散的碳基 FePc 复合纳米材料，即单原子 Fe 催化剂。通过全面的表征与分析我们证实：FePc 与碳材料之间的 Fe-O-C 键是容易形成、普遍存在且对 ORR 的催化起着关键作用。相关成果也于 2018 年陆续发表在《Journal of power Sources》与《Electrochimica Acta》上。

发表文章:

Jia Guo, Xiaomei Yan, Qin Liu, Qiang Li, Xiao Xu, **Longtian Kang***, Zhanmin Cao**, Guoliang Chai**, Jun Chen, Yaobing Wang and Jiannian Yao, The synthesis and synergistic catalysis of iron phthalocyanine and its graphene-based axial complex for enhanced oxygen reduction, *Nano Energy*, **2018**,46, 347-355.

纳米多孔镁的三维空间表征及其制氢性能研究

传统的制氢方法包括化石燃料制氢、水解制氢、生物制氢等。最近，一种新的制氢方法—即制即用法，受到了人们的关注。北京科技大学新金属材料国家重点实验室的宋西平教授课题组，制备出一种可以与盐水实现快速制氢反应的纳米多孔镁材料。

纳米多孔镁由金属镁骨架及孔隙所组成。如何表征其内部的结构及孔隙的空间分布是一个挑战。同步辐射的纳米成像技术可以有效的解决这个问题。

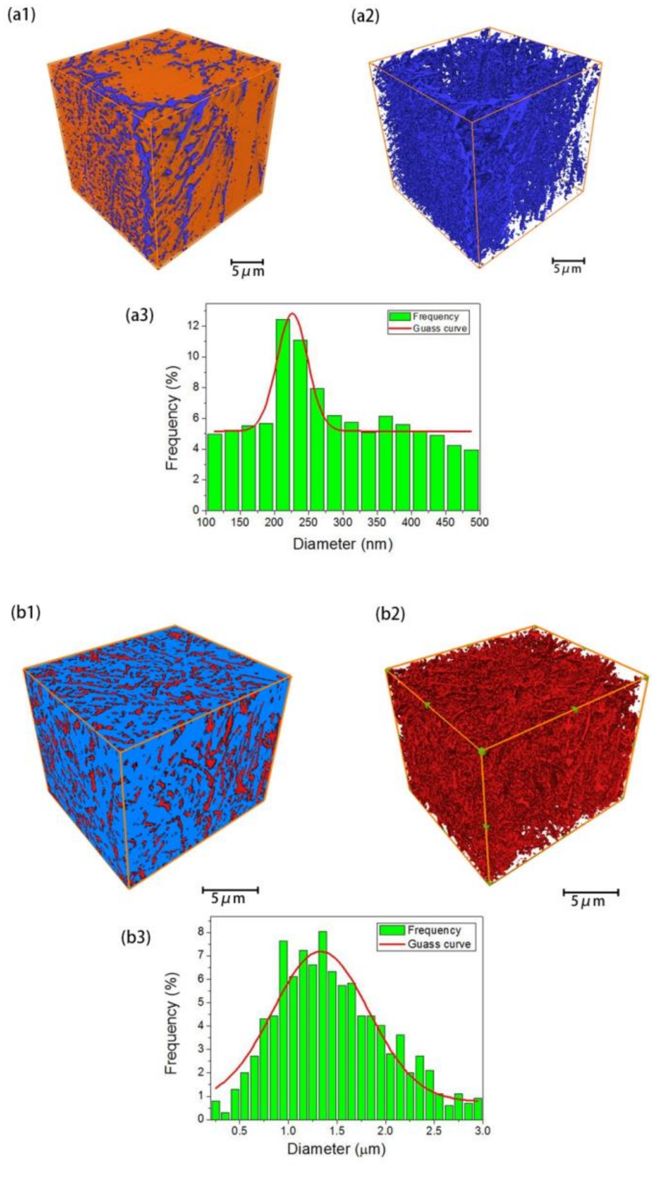


图 1 同步辐射纳米成像技术对纳米多孔镁的三维空间结构表征：（a1）块状纳米多孔镁的孔隙和实体的图像；（a2）块状纳米多孔镁的孔隙图像；（a3）块状纳米多孔镁的孔径统计分布。（b1）蜂窝状纳米多孔镁的孔隙和实体的图像；（b2）蜂窝状纳米多孔镁的孔隙图像；（b3）蜂窝状纳米多孔镁的孔径统计分布。

利用北京同步辐射装置（BSRF）4W1A-X 射线成像实验站的同步辐射纳米成像技术对纳米多孔镁的内部空间结构进行了表征。结果如图 1 所示，该种纳米多孔镁材料的内部具有大量的纳米孔隙，其纳米孔的直径约为 300nm，孔隙率可达 72%。

纳米多孔镁材料显示出独特的电化学特征，经测试其电极电位相比其他金属镁更负（如图 2 所示）。同时，该种纳米多孔镁相比其他镁材料具有更好的制氢性能，如图 3 所示，在 50℃时，其制氢速度可达 311ml/g/min，是目前制氢速度最快的材料之一。相关的研究成果发表在《Journal of Power Sources》期刊上。

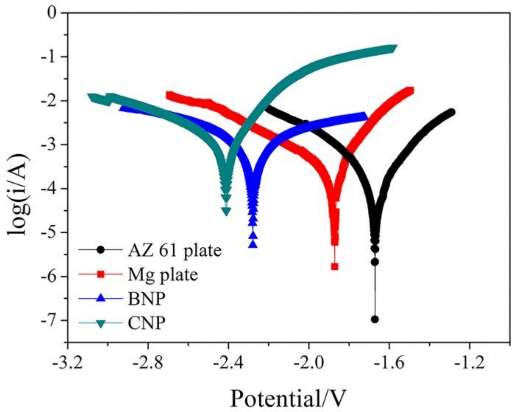


图 2 AZ61 plate, Mg plate, BNP Mg and CNP Mg 四种镁材料在 10 mass % NaCl 中的塔菲尔曲线

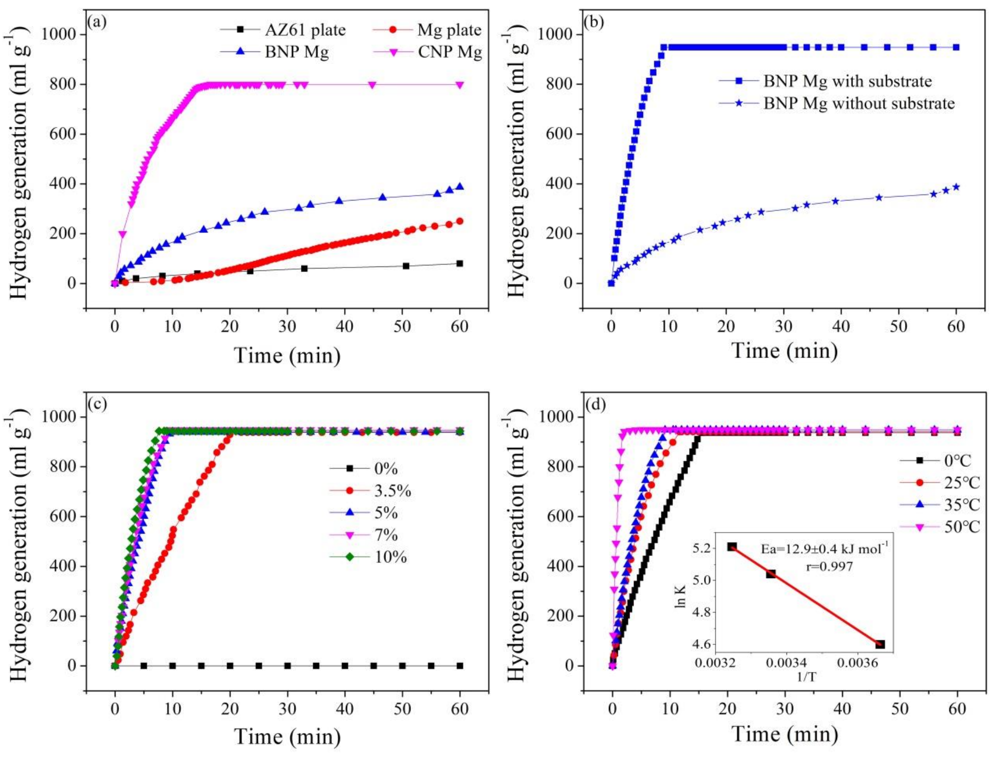


图 3 纳米多孔镁的制氢曲线：（a）AZ61 plate, Mg plate, BNP Mg 以及 CNP Mg 材料在 10 mass %

NaCl，25℃ 时的制氢曲线；（b）BNP Mg 与基体以及 BNP Mg 单独在 10 mass % NaCl，25℃ 时的制氢曲线；（c）BNP Mg 与基体在不同 NaCl 浓度时，在 25℃ 的制氢曲线；（d）BNP Mg 与基体在不同温度下的制氢曲线。

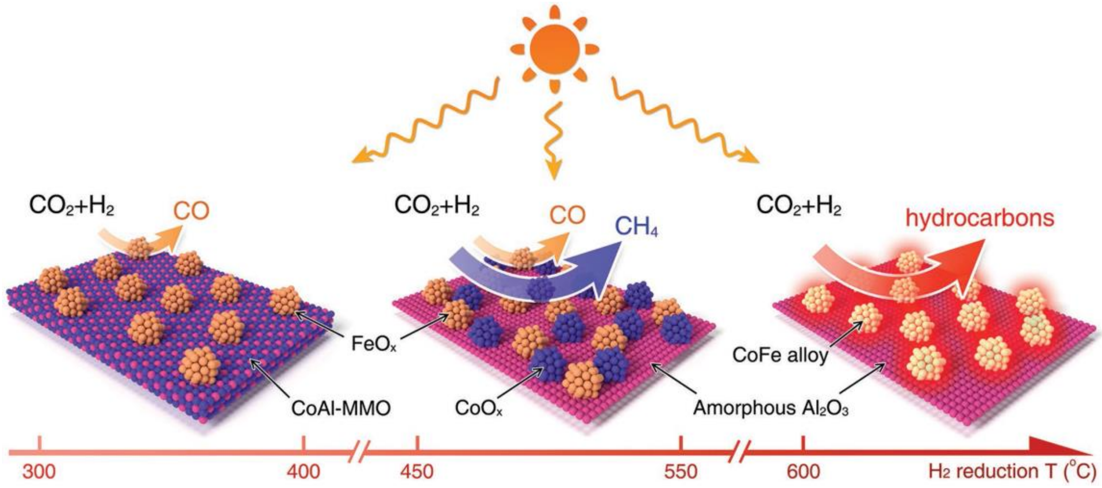
发表文章：

J. R. Liu, H. Wang, Q. X. Yuan, X. P. Song. A novel material of nanoporous magnesium for hydrogen generation with salt water. Journal of Power Sources, 2018, 395 : 8-15.

水滑石基钴铁合金光热催化 CO_2 加氢制备碳氢化合物

化石燃料燃烧产生的二氧化碳排放是全球变暖的主要原因，与此伴生的一系列环境问题正日益威胁着人类正常的生产生活。光驱动催化转化的方法可以将二氧化碳作为反应物转化为有用的燃料或化工品，不仅能在温和的条件下减缓全球变暖的步伐而且能缓解化石燃料的危机。而寻找一种高效的催化剂是该过程的核心和难点。中国科学院理化技术研究所超分子光化学中心的一个团队设计了一种通过水滑石材料转变得到的催化剂能在仅有光驱动的作用下，将二氧化碳高效地转化为多碳的碳氢化合物，相关的研究成果发表在 2018 年 1 月 18 日的 Advanced Materials 上。

该研究组通过在不同温度下氢气处理 CoFeAl 三元水滑石得到了一系列氧化铝负载的不同相态的钴铁催化剂。经过光驱动的 CO_2 加氢测试，发现在 650℃氢气处理下的催化剂可以将二氧化碳高效转化为多碳碳氢化合物，选择性达 35%，CO_2 转化率可达 78.6%。后续一系列的表征结果表明在 650℃氢气处理后的催化剂为无定形的氧化铝负载的钴铁合金，而在较低的温度下形成的含有钴铁氧化物的催化剂则将 CO_2 转化为 CH_4 或 CO。进一步地，DFT 理论计算证实了相比在钴铁氧化物上，钴铁合金更容易发生 C-C 的偶联，与实验结果相吻合。



利用北京同步辐射装置对上述系列不同相态的催化剂进行了进一步表征。通过 X 射线吸收近边分析，随着还原温度从 300℃升至 650℃，钴和铁均由阳离子态逐渐转变成为金属态，650℃下还原的样品出现了明显的 Co0 和 Fe0 的特征吸收。同样的，在 X 射线吸收拓展边分析中，在还原温度高于 600℃后形成了明显的 Co-Fe 键，象征着 CoFe 合金的形成。该结论与 X 射线粉末衍射结果相吻合，进一步坐实了催化剂的结构。

“近期，他们利用 CoFe 基的光热催化剂首次以光驱动的方式实现了 CO_2 加氢制备 C^{2+}碳氢化合物。”“该方法的成本相对其它工艺较低，使得金属合金颗粒可以被用作催化剂。光产生的热效应可以促进 CO_2 的还原反应。”加拿大多伦多大学 Geoffrey A. Ozin 教授和韩国西

江大学 Young Soo Kang 教授分别在发表于 2019 年 4 月 1 日的 Energy & Environmental Science 和 2019 年 4 月 15 日的 ACS Sustainable Chemistry & Engineering 给予本工作足够的认可。

这个研究首次在仅有光驱动的作用下将二氧化碳分子高效转化为多碳碳氢化合物，且反应条件温和，避免了传统催化中高温高压等严苛的反应条件。在该研究中，同步辐射光源给出了直观、有力的表征信息，帮助研究组确认了一系列催化剂的具体组成，为后续的分析鉴定基础。

发表文章：

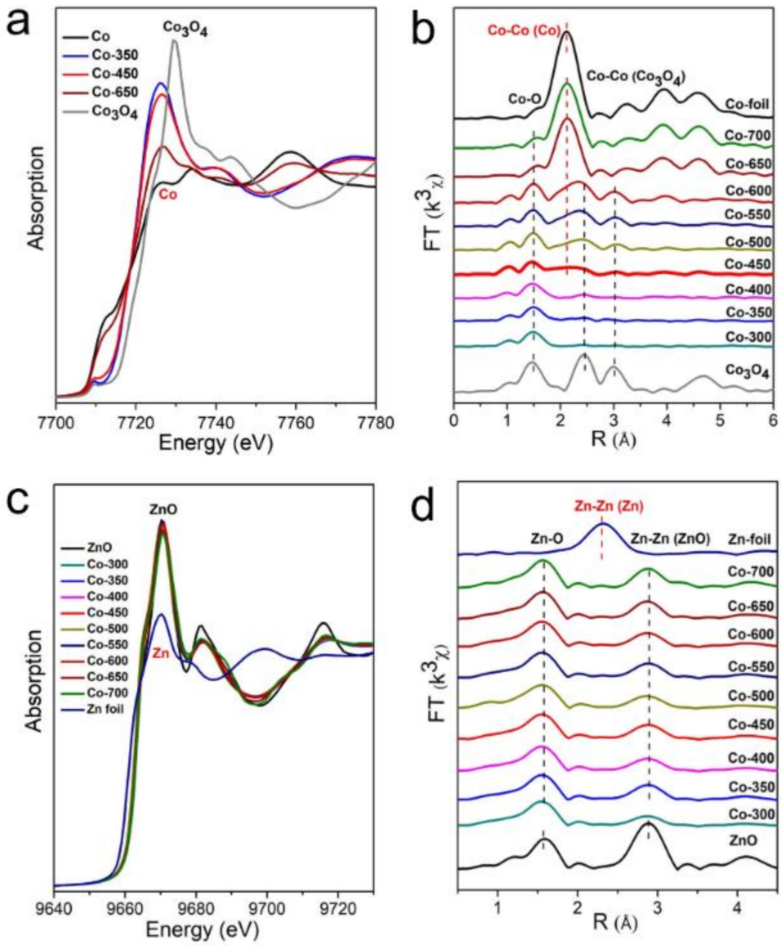
Guangbo Chen , Rui Gao, Yufei Zhao, Zhenhua Li, Geoffrey I. N. Waterhouse, Run Shi, Jiaqing Zhao, Mengtao Zhang, Lu Shang, Guiyang Sheng, Xiangping Zhang, Xiaodong Wen, Li-Zhu Wu, Chen-Ho Tung, and Tierui Zhang, Alumina-Supported CoFe alloy catalysts derived from layered-double-hydroxide nanosheets for efficient photothermal CO_2 hydrogenation to hydrocarbons. ***Advanced Materials***, 2018, *30*, 1704663.

钴－水滑石基催化剂用于光热费托反应制备低碳烯烃

低碳烯烃作为许多化学品的合成原料是当今化学工业的基本支柱。传统的制备低碳烯烃的方法是由大分子量的烃类裂解或由石油裂解得到。然而石油储量的逐渐下降迫使我们开发一种新型的制备低碳烯烃技术。与间接法合成烯烃相比，通过费托合成（FTS）将合成气直接转化为低碳烯烃被认为是最实用的方法。过去几十年来，Ni，Ru，Fe 和 Co 基催化剂已被广泛研究并用于工业中的 FTS。然而由于每种金属独特的电子结构，因此在 FTS 中每种金属催化剂所对应的产物选择性差别很大。通常情况下镍基催化剂更趋向于生成甲烷，钌基催化剂更有利于生成高碳烃。而铁基催化剂更容易生成低碳烯烃。然而，上述金属催化剂在高温条件下会烧结逐渐失活。然而 Co 基催化剂在 FTS 具有许多优点，例如在适中条件下具有较高选择性的高碳烃和较低选择性的氧化产物，优异的抗氧化和抗烧结性，以及良好的稳定性。此外，Co 作为储量较为丰富的元素，因此其可以作为工业 FTS 的理想催化剂。在过去的几年中，Co 基催化剂已经被用于制备低碳烯烃，但其性能并不是很好。研究者们，通过 C 掺杂的金属 Co（Co_2C）实现了高选择性低碳烯烃的制备。然而，用纯相的 Co 基催化剂来制备高选择性的低碳烯烃的报道很少。

与传统的热催化 FTS 相比，太阳能驱动的 FTS 具有显著的优势。近几年，报道了大量利用光热或等离子体激元效应来驱动一氧化碳和二氧化碳加氢的工作。这些工作激发我们思考是否可以利用太阳能驱动 FTS 来制备低碳烯烃。水滑石（Layered double hydroxides（LDH）），是一类二维层状阴离子型化合物，以其层间离子可调控，层板金属可调控，层厚度可调节等优点而广泛的应用与光、电催化领域。中国科学院理化技术研究所的张铁锐研究员通过 H_2 在 300-700ºC 条件下还原 ZnCoAl 水滑石纳米片，成功制备了一系列不同化学成分的新型 Co 基光热催化剂。

为了更好的研究在不同温度条件下还原后的催化剂的物相，利用北京同步辐射装置（BSRF）更加精确的分析了 Co-*x*(*x* 代表还原温度) 的结构。由同步辐射 X 射线吸收谱可得随着还原温度的逐渐升高金属钴的物相逐渐由氧化态向金属相转变。在 UV-vis 辐射下，在 450℃下制备的光热催化剂显示出显著的一氧化碳加氢性能，CO 转化率为 15.4%，低碳烯烃选择性为 36.0%，低碳烯烃/烷烃比为 6.1。活性催化剂由 ZnO–Al_2O_3 混合金属氧化物负载的 Co 和 Co_3O_4 纳米颗粒组成。本工作为制备低碳烯烃开辟了一条新的制备路径。同步辐射作为一种高端的表征手段将会在催化的领域起到较大的作用。



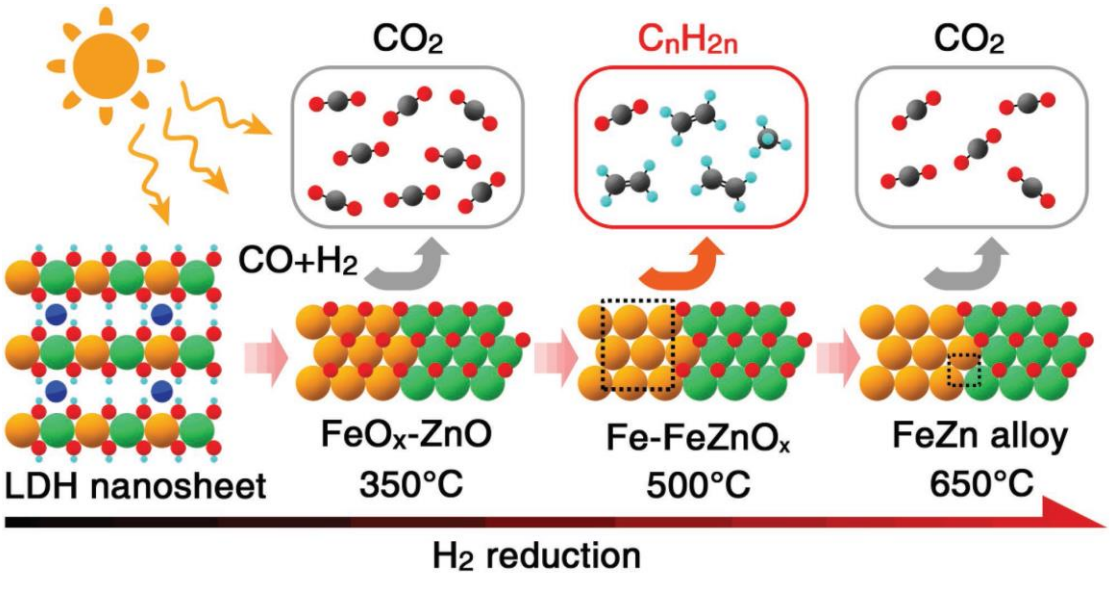
发表文章：

Zhenhua Li, Jinjia Liu, Yufei Zhao, Geoffrey I. N. Waterhouse, Guangbo Chen, Run Shi, Xin Zhang, Xingwu Liu, Yinmao Wei, Xiao-Dong Wen, Li-Zhu Wu, Chen-Ho Tung, and Tierui Zhang*, Co‐based catalysts derived from layered‐double‐hydroxide nanosheets for the photothermal production of light olefins. ***Advanced Materials***, 2018, 30, 1800527.

源于水滑石的铁基异质结构催化剂用于可见光催化 CO 加氢

低碳烯烃作为一种重要的现代化工原料，被广泛地应用在诸多领域，如聚合物的合成，药物的合成以及其他一些特殊化工品。而目前制备低碳烯烃的手段主要是依靠以合成气为原料的费托合成和以甲醇为原料的 MTO 反应，虽然上述两种反应可以通过优化催化剂的方法得到高选择性的目标产物，但通常都需要高温（400℃）高压（1-3Mpa）的严苛的反应条件，这无疑增加了反应的成本。因此，寻找一种能在温和条件下制备低碳烯烃的方法成为当下研究的热点。中国科学院理化技术研究所超分子光化学中心的一个团队通过氢气还原水滑石材料的方法得到了一种铁基的异质结构，该材料在可见光作用下有效地驱动了 CO 加氢制备低碳烯烃的反应，相关研究成果发表在 2018 年 9 月 6 日的 *Advanced Materials* 上。

该研究组通过在不同温度下氢气处理ZnFeAl三元水滑石得到了一系列铁基的异质结构光催化剂。最终发现在500℃下还原得到的催化剂展现出优异的CO加氢性能，产物中碳氢化合物的选择性高达89%，其中低碳烯烃的选择性达42%，二氧化碳的选择性低至11%。后续表征结果表明该温度下得到的催化剂为氧化铝和氧化锌负载的铁和氧化铁异质结构，存在着大量的Fe-FeO_x界面，而在低于该温度的催化剂中，催化剂以FeO_x为主，产物则主要为CO_2。进一步地理论计算结果显示，在Fe-FeO_x界面处，烯烃加氢更难而更容易发生脱附，造就了高烯烃选择性的产物分布。而通过对比该模型中基态和激发态的反应历程得知光催化相比热催化，更容易抑制CO2的产生且促进烯烃的产生，均与实验结果相互吻合。



利用北京同步辐射装置对上述系列不同还原温度下的催化剂进行了进一步的表征。通过X射线吸收近谱分析，当还原温度低于400℃时，铁的状态与一系列氧化铁的状态相同，这表明FeO_x为400℃处理温度以下的样品组成。而当还原温度大于等于400℃时，出现了明显的金属态铁的特征峰，意味着零价铁的出现，这表面在还原温度大于400℃后的样品由Fe和FeO_x组

成。同时，在X射线吸收拓展边分析中，当还原温度升至400℃后，出现了明显的Fe-Fe键，且随还原温度升高而加强，而伴随Fe-O键的减弱，这意味着还原温度提高，更多的Fe单质被还原出来。而锌元素的存在则一直以氧化锌的状态存在。该结果与X射线粉末衍射结果吻合，充分表明了催化剂的组成。

“该工作为光催化制备高附加值的化学燃料提供了一种绿色、可持续发展的方法。”“利用H_2O、CO_2等丰富的自然资源生产氢燃料和高附加值燃料的人工光合作用被认为是解决环境问题最有希望的解决方案。”华东理工大学王艳芹教授和中国科学院福建物质结构研究所周天华教授分别在发表于2018年12月13日的*Cell*和2019年5月的*Rare Metals*上对该工作给予足够的肯定。

该研究在仅有可见光的作用下驱动了费托合成反应的进行，且得到了较高选择性的低碳烯烃产物，避免了传统催化中高温、高压的严苛反应条件。为光能燃料和化工品的制备上提供了可行的新思路。其中，同步辐射光源的表征明确指明了催化剂的结构组成，给出了关键组分 Fe 的存在状态，为后续的理论解释部分提供了夯实的基础。

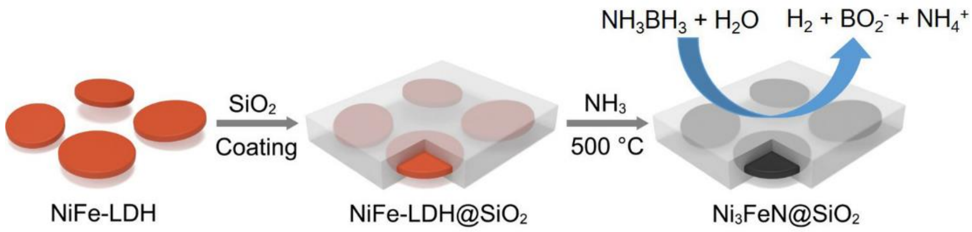
发表文章：

Yufei Zhao, Zhenhua Li, Mengzhu Li, Jinjia Liu, Xingwu Liu, Geoffrey I. N. Waterhouse, Yuanshen Wang, Jiaqing Zhao, Wa Gao, Zhaosheng Zhang, Run Long, Qinghua Zhang, Lin Gu, Xi Liu, Xiaodong Wen, Ding Ma, Li-Zhu Wu, Chen-Ho Tung, and Tierui Zhang, Reductive transformation of layered-double-hydroxide nanosheets to fe-based heterostructures for efficient visible-light photocatalytic hydrogenation of CO. ***Advanced Materials***, 2018, *30*, 1803127.

介孔二氧化硅保护的超薄 Ni3FeN 用于高效氨硼烷水解产氢

过渡金属氮化物在许多重要的化工反应中有良好的催化作用，比如氨的合成，加氢脱氮反应，加氢脱硫反应以及加氢处理过程。近年来，得益于独特的电子结构和金属特性，过渡金属氮化物被广泛地应用于能源领域，比如燃料电池，金属-空气电池和电催化分解水系统。氮化镍铁（Ni_3FeN）是一种很有潜力的过渡金属氮化物,并且，氮化镍铁纳米颗粒已经成功的通过高温氨化前体镍铁水滑石制备得到。但是在高温氨化过程中，前体镍铁水滑石会严重的团聚在一起，使得最终的氮化镍铁纳米颗粒尺寸变大，活性位点大量的被屏蔽，限制了氮化镍铁的进一步应用。因此，通过设计切实有效的方法来抑制过渡金属氮化物在高温氨化过程中团聚，制备超薄超小的，暴露大量活性位点的过渡金属氮化物在实际应用中具有重要意义。

中科院理化所张铁锐课题组通过简单的介孔二氧化硅保护法，将介孔二氧化硅包覆于前体镍铁水滑石表面，再在氨气氛围中高温煅烧即可得到介孔二氧化硅保护的超薄 Ni_3FeN（$Ni_3FeN@SiO_2$）。得益于介孔二氧化硅的保护作用，催化剂不会在高温氨气氛围中发生团聚，最终内层的超薄 Ni_3FeN 尺寸大小控制在 20 nm 左右，厚度控制在 3 nm 左右。$Ni_3FeN@SiO_2$ 的高比表面积和更多的活性位点使得 $Ni_3FeN@SiO_2$ 展现出相较于体相 Ni_3FeN 更高的催化氨硼烷水解产氢的性能。



利用北京同步辐射装置（BSRF）获得的 EXAFS 结果表明，超薄结构向 Ni_3FeN 中引入了金属缺陷位。进一步的密度泛函理论证实了，金属缺陷促进了对反应物氨硼烷分子的吸附，进而提高了 $Ni_3FeN@SiO_2$ 催化氨硼烷水解产氢的性能。

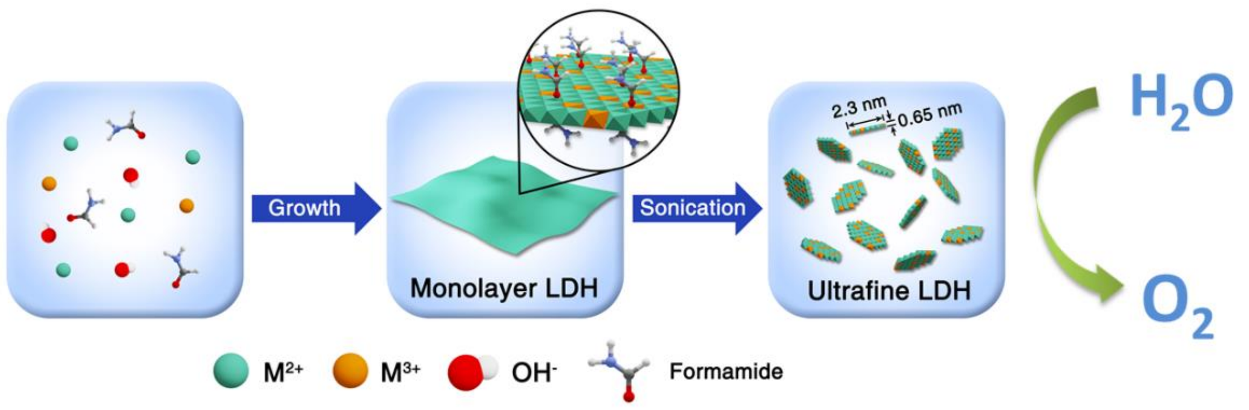
发表文章：

Xin Zhang, Yufei Zhao, Xiaodan Jia, Yunxuan Zhao, Lu Shang, Qing Wang, Geoffrey I.N. Waterhouse, Li-Zhu Wu, Chen-Ho Tung and Tierui Zhang*, Silica-protected ultrathin ni3fen nanocatalyst for the efficient hydrolytic dehydrogenation of NH_3BH_3, ***Advanced Energy Materials***, 2018, *8*, 1702780.

小于 3nm 超小单层水滑石纳米片的合成以及高效电催化分解水的研究

氢气被认为是一种高效、清洁的化石燃料替代品，目前生产氢气的方法主要还是依赖于化石燃料工业，存在着低纯度和高成本的弊端。通过电分解水产生高纯度的氢气和氧气是一种有效的降低成本的方案。电催化析氧反应（OER）作为分解水的一个重要的半反应，包括四个质子耦合电子转移和氧-氧键形成的过程，所以在动力学上并不利于该反应的进行，需要催化剂来加快反应速率。二氧化铱和二氧化钌是公认的最好的 OER 催化剂，但是这些催化剂储量少、价格昂贵，阻碍了其广泛的工业应用。镍铁水滑石（NiFe-LDH）基催化剂由于 NiFe-LDH 良好的 OER 性能被广泛得被应用于电催化领域。但是，现已报道的水滑石基催化剂中，NiFe-LDH 的粒径都大于 30 nm，过大的粒径阻碍了边缘活性位点的暴露，限制了催化剂的活性，因此制备超薄超小的，暴露大量活性位点的水滑石在实际应用中具有重要意义。

中科院理化所张铁锐课题组通过简单的超声剥离方法制备了粒径小于 3 nm，厚度 0.65 nm 左右的超小单层镍铁水滑石纳米片（NiFe-LDH-UF）。得到的 NiFe-LDH-UF 展现出良好的电催化分解水产氧的活性，其产氧活性优于商品的 IrO_2 催化剂，而且 10 小时内产氧活性几乎没有明显变化。



从北京同步辐射装置（BSRF）获得的 EXAFS 结果表明，NiFe-LDH-UF 相对于单层 NiFe-LDH 有大量的氧缺陷以及金属缺陷。DFT 计算结果则表明缺陷的引入有利于增加水滑石的金属性，使得水滑石由半导体性向导体性转变。并且该制备方法能够拓展到其他超小水滑石的制备上，比如锌铝水滑石和镍铝水滑石。该研究结果为超小超薄水滑石的制备以及新型非贵金属电催化分解水材料提供了新的思路。

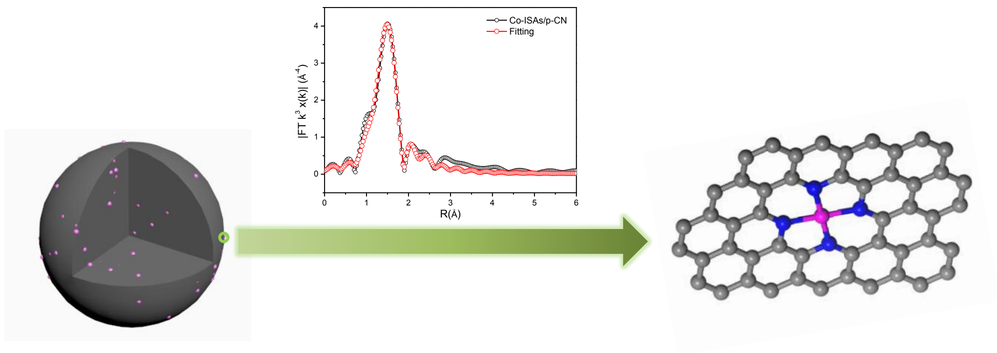
发表文章：

Yufei Zhao, Xin Zhang, Xiaodan Jia, Geoffrey I.N. Waterhouse, Run Shi, Xuerui Zhang, Yunxuan Zhao, Fei Zhan, Ye Tao, Li-Zhu Wu, Chen-Ho Tung, Dermot O'Hare and Tierui Zhang*, Sub-3 nm ultrafine monolayer layered double hydroxide nanosheets for electrochemical water oxidation" ***Advanced Energy Materials***, 2018, *8*, 1703585.

聚合物封装策略制备单原子位点催化剂

单原子位点催化剂由于其中的金属原子级分散在载体上，表现出高活性、高选择性、低成本等特点，近年来受到材料、催化等领域的广泛关注。然而，由于金属原子具有极高的表面能，在材料的制备过程中容易团聚，限制了单原子位点催化剂的发展。现有的合成单原子位点催化剂的方法仍然存在一些问题，如合成步骤繁琐、合成过程中需要酸洗等浪费大量金属前驱体的步骤、以及合成方法通用性差等等。因此，需要寻找一种更简便、更通用、更环保的合成方法。清华大学化学系的一个研究组发展了一种简单通用的聚合物封装策略来制备单原子位点催化剂，相关的研究成果发表在 2018 年 4 月 12 日的《Advanced Materials》上。

该研究组发现通过先将金属前驱体与聚合物单体预混合再使聚合物聚合，使金属前驱体均匀分散地原位封装在聚合物骨架中，经高温碳化还原，可获得氮掺杂碳负载的金属单原子位点催化剂。该研究组以金属乙酰丙酮配合物为金属前驱体，以多巴胺为聚合物单体，验证了聚合物封装策略制备单原子位点催化剂的可行性，使用该方法成功制备出了非贵金属（Co、Ni、Cu、Mn 等）和贵金属（Pd 等）单原子位点催化剂。另外，所制备的钴基单原子位点催化剂 Co-ISAS/CN 在氧还原反应中表现出可与 20% Pt/C 相媲美的电催化活性。



利用北京同步辐射装置（BSRF）获得了多种氮掺杂碳负载的单原子位点催化剂中金属位点的配位结构。通过 X 射线近边吸收谱（XANES）、X 射线吸收精细结构（EXAFS）及其拟合，确认金属（M，包括 Co、Ni、Cu、Mn、Pd）以稳定的 $M-N_4$ 的结构存在于氮掺杂碳载体上。

“最近，李组使用多巴胺混合金属乙酰丙酮络合物制备了多孔碳氮纳米球负载的金属单原子材料，其金属的种类可以为 Co、Ni、Cu、Mn 和 Pd。X 射线吸收谱和大角度环形暗场扫描透射电子显微镜分析确定了所有的金属都是以带正电荷的孤立的单原子位点的形式存在的，金属与四个氮原子配位。作为其中一个例子，碳氮负载的钴单原子材料在氧还原反应中表现出优异的稳定性和可与 Pt/C 相媲美的氧还原活性”，澳大利亚阿德莱德大学的 Zheng Yao 教授在其综述文章（Journal of Materials Chemistry A (6)2018, 21827-21846）中配图评述道了这个工作。

这个研究不仅为单原子位点催化剂的合成提供了一种简单、通用的合成策略，也为电催化氧还原反应提供了一种可供选择的高效电催化剂。在这项研究工作中，同步辐射光源帮助该研究组解开了金属单原子位点催化剂原子级结构的面纱。清华大学化学系教授、该研究组组长李亚栋院士这样描述他们的工作：“然而，单原子位点催化剂在实际的催化反应中活性位点的结构将会发生变化，因此催化反应条件下的金属位点的结构仍需要进行解析，以便于调控金属位点的配位结构合成高效的单原子位点催化剂。能够模拟催化反应条件的原位同步辐射光束装置将必定会有助于解析实际催化反应过程中的金属活性位点的原子级结构”。

发表文章：

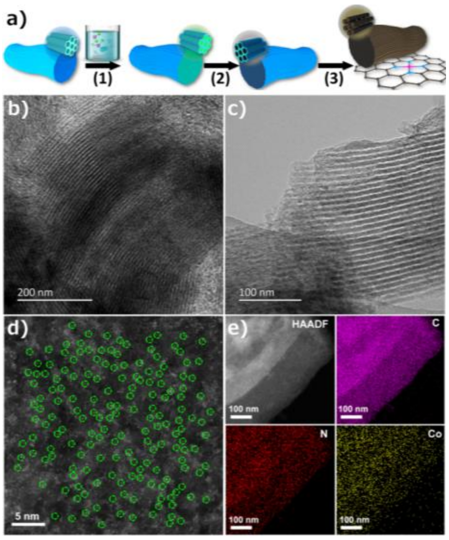
Aijuan Han[†], Wenxing Chen[†], Shaolong Zhang, Maolin Zhang, Yunhu Han, Jian Zhang, Shufang Ji, Lirong Zheng, Yu Wang, Lin Gu, Chen Chen, Qing Peng, Dingsheng Wang*, Yadong Li*. A Polymer Encapsulation Strategy to Synthesize Porous Nitrogen-Doped Carbon-Nanosphere-Supported Metal Isolated-Single-Atomic-Site Catalysts, Advanced Materials 30(2018), 1706508.

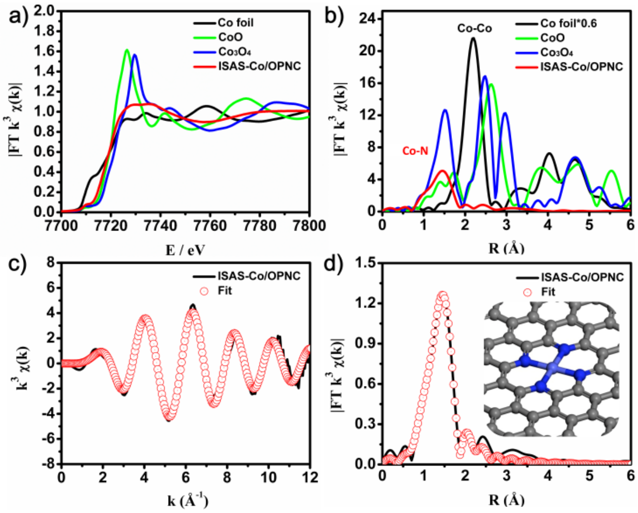
负载在空心氮掺杂碳球上的单原子钴催化剂：优异的电催化氧还原活性

N 杂环的催化脱氢和转移氢化或氢化是有机转化的必要和重要的过程。因此也受到了越来越多的关注。从有机储氢体系来讲，由于降低了反应的吸热性，使得 N-杂环的脱氢比环烷烃脱氢更为可行。另外，N-杂环的无受体脱氢释放 H2，提供了一个高效的制备 N 杂环化合物如吲哚和喹啉等的路径。虽然，已开发出一些均相和非均相金属催化剂，但这些催化剂大多数都仅仅可以进行转移氢化或氢化反应，或仅能催化相反的脱氢反应。并且，这些催化剂主要是均相贵金属催化剂。然而，可以同时进行 N 杂环的脱氢和 N-杂环的转移氢化或氢化的催化剂是非常罕见的。

单原子催化剂因其最大的原子利用率、优良的反应性和选择性而引起了科学工作者的广泛关注。随着合成方法的发展，成功地制造了大量的单原子催化剂。因为它们成功地继承了均相和非均相催化剂的优点，使得它们不仅表现出优异的电催化性能，而且对有机转化也具有很高的催化活性。众所周知，非均相催化剂的催化性能，高度依赖于载体材料。最佳的载体材料可以缩短扩散路径，并为反应物提供足够的界面面积。因此，单原子催化剂的广泛应用仍需要基于最优的载体特点开发合理和通用的合成方法。

最近，我们开发了一种模板辅助裂解法合成单原子催化剂。报道了其在电催化方面的性质。与广泛研究的电催化相比，单原子催化剂很少被用于有机反应，更不用说 N-杂环化合物的催化脱氢，转移氢化或氢化反应。在这里，我们报告一个负载在有序的多孔氮掺杂碳上的单原子钴催化剂（ISAS-Co/OPNC）。通过球差矫正电镜暗场照片可以清晰地观察到钴原子的亮点。利用北京同步辐射装置（BSRF）X 射线吸收谱技术（XAFS）表征说明没有存在 Co-Co 金属键。同时对数据进行小波变化后，也表明没有 Co-Co 键的存在。通过 XAFS 分析，钴原子被周围的 4 个 N 原子配位稳定。理论模拟得到的模型键长和配位数与实验得到的结果基本吻合。有趣的是，ISAS-Co/OPNC 可以同时催化 N-杂环的脱氢释放 H2，并可以甲酸或氢气作为氢源进行相反的转移氢化或氢化。该催化剂的催化性能优于已经报道的均相和非均相贵金属催化剂。用第一性原理计算系统地研究了反应机理，提出了以 Eley-Rideal 机制为主导的反应机理。开发了一种可用于催化可逆脱氢/氢化的催化剂，这为有机分子用作储氢材料产生 H2 从而替代石油燃料提供了一种可能。相关工作发表在 Angewandte Chemie 上。





发表文章：

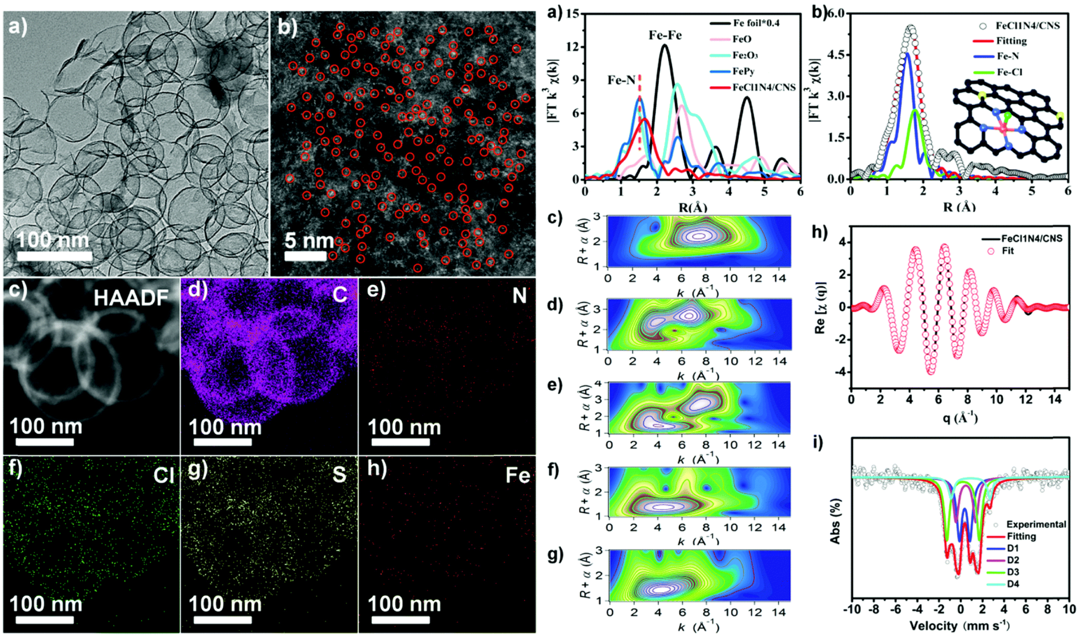
Yunhu Han+, Ziyun Wang+, Ruirui Xu, Wei Zhang, Wenxing Chen, Lirong Zheng, Jian Zhang, Jun Luo, Konglin Wu, Youqi Zhu, Chen Chen, Qing Peng, Qiang Liu, P. Hu, Dingsheng Wang,* and Yadong Li*, Ordered Porous Nitrogen-Doped Carbon Matrix with AtomicallyDispersed Cobalt Sites as an Efficient Catalyst for Dehydrogenation and Transfer Hydrogenation of N-Heterocycles, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2018, *57*, 11262 –11266.

调节活性中心的电子结构改善活性中心氧还原活性

非贵金属氮掺杂碳（M/CN）催化剂作为 Pt 基电催化剂的潜在替代品已备受关注。然而，在碱性和酸性介质中，尽管最近 M/CN 催化剂取得了显着的改善，但是大量的 M/CN 催化剂仍然表现出更高的超电势或其他缺陷。为了提高 M/CN 材料的 ORR 活性，诸如增加金属活性中心的密度，提高 ORR 相关物质的输运性能等方法已经被不断采用。不幸的是，M/CN 材料在实现工业上 Pt 基电催化剂的替代方面仍面临巨大挑战。

调节金属中心的电子结构被认为是提高 M / CN 材料催化活性的非常有效的策略。因为随着电子调制，自旋和电荷密度的重新分布发生，将导致催化性能增强和改善。有两种方法可以影响金属活性位点的电子结构。一种是直接调节金属活性中心的配位原子种类。另一种方法是利用金属活性中心与基底上的杂原子长程相互作用来影响电子结构。因此产生了一个问题：有没有同时调整近程配位环境和长程相互作用的材料，同时来改变活性中心的电子结构以实现催化性能的显着改善？

在此，我们首次通过热迁移法制备了原子分散的 FeCl1N4/CNS 催化剂。通过球差矫正电镜暗场照片可以清晰地观察到铁原子的亮点。通过北京同步辐射装置开展的 X 射线吸收谱技术表征说明没有存在 Fe-Fe 金属键。同时对数据进行小波变化后，也表明没有 Fe-Fe 键的存在。通过 XAFS 分析和穆斯堡尔谱分析，铁原子被周围的 4 个 N 原子和一个 Cl 原子配位稳定。理论模拟得到的模型键长和配位数与实验得到的结果基本吻合。通过实现中心金属的氯配位，所获得的催化剂表现出非常优异的 ORR 活性。它在 0.1M KOH 溶液中具有最高的半波电位 $E_{1/2}$ = 0.921V，比商用 Pt/C（$E_{1/2}$ = 0.842V）的阳离子高 79 mV，并且是报告的最好的日期为非贵金属电催化剂。此外，值得一提的是，在碱性介质中，FeCl1N4/CNS 在 0.85 V 下具有非常优异的 41.11 mA cm^{-2} 的动力学电流密度（J_k），这一数值在非贵金属电催化剂的文献报道中也是最高的。更重要的是，它还表现出突出的甲醇耐受性和优异的稳定性，在 1.0 M MeOH 存在下没有明显的电流变化，10000 次循环后仅有很小的 ORR 极化曲线偏移。它是迄今为止最优秀的非贵金属 ORR 电催化剂之一。实验和密度泛函理论（DFT）已经证明，通过调节 Fe 活性中心与配位氯的近程相互作用和载体上杂原子硫的长程相互作用来调节活性中心的电子结构，可以大大改善 ORR 属性。这一发现发现可能为优质电催化剂的设计开辟新的途径，为单原子材料的制备提供了新的思路，为进一步研究催化剂的应用提供了新的机遇，相关工作发表在 ***Energy Environ. Sci*** 上。



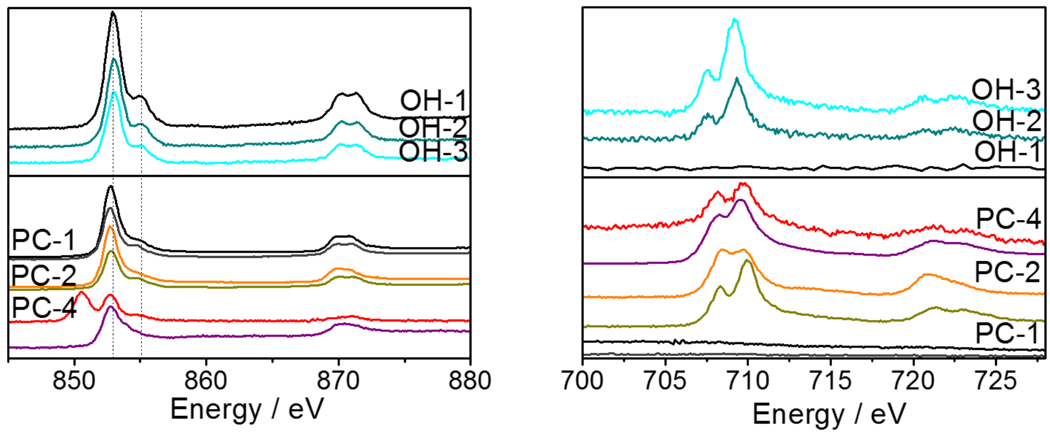
发表文章：

Yunhu Han,‡ Yanggang Wang,‡ Ruirui Xu, Wenxing Chen, Lirong Zheng, Aijuan Han, Youqi Zhu, Jian Zhang, Huabin Zhang, Jun Luo, Chen Chen, Qing Peng, Dingsheng Wang* and Yadong Li*, Electronic Structure Engineering to Boost Oxygen Reduction Activity by Controlling the Coordination of Central Metal, *Energy Environ. Sci.*, 2018, *11*, 2348-2352.

$(Ni,Fe)S_2$ 黄铁矿介晶体的制备及其用作水氧化前催化剂的性质

电解水制备氢气是氢能源利用的一个关键课题，而电解水中阳极氧化产生氧气的半反应（OER）是相对耗能更高的反应，因此寻找性能优异的产氧催化剂，并且探究清楚其中的构效关系，一直是电解水研究中的重要课题。近年来，过渡金属硫化物成为电解水研究的热门催化剂，然而硫化物作为产氧催化剂时是否被完全氧化形成氧化物或者氢氧化物是一个尚有争议的问题。清华大学化学系的一个研究组制备了$(Ni,Fe)S_2$ 黄铁矿介晶体，并详细研究了该材料在 OER 中的性质，研究发现其高活性源于黄铁矿在 OER 条件下自优化形成的 S 掺杂氢氧化物。相关的研究成果发表在 2018 年 2 月的《Chemical Science》上。

为了探究黄铁矿用于 OER 的构效关系，该研究组使用玻碳电极进行详细的机理研究。结果发现黄铁矿介晶体进行 OER 测试前的循环伏安测试中曲线的第一圈与后面的循环表现出极大的差异，通过表征，发现催化剂的形貌和组成在经历循环伏安法之后发生了极大的变化。其形貌由介晶体变为多孔絮状结构，而组成由$(Ni,Fe)S_2$ 变为 S 掺杂的非晶氢氧化物，这个过程可以被称为自优化过程。随后的线性伏安法扫描中，该材料表现出极为优异、稳定的性质，在玻碳电极上电流密度达到 $10mA/cm^2$ 仅需不到 260mV 的过电势，与同类文献相比表现出更佳的性质。进一步的表征验证了该材料表现出较高产氧法拉第效率，因此是较好的 OER 催化剂。综合分析可以得出$(Ni,Fe)S_2$ 黄铁矿是优异的前催化剂，其电化学条件下自优化形成的 S 掺杂氢氧化物是更好的活性物种。



利用北京同步辐射装置（BSRF）的软 X 射线吸收谱对比相关氢氧化物、$(Ni,Fe)S_2$ 黄铁矿介晶体和 S 掺杂氢氧化物的 Ni 和 Fe 的 L 边吸收谱（OH 系列为含铁量不同的氢氧化物，PC 系列为含铁量不同的$(Ni,Fe)S_2$ 黄铁矿介晶体，介晶体下面的曲线为相应 S 掺杂氢氧化物）。在 PC-1 和 PC-2 介晶体中，Ni 的 L 边吸收谱中显示经历循环伏安法扫描之后吸收谱没有明显发生变化，并且与氢氧化物有显著区别；初始 PC-4 显示出不同的 Ni L 边吸收，但经历循环伏安法扫描之后，吸收谱与 PC-1 和 PC-2 的谱相似。一般而言，谱中能量越高的位置表明金属的价态越高，说明 Ni 在硫化物中的价态相对较低。在 Fe 的 L 边吸收谱

中，硫化物经历循环扫描之后，显示出双峰，并且高价态位置的峰面积比低价态峰面积大，但比氢氧化物中的比例要小，说明硫化物中高价铁含量相对较低。

这个工作不仅探究了硫化物在 OER 中的自优化过程，还明确指出了残余的 S 掺杂对于 OER 性能的提升。最后，该研究组指出了相关研究中需要值得注意的几个问题：1.为什么 S^{2-} 离子能够在高氧化性电位下生存？2.经过循环伏安法之后残留的 S^{2-} 离子如何与氢氧化物结合？3.是否可能以阴离子单原子形式存在？

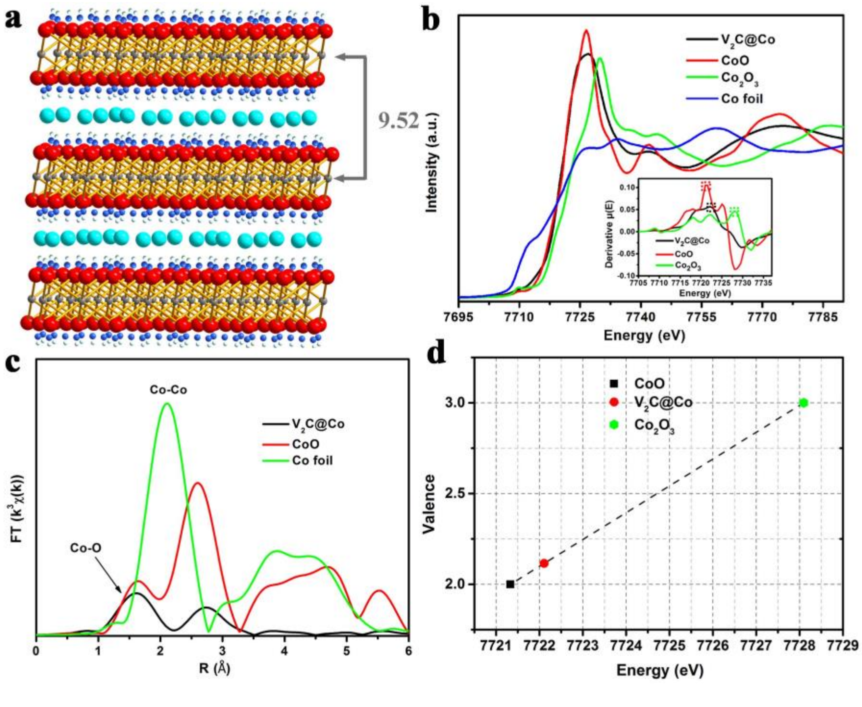
发表文章：

Bing Ni, Ting He, Jia-ou Wang, Simin Zhang, Chen Ouyang, Yong Long, Jing Zhuang and Xun Wang*, The formation of $(NiFe)S_2$ pyrite mesocrystals as efficient pre-catalysts for water oxidation, Chem. Sci., 2018, 9, 2762-2767.

同步辐射吸收谱解析钴离子插层 V_2C MXene 以及储锂应用

二维层状过渡金属碳化物和氮化物(MXenes)是近年来发现的一类新型二维材料，基于其高导电率以及独特的层状结构，以 $Ti_3C_2T_x$，V_2CT_x 为代表的 MXenes 在锂离子电池以及超级电容器等能源储存方面得到了越来越广泛的研究。不过当前报道的 MXenes 实际储能容量均远低于理论值，因此进一步提高其储能能力至关重要。中国科学技术大学国家同步辐射实验室宋礼教授课题组通过钴离子插层策略，成功设计和制备了具有超高储锂容量和优异循环稳定性的碳化矾 MXene 电极材料，相关结果发表在 2018 年 6 月 25 日的《Advanced Materials》上。

该研究通过液相刻蚀手段，在35 ℃下用HF刻蚀V_2AlC MAX相得到了面间距为0.735 nm（小于以往报道面间距）的V_2C MXene，在0.1 A g^{-1}的电流密度下表现出686.7 mA h g^{-1} 的储锂比容量，更加接近于V_2C MXene约940 mA h g^{-1}的理论储锂容量。在此基础上，进一步通过钾离子预插层和钴离子交换方法，获得了面间距扩大为0.952 nm的V_2C MXene。同步辐射X-ray吸收谱分析证实了这种Co插层MXene层与层之间具有稳定的V-O-Co键，其中二价钴离子主要存在于V_2C内部层间，三价钴离子主要存在于近表面的层间， 并最终计算了V_2C中钴离子的平均化合价为+2.12。由于插层钴离子赝电容的贡献以及V-O-Co键的形成，该插层材料表现出1117.3 mA h/g的储锂放电比容量，并且经15000圈的循环充放电之后几乎没有容量衰减。



利用北京同步辐射装置（BSRF）X射线吸收实验获得的钴离子插层V_2C MXene的结构和钴离子价态等信息。

本工作通过钴离子插层的等手段调节 V_2C MXene 的层间距，实现了该材料储锂比容量以

及循环稳定性的大幅提升。同时通过同步辐射 X 射线吸收谱学研究了插层离子在层间的存在形式，证明了 V-O-Co 键的形成为性能优化提供了理论支撑。该工作不仅改善了 V_2C MXene 在储能领域实际比容量远低于理论比容量的问题，也展示了 XAFS 手段在 MXene 的插层结构解析等领域是强有力的表征手段。

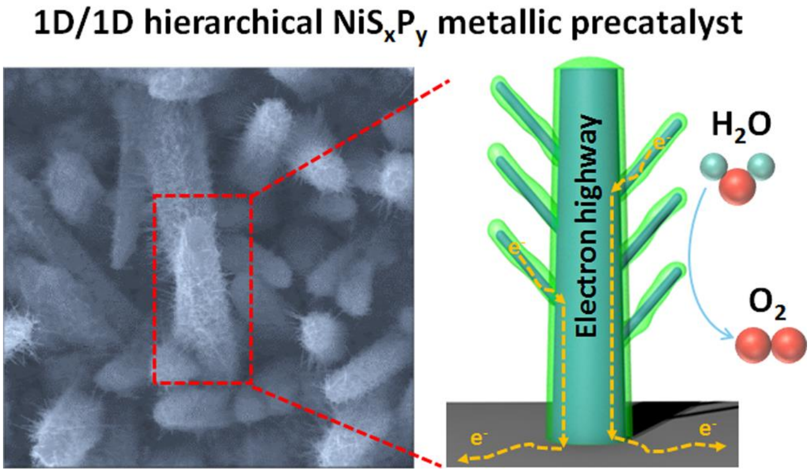
发表文章：

C. Wang, H. Xie, S. Chen*, B. Ge, D. Liu, C. Wu, W. Xu, W. Chu, G. Babu, P.M. Ajayan, L. Song*, Atomic Cobalt Covalently Engineered Interlayers for Superior Lithium-Ion Storage, Adv. Mater. 30(32) (2018) e1802525.

1 维/1 维硫化镍/磷化镍纳米结构在电催化析氧反应中的应用

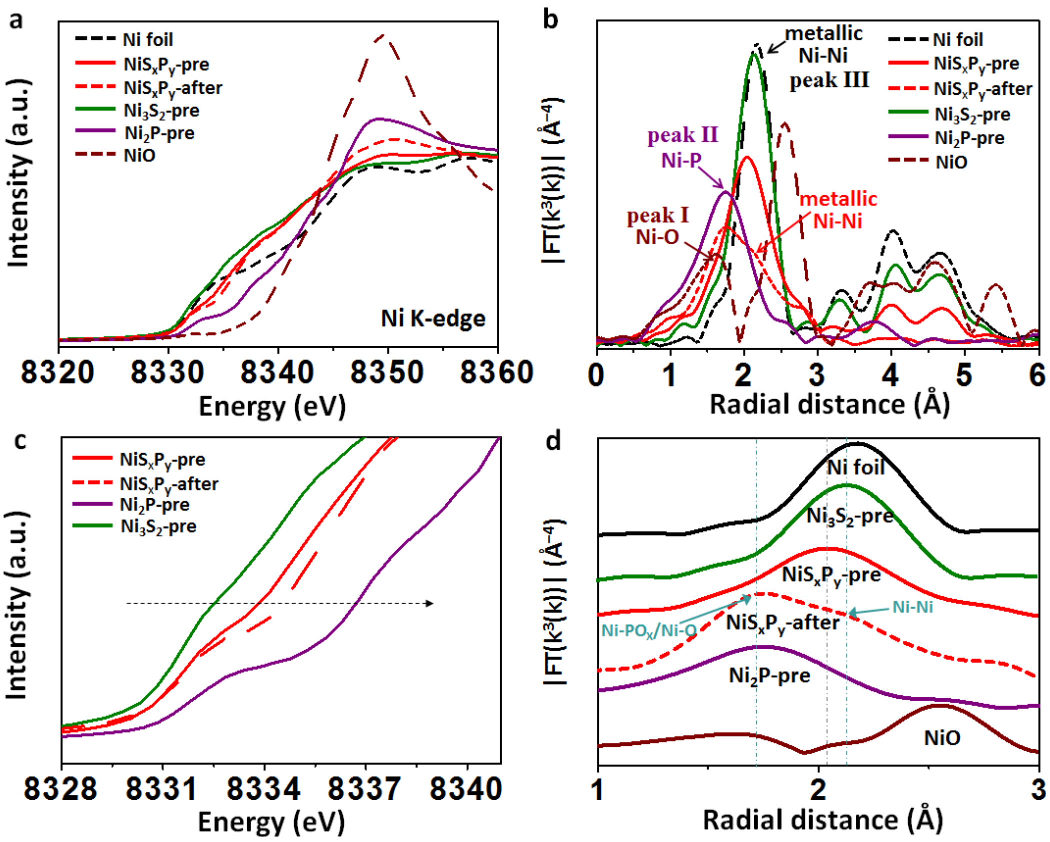
作为电催化分解水重要的半反应，由于涉及复杂的四电子转移过程和缓慢的 O-O 键形成步骤，需要很高的能量才能驱动阳极氧气析出反应（OER）的发生，阻碍了太阳能转化与储存技术的发展。电催化剂可有效降低反应过电位并提升反应活性，其性能与活性位点的数量以及本征催化活性有关。因此，通过可控制备具有高本征活性的材料并暴露更多的活性面积，可以进一步提升 OER 反应性能。对此，华东理工大学材料科学与工程学院新型清洁能源课题组对高效析氧催化剂的设计展开深入研究，相关研究成果发表在 2018 年 8 月 6 日的《ACS Energy Letters》上。

该课题组通过磷化处理1维（1D）Ni_3S_2纳米棒制备了具有金属特性Ni_3S_2和$Ni_{12}P_5$的复合材料体系（NiS_xP_y）。该催化剂具有纳米线生长在纳米棒上的1 D/1 D多级纳米结构，其中纳米线的长度在350-400 nm左右，直径在15-20 nm之间，且Ni_3S_2和$Ni_{12}P_5$组分在纳米棒和纳米线上均匀分布。通过X射线衍射（XRD）、X射线吸收精细结构（XAFS）等表征表明析氧反应前后，NiS_xP_y体相能保持良好的金属特性，证明在反应过程中，该材料具有较高的电荷传输速率。通过拉曼光谱（Raman）、光电子能谱（XPS）和XAFS等表明OER后，材料表面生成NiOOH活性组分（NiS_xP_y-O）。1D/1D多级纳米结构暴露大量活性位点的同时，也加快了电荷传输过程。该独特的多级结构以及材料的高本征析氧活性使得NiS_xP_y展现了出色的OER性能。在1.0 M KOH (pH = 13.6) 的碱性电解质中，NiS_xP_y-O仅需192 mV的过电位（100%的电阻补偿）即可达到10 mA cm^{-2}的O_2局域电流密度（η_{10} = 192 mV）；在0.5 M $KHCO_3$ (pH = 8.54) 的近中性电解质中，NiS_xP_y-O的η_{10}仅为315 mV。



利用北京同步辐射装置（BSRF）对NiS_xP_y中Ni组分在反应前后价态以及配位环境的变化进行分析。首先，从Ni K-edge的XANES谱图可以看出（图a和c），标准样品NiO的白线峰强度最高，Ni foil的最低。吸收边能量说明NiS_xP_y中Ni的价态处于Ni_3S_2和Ni_2P中间。析氧反应后，所有样品中Ni的价态升高，证明反应过程中样品发生氧化；另一方面，NiS_xP_y中Ni的价态仍然比反应前Ni_2P的低，该现象表明样品体相仍保持金属性。同时，通过Ni元素扩展X射

线吸收精细结构谱（EXAFS）得知（图b和d），峰I（1.61 Å）属于Ni-O成键，峰II（1.76 Å）属于Ni-P成键，峰III（2.15 Å）属于Ni-Ni成键。NiS_xP_y中主峰位置为2.0 Å，据分析该峰主要来自Ni-Ni的反向散射，部分属于Ni元素与非金属元素的成键（O、S或P）。析氧反应结束后，NiS_xP_y在1.73和2.14 Å处出峰，其中前者表明Ni与邻近O或P配位（Ni-O或Ni-PO_x），进一步证明了Ni被氧化；后者说明Ni-Ni键仍然存在，证明体相保持良好的金属特性。



该研究工作为合理设计 1D/1D 金属性多级纳米结构高效析氧电催化剂提供了新的设计思路，推动了碱性和中性电解槽的工业应用。在这项研究工作中，北京同步辐射光源帮助该课题组清晰地探明了 NiS_xP_y 催化剂反应前后的结构变化，为其进一步理解反应机理提供了指导。

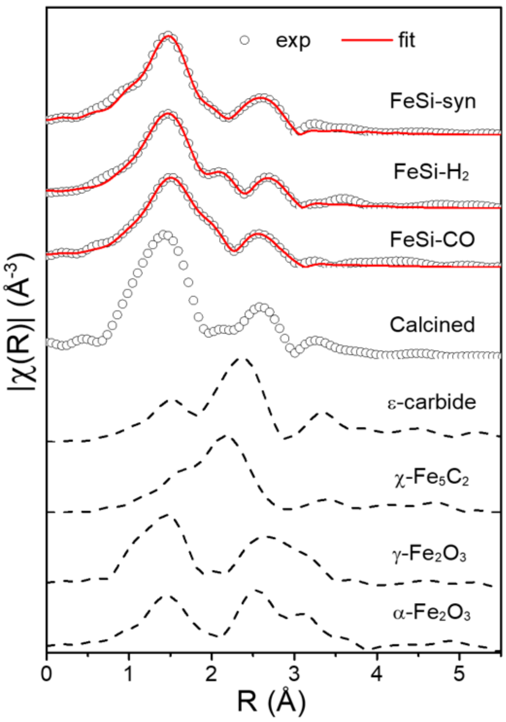
发表文章：

Huai Qin Fu, Le Zhang, Chong Wu Wang, Li Rong Zheng, Peng Fei Liu,* and Hua Gui Yang*
1D/1D Hierarchical Nickel Sulfide/Phosphide Nanostructures for Electrocatalytic Water Oxidation. ACS Energy Letters 3(2018), 2021-2029.

费托合成反应碳化铁活性相性能研究

铁元素在自然界中储量丰富，是很多催化体系的活性组份，其中碳化铁可以催化费托合成反应，将合成气（$CO+H_2$）转变为不同碳链长度的液体燃料和精细化学品，对不同碳化铁性能的研究有助于高效费托催化剂的开发。中科院山西煤化所/中科合成油技术有限公司李永旺课题组详细研究了几种费托反应碳化铁（Fe_2C、Fe_7C_3 和 Fe_5C_2）的活性差异，用表观本征活性确认 Fe_7C_3 具有最高反应活性，并提出 Fe_7C_3 的制备策略，相关的研究成果发表在 2018 年 4 月 6 日的《ACS Catalysis》上。

Fe_7C_3 的相关研究较少，主要是由于该物相制备困难，生成窗口较窄，与 ε-Fe_2C 和 χ-Fe_5C_2 存在生成竞争。通过调研不同碳化铁生成的影响因素，提出在中高温下用 CO 气氛碳化高分散小尺寸纳米粒子制备 Fe_7C_3 的策略，中高温在热力学上抑制 ε-Fe_2C/ε'-$Fe_{2.2}C$ 生成，高分散纳米粒子尺寸小、表面缺陷多，动力学上有利于碳的扩散渗透。该策略扩大了 Fe_7C_3 的生成窗口，克服了以往报道中需要较长时间才能生成 Fe_7C_3 的弊端，为可控制备 Fe_7C_3 提供了方向。通过不同预处理方式制备不同的碳化铁物相，以 Fe_5C_2 为参比基准，分析了不同碳化铁表面活性位点对反应的贡献，首次表明 Fe_7C_3 具有最高的本征反应活性，表观 TOF 为 4.59×10^{-2} s^{-1}，是一个非常优异的费托合成活性相。



Catalysts	Iron phases	Compositions	Shell	N	R (Å)
$FeSi\text{-}H_2$	iron oxide	0.56	Fe-O	3.1	1.94
			Fe-Fe	4.7	3.05
	iron carbide	0.44	Fe-C	3.7	2.04
			Fe-Fe	4.9	2.75
FeSi-CO	iron oxide	0.57	Fe-O	5.6	1.94-2.12
			Fe-Fe	3.3	2.97
	iron carbide	0.43	Fe-C	1.7	2.00
			Fe-Fe	3.4	2.39-2.62
FeSi-syn	iron oxide	0.77	Fe-O	4.1	1.95
			Fe-Fe	6.1	3.06
	iron carbide	0.23	Fe-C	1.2	2.24
			Fe-Fe	3.1	2.63-2.86

图 1 催化剂的 FT-EXAFS 谱图及拟合结果

通过与北京同步辐射装置（BSRF）的合作，利用 1W1B XAFS 线站测试了不同碳化铁催化剂的近边结构和扩展边结构，分析了铁的物相组成和配位结构等信息，揭示了催化剂的基

本性质，为结构性能关系的建立提供了依据。

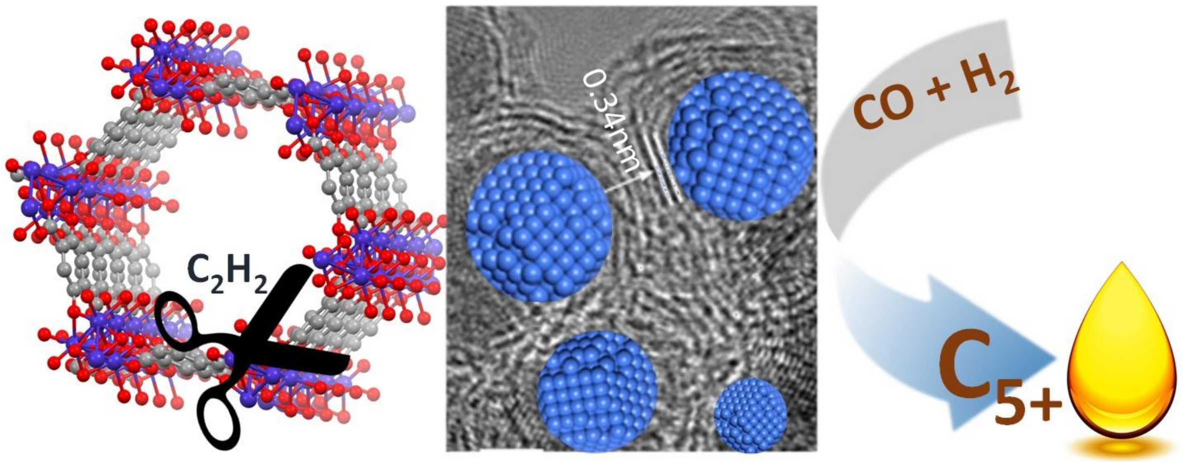
发表文章：

Qiang Chang, Chenghua Zhang,* Chengwei Liu, Yuxue Wei, Ajin V. Cheruvathur, A. Iulian Dugulan, J. W. Niemantsverdriet, Xingwu Liu, Yurong He, Ming Qing, Lirong Zheng, Yifeng Yun, Yong Yang,* and Yongwang Li, Relationship between Iron Carbide Phases (ε-Fe_2C, Fe_7C_3, and χ-Fe_5C_2) and Catalytic Performances of Fe/SiO_2 Fischer-Tropsch Catalysts. ACS Catalysis 8(2018), 3304-3316.

乙炔还原金属有机骨架（MOFs）可控制备 Co@C 核-壳纳米粒子费托合成催化剂

费托合成可将煤炭、天然气、生物质等含资源经合成气转化为清洁液体燃料（汽柴油）和高附加值化学品（烯烃、醇、精制蜡等）。催化剂对该反应的活性、产物选择性和运行稳定性起着至关重要的作用。高活性、高稳定性的催化剂一直是费托合成领域的研究热点。中国科学院山西煤炭化学研究所、中科合成油技术有限公司、英国阿斯顿大学和贝尔法斯特女王大学的研究人员利用乙炔还原Co-MOF-74金属有机骨架材料可控制备Co@C核-壳催化剂，并深入研究了催化剂的结构和费托合成性能，相关的研究成果发表在 2018 年 6 月 20 日的《ACS Catalysis》上。

在该研究中，具有一维孔道结构的Co-MOF-74提供了一种原子级分散的Co有机羧酸盐前驱体，乙炔气体在高温下还原Co-MOF-74中的Co元素形成金属钴粒子，而材料和气氛中的碳元素则在钴粒子表面自发形成多孔碳壳层。提高乙炔还原温度，多孔碳壳层的结构可以从无定型碳向石墨烯转变，而钴粒子尺寸则能控制在4-6纳米之间。该催化剂在260 ºC、3.0 MPa的典型费托合成条件下，可将合成气高活性地转化为烃类化合物，烃产率高达4.0-5.2 gHC/g-Cat/h。研究发现钴粒子中合理的Co-O与Co-Co配位数，以及多孔碳壳的通透性是影响催化活性的至关重要因素。



利用北京同步辐射装置（BSRF）获得了Co-MOF-74和Co@C核-壳催化剂中Co-O和Co-Co键的键长、配位数和Co元素的还原度信息。在费托合成反应过程中，钴粒子中的Co-O和Co-Co配位结构不断重构，当Co-O配位数为4.0，Co-Co配位数为6.0时，钴粒子中的Co-O与Co-Co配位结构达到平衡态，催化剂展现出最佳的稳态活性和选择性。

该研究提供了一种制备超高分散 Co 基费托合成催化剂的新方法，揭示了影响催化剂稳定性的微观结构信息，为新型高效催化剂的研发奠定了科学的基础。在这样研究工作中，同步

辐射光源帮助研究人员认识了金属纳米粒子表面的微观结构信息。下一步结合原位技术，将为揭示工况下催化剂的活性相的微观结构变化提供有价值的信息。

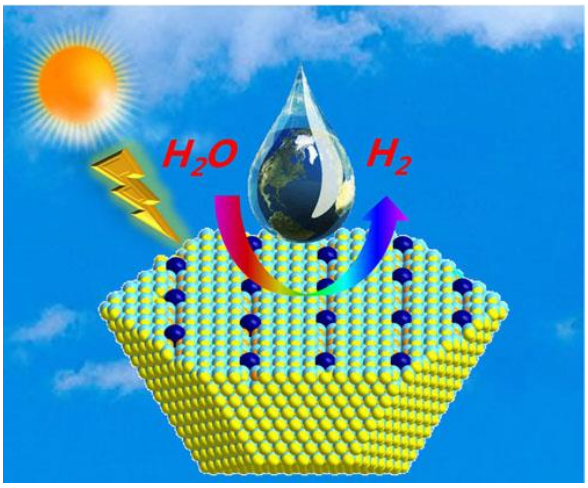
发表文章：

Chenghua Zhang,* Xiaoxue Guo, Qingchun Yuan,* Rongle Zhang, Qiang Chang, Ke Li, Bo Xiao,* Suyao Liu, Caiping Ma, Xi Liu, Yuqun Xu, Xiaodong Wen, Yong Yang, and Yongwang Li,* Ethyne-Reducing Metal−Organic Frameworks to Control Fabrications of Core/shell Nanoparticles as Catalysts. ACS Catalysis 8(2018), 7120–7130.

硫化镉表面台阶修饰的单原子作为电子泵增强光催化活性

通过光催化水分解技术制备清洁能源氢气，可以有效地实现光能向化学能的转化，对开发清洁能源及降低环境污染等具有重要研究意义。相比于传统的基于金属颗粒的助催化剂来讲，单原子催化体系的成功构建可以显著提高助催化剂的原子利用率，节约成本。然而随着金属粒子的尺寸减小，会导致团聚现象的发生，进而造成催化剂的失活。如何制备高效、稳定的具有光解水产氢活性的单原子催化剂是该领域的关键科学问题。中科院福建物质结构研究所结构化学国家重点实验室张健研究员领导的无机合成化学团队，对单原子铂进行了深入的研究，相关的研究成果发表在《Nano Energy》上。

该研究发现利用CdS纳米线与金属配合物离子表面电荷的匹配性，从CdS纳米线表面缺陷出发，通过控制组装浓度和低温煅烧，可以成功地在CdS纳米线表面负载将近1 wt.%的稳定的Pt单原子。可见光驱动光催化分解水产氢测试表明，此单原子催化剂具有优异的催化活性与稳定性，其产氢效率达到CdS活性的63.77倍。



利用北京同步辐射装置（BSRF）获得单原子铂催化剂Pt©CdS的微观结构。Pt L_3边的X-射线吸收精细结构谱通过傅立叶变换分析表明，~1.9 Å处存在Pt-S信号，与铂片相比，在~2.6 Å处不存在Pt-Pt信号，小波变换后的分析结果也证明Pt©CdS与铂片表现出不同的信号。结合进一步的拟合结果证明单原子铂锚定在硫化镉表面，并且与邻近的四个硫原子配位，以PtS4四面体构型存在，Pt-S键长为2.32 Å。

与此同时，利用稳态荧光、时间分辨荧光、皮秒和纳秒瞬态吸收谱等表征了样品的光吸收和光激发特性、光生电子与空穴的形成和迁移，结合DFT结果揭示了单原子活性位点显著提高光催化产氢速率的作用机制。

这项研究成果不仅为构建稳定、高效的单原子催化剂提供了有效方案，同时也可以为研究单原子催化剂的结构-性能构效关系提供借鉴意义。在这项研究工作中，同步辐射光源帮助

该研究组揭开了单原子铂催化剂微观结构的面纱。同步辐射光束线将必定会有助于我们探索更多精细结构的催化剂，深入理解构效关系。

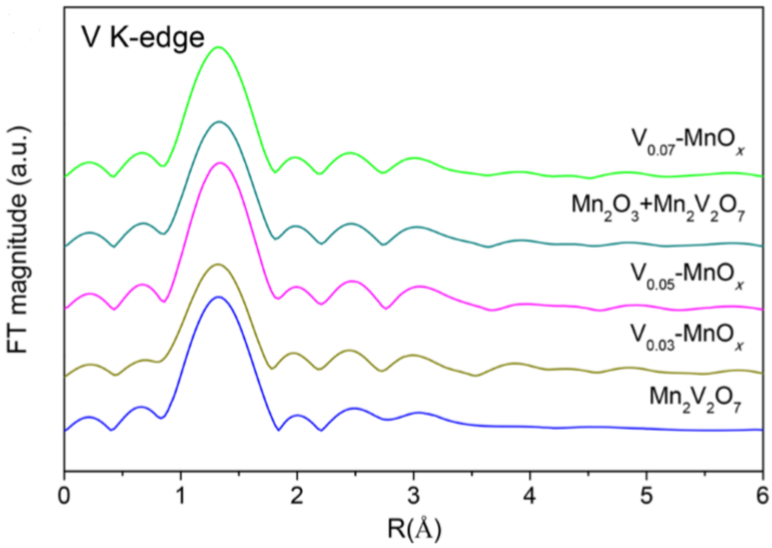
发表文章：

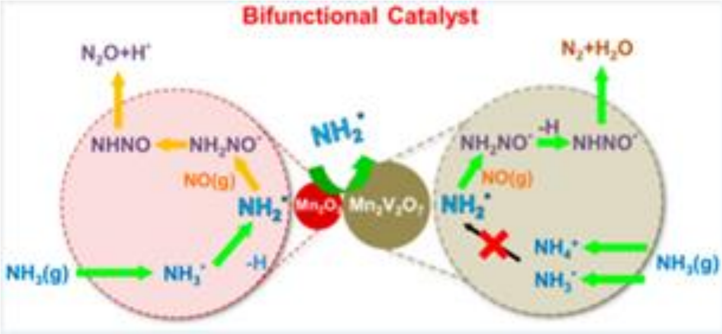
Xin Wu, Huabin Zhang,* Juncai Dong, Mei Qiu, Jintao Kong, Yongfan Zhang, Yang Li, Guilan Xu, Jian Zhang,* Jinhua Ye*, Surface step decoration of isolated atom as electron pumping: Atomic-level insights into visible-light hydrogen evolution. Nano Energy, 45, 2018, 109-117.

从分子尺度揭示高效双功能 Va-MnOx 低温 SCR 催化剂的反应机理

利用催化技术去除氮氧化物（NO_x）一直是环境催化领域的研究热点之一。氨选择性催化还原（NH_3-SCR）技术是目前公认最有效、应用最广泛的 NO_x 去除技术，该技术的核心是催化剂，但 SCR 催化剂在低温下活性和 N_2 选择性难以提高，这在一定程度上是由于对催化剂反应机理的了解十分有限，无法从根本上提高 SCR 催化剂的性能。济南大学化学化工学院的一个研究组设计制备了 V_a-MnO_x 复合氧化物双功能催化剂，对其 NH_3-SCR 催化活性、结构组成及反应机理进行了深入研究，从分子尺度揭示了低温 SCR 催化剂性能提高的内在机制，相关成果发表在 2018 年 4 月 23 日的《ACS Catalysis》上。

该研究组发现利用简单的溶胶凝胶法，可以得到不同Mn_2O_3和$Mn_2V_2O_7$含量的V_a-MnO_x复合氧化物，且复合氧化物的SCR活性，特别是低温活性远高于任一单一组分，N_2选择性均优于Mn_2O_3。其中，$V_{0.05}$-MnO_x（V/Mn摩尔比为0.05）表现出最优的SCR活性，在120-240℃范围内NO_x的转化率在90 %以上，N_2选择性高于80%。利用X射线吸收精细结构谱（XAFS）、氢气程序升温还原（H_2-TPR）、氨程序升温脱附（NH_3-TPD）、透射电子显微镜（TEM）等表征，并设计对比实验证明V_a-MnO_x复合氧化物催化剂中紧密接触的Mn_2O_3和$Mn_2V_2O_7$两种晶体颗粒间存在较强的协同作用是提高催化剂活性的主要原因。通过吸附和反应过程中的原位红外光谱（*in situ* IR），并结合密度泛函理论（DFT）计算，从分子尺度确定了该催化剂上的反应机理，即V_a-MnO_x催化剂中的Mn_2O_3能有效地将吸附的NH_3活化为NH_2中间物，随后NH_2转移到与之紧密接触的$Mn_2V_2O_7$上并与气相NO形成NH_2NO，具有高N_2选择性的$Mn_2V_2O_7$能够将NO还原成N_2和H_2O而不是副产物N_2O，从而该双功能催化剂显著提高了Mn基催化剂的低温活性和N_2选择性。





利用北京同步辐射装置（BSRF）上的XAFS实验，证明了V_a-MnO_x中的V物种仅存在于$Mn_2V_2O_7$中，排除了V掺杂进入Mn_2O_3而使Mn_2O_3的性能变化从而提高SCR活性的可能，并结合多种表征手段和DFT计算，从分子尺度揭示了紧密接触的Mn_2O_3和$Mn_2V_2O_7$的双功能性使催化剂的低温活性和N_2选择性得到显著提高。

美国辛辛那提大学（University of Cincinnati）的 Panagiotis G. Smirniotis 博士在最新发表的综述“A Review of Low Temperature NH_3-SCR for Removal of NO_x, *Catalysts*, 2019, 9, 349”中引用并大篇幅评论该工作：最近，辛等设计了由 Mn_2O_3 和 $Mn_2V_2O_7$ 组成的双功能 V_a-MnO_x 催化剂，其低温下的 NO_x 转化率和 N_2 选择性与 Mn_2O_3 相比显著提高。···Mn_2O_3 物相可以将 NH_3 活化成 NH_2 中间体，然后再转移到催化剂的 $Mn_2V_2O_7$ 相上，并与气态 NO 反应生成 NH_2NO。最后，在 $Mn_2V_2O_7$ 相上生成的 NH_2NO 中间体只分解为 N_2，而不是不希望得到的副产物 N_2O，N_2O 是由吸附在 Mn_2O_3 上的 NH_3 深度氧化形成的。

该工作为低温 SCR 催化剂反应机理的研究以及设计、开发新型低温 SCR 催化剂提供了新思路。在这项研究工作中，北京同步辐射装置的 XAFS 站帮助该研究组明确了 V_a-MnO_x 复合氧化物的物相组成。济南大学化学化工学院教授、该研究组组长张昭良教授这样描述他们的工作：“探明 SCR 催化剂的内在反应机理对于低温催化剂性能的提高具有举足轻重的地位，该工作从分子尺度揭示了双功能低温 V_a-MnO_x 复合氧化物 SCR 催化剂的反应机理，为新型、高效低温 SCR 催化剂的研发提供了理论指导和设计思路。对于复合氧化物催化剂体系来说，其结构组成和原子配位环境较为复杂，XAFS 无疑是用来研究这些复杂结构十分有力的实验手段”。

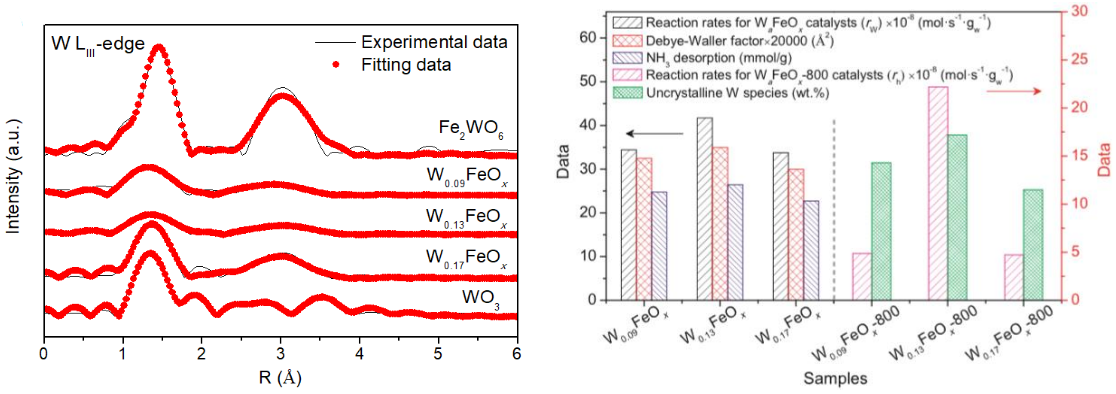
发表文章：

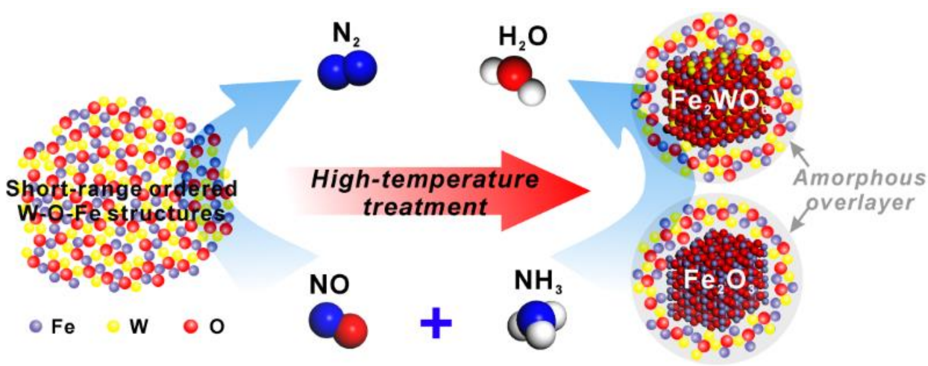
Ying Xin, Hao Li, Nana Zhang, Qian Li, Zhaoliang Zhang,* Xiaoming Cao,* P. Hu, Lirong Zheng, and James A. Anderson*. Molecular-Level Insight into Selective Catalytic Reduction of NO_x with NH_3 to N_2 over a Highly Efficient Bifunctional V_a-MnO_x Catalyst at Low Temperature. ACS Catalysis 8 (2018), 4937-4949.

具有高热稳定性短程有序 W-O-Fe 结构活性位的 SCR 催化剂

氮氧化物（NO_x）是主要的大气污染物之一，它会引起酸雨、光化学烟雾、大气臭氧浓度升高、雾霾等环境问题，并对人类健康产生极大危害。氨选择性催化还原（NH_3-SCR）是公认最有效 NO_x 去除技术，但目前商业化 NH_3-SCR 催化剂 V_2O_5-WO_3/TiO_2 中的活性组分钒具有毒性，且活性温度窗口狭窄，高温时不稳定等缺点严重制约了其广泛应用。开发新型、高效、高热稳定的 SCR 催化剂对于 NOx 污染治理具有十分重要的意义。济南大学化学化工学院的一个研究组设计制备了具有短程有序 W-O-Fe 结构的 W_aFeO_x 复合氧化物催化剂，对其 NH_3-SCR 催化活性、结构及活性位进行了深入研究，发现短程有序 W-O-Fe 结构是 W_aFeO_x 复合氧化物催化剂的活性位，且经 800 ºC 高温处理后，W-O-Fe 结构仍在结晶相的表面存在，从而保证了催化活性，相关成果发表在 2018 年 2 月 9 日的《Applied Catalysis B: Environmental》上。

该研究组发现利用简单的共沉淀法得到结晶较差的 W_aFeO_x 复合氧化物催化剂，其中，$W_{0.13}FeOx$（W 的含量为 0.13 wt.%）的表观 SCR 活性和内在活性（反应速率）高于其他样品。利用 X 射线吸收精细结构谱（XAFS）、氢气程序升温还原（H_2-TPR）、氨程序升温脱附（NH_3-TPD）、X 射线衍射（XRD）、透射电子显微镜（TEM）、高角环形暗场扫描透射电子显微镜（HAADF-STEM）等表征结果显示 W_aFeO_x 复合氧化物催化剂的内在活性、短程有序 W-O-Fe 结构的量以及催化剂的酸量呈正相关，说明具有高热稳定性的短程有序 W-O-Fe 结构是催化活性位，通过提高催化剂的酸量来提高内在活性。





利用北京同步辐射装置（BSRF）上的 XAFS 实验证明了 W_aFeO_x 中存在大量短程有序 W-O-Fe 结构，且其数量与催化剂的内在活性呈正相关，排除了 Fe_2O_3、Fe_2WO_6 微晶或 Fe_2O_3 和 Fe_2WO_6 协同作用对 SCR 活性的促进作用，从而证明短程有序 W-O-Fe 结构是催化剂的活性位。

该工作为 SCR 催化剂构效关系的研究和设计、制备具有高热稳定性的脱硝催化剂提供了科学的线索。在这项研究工作中，北京同步辐射实验室的 XAFS 站帮助该研究组揭示了 W_aFeO_x 复合氧化物催化剂的短程有序活性位。济南大学化学化工学院教授、该研究组组长张昭良教授这样描述他们的工作："我们的前期工作（Environ. Sci. Technol. 2012, 46, 9600-9605. 2012 Highlights, BSRF 和 ESI 高被引论文）证实复合氧化物中的短程有序结构可作为 SCR 催化剂的活性位，但由于其常处于亚稳态，极易受到高温影响而失活，严重制约了高效非晶催化剂在 SCR 技术中的应用。该工作报道了具有高热稳定性的短程有序 W-O-Fe 结构活性位，有望解决非晶催化剂实际应用中对恶劣运行条件耐受性差的问题。这一研究结果是继 2012 年我们在 XAFS 实验站（BSRF）证实 Ce-O-Ti 短程有序活性位后，在 Fe 基复合氧化物中确定了短程有序 W-O-Fe 结构活性位的存在，并进一步证明了短程有序活性位在非晶复合氧化物 SCR 催化剂中具有普适性。由此，对于复杂非晶复合氧化物催化剂中活性位及构效关系的研究，XAFS 是一个强有力的实验手段"。

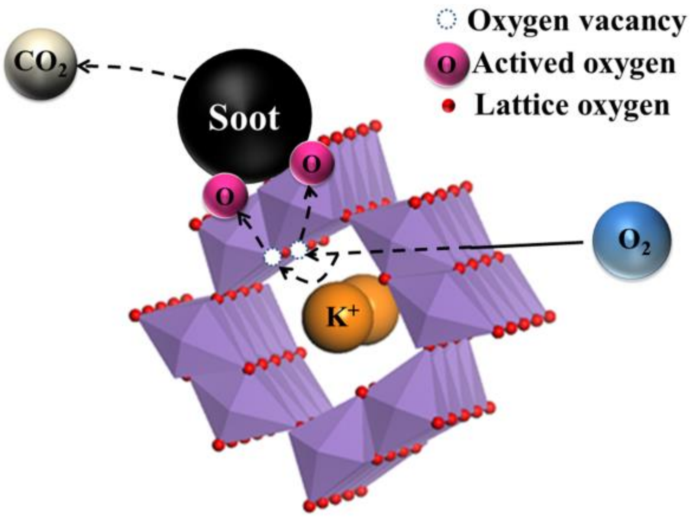
发表文章：

Ying Xin, Nana Zhang, Qian Li, Zhaoliang Zhang,* Xiaoming Cao,* P. Hu, Lirong Zheng, Yuewu Zeng, and James A. Anderson*. Selective catalytic reduction of NO_x with NH_3 over short-range ordered W-O-Fe structures with high thermal stability. Applied Catalysis B: Environmental 229 (2018) 81-87.

K 基 Soot 燃烧催化剂的“隔山打牛”

Soot 催化燃烧是满足重型柴油车国六排放标准的必备技术，一般采用贵金属催化剂，碱金属 K 被认为是助剂，用于改善 Soot 与催化剂的接触。但是，前期的工作表明，K 在本质上可充当催化活性物种（Journal of Catalysis, 2010, 271: 12; Environmental Science & Technology, 2010, 44: 8254; Scientific Reports, 2014, 4: 4725）。济南大学化学化工学院的一个研究组对 K 的活性作用进行了深入的研究，相关成果发表在 2018 年 9 月 15 日的“Applied Catalysis B-Environmental”上。

该研究组设计制备了具有隧道结构的 $K_xMn_8O_{16}$ 型隐钾锰矿材料，将 K 离子放到孔道结构中，并用水洗掉外表面 K，使 K 离子与 Soot 颗粒物理隔绝，结果仍发现了较好的活性和热稳定性，而且 K 的含量与碳烟的本征燃烧速度呈现正相关性。将高氧化还原性的 Mn 换成相对惰性的 Ti，即 $K_xTi_8O_{16}$ 型材料，可得到相似的结论，但活性比 $K_xMn_8O_{16}$ 低。这一方面说明了 K 是活性物种成分而不仅仅是接触促进剂，另一方面，由于 K 离子限域在结构孔道中，避免了在含水气氛中的流失，从而提高了催化剂的稳定性。



利用北京同步辐射装置(BSRF)获得了K、Mn和Ti的K边XANES谱和Mn和Ti的K边EXAFS谱，证明了$K_xMn_8O_{16}$中的K离子并不像负载型的K离子可以在表面自由迁移，而是限域在隐钾锰矿的孔道中，与Mn-O物种有弱的相互作用，是相对自由的K离子物种。但是K与Ti-O物种有强相互作用并成键，因此在$K_xTi_8O_{16}$中的K离子是一种固定的K物种。进一步，根据$K_xMn_8O_{16}$中K的K边XANES谱，发现K离子与Mn-O之间存在电子相互作用，形成*d-sp*杂化轨道，使K^+电子密度增加，具有类似过渡金属d轨道的氧化还原性，从而能活化气相氧，催化Soot燃烧。但是，类似的现象并不出现在$K_xTi_8O_{16}$中，从而导致了活性的较大不同。

波兰雅盖隆大学（Jagiellonian University）的Piotr Legutko博士在最新发表的“Topics in Catalysis, 2019, doi: 10.1007/s11244-019-01132-x”论文中大篇幅评论该工作：···碱金属催化剂

的主要问题是有效控制它们的移动性，这对催化活性是关键的因素，但是同时也有稳定性问题。一个避免碱金属不可控流失的可能途径是，将碱金属稳定在过渡金属的结构中。

这个研究为高活性和高稳定性的碱金属 Soot 燃烧催化剂开发开辟了道路。在这一研究工作中，同步辐射光源帮助该研究组揭开了 K 离子活性位的神秘面纱。济南大学化学化工学院博士生导师、该研究组组长张昭良教授这样描述他们的工作：“在该催化体系中，K 离子本身并不与 Soot 接触，而是通过与 K 离子相连的 O-M（M：载体金属）表面的活性氧与 Soot 发生作用，也就是说 K 离子隔着 O-M“山”，打到了 Soot“牛”，该工作打破了 K 仅作助剂的常规认识。更亮的同步辐射光束线将必定会有助于 K 活性位精细结构的深度解析”。

发表文章：

Taizheng Liu, Qian Li, Ying Xin, Zhaoliang Zhang*, Xingfu Tang, Lirong Zheng, Pu-Xian Gao*. Quasi free K cations confined in hollandite-type tunnels for catalytic solid (catalyst)-solid (reactant) oxidation reactions.Applied Catalysis B：Environmental, 232, 2018, 108-116.

金属有机框架材料限域作用制备单原子催化剂及其高效光解水

单原子催化剂因其最大化的原子利用率，在氧化、还原、水煤气转化、电催化等方面表现出优异的催化性能。但是，由于单原子具有高的表面能且容易团聚的特点，单原子催化剂在催化反应过程中保持稳定是一个重大的挑战。因此，其关键是要开发与单原子具有强相互作用的合适载体。中国科技大学江海龙教授（通讯作者）等人，报道了 MOF 稳定单原子催化剂的制备，并研究了其光催化性能。相关成果以“Single Pt Atoms Confined into a Metal–Organic Framework for Efficient Photocatalysis”为题于 2018 年 1 月 8 日在线发表在 Advanced Materials。

该研究组发展了一种利用卟啉基 MOFs 的氮位点来稳定单原子 Pt 催化剂的方法。通过借助北京同步辐射装置（BSRF）的 1W1B 线站，对单原子 Pt 的硬 X 射线吸收谱（XAFS）进行了采集和数据分析。首先从 X 射线近边吸收谱图（XANES）上分析证实了 Pt 元素以弱氧化态形式存在；进一步通过扩展 X 射线吸收精细结构 (EXAFS) 谱图解析和拟合，确认了样品中 Pt 原子与 N 原子配位模式，同时不存在 Pt-Pt 键。上述表征为证实单原子 Pt 催化剂的成功构筑提供了可靠的实验证据。

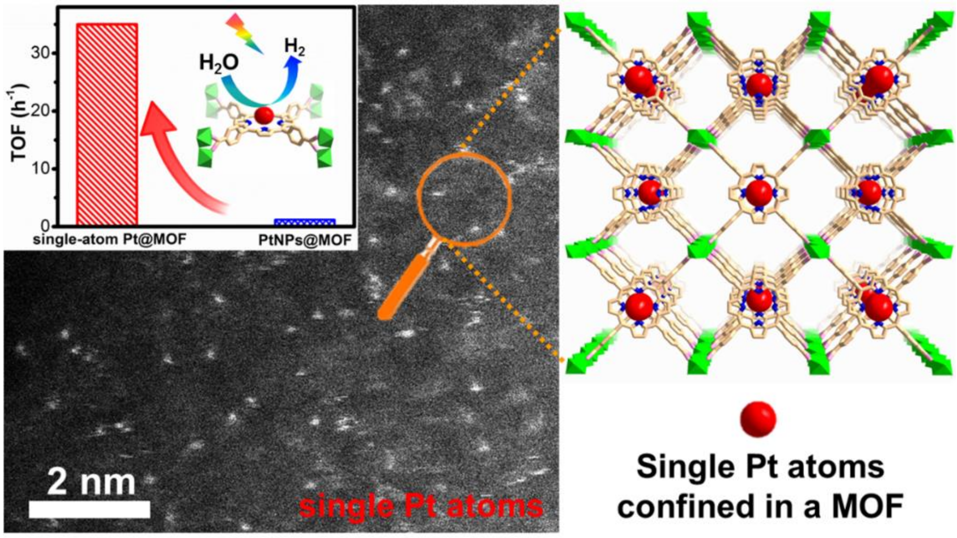


图 1. 示意性说明 MOFs 限域单原子 Pt 的结构及其光催化过程。

更有意义的是，由于单个 Pt 原子能够使原子利用率最大化，优化之后的单原子 Pt 催化剂—Al-TCPP-0.1Pt 表现出极好的可见光条件下的光催化产氢效率，其转换频率(TOF) 为 30 h^{-1}，是相应 MOF 稳定的 Pt 纳米颗粒催化剂的 30 倍。超快光谱表征和密度泛函计算表明，单原子 Pt 引入 Al-TCPP 之后形成了高效的电子转移通道并且提高氢结合能，从而显著提高光催化产氢活性。这个工作不仅提供了 MOF 稳定单原子的制备途径，并且为制备更高效 MOF 光催化剂提供了参考。

通过该工作可以看出,基于 MOF 体系的金属单原子催化剂的制备研究具有很大潜力和优势。同时该工作体现出了同步辐射的先进表征技术在单原子催化剂的表征和结构解析的至关重要的作用。

发表文章：

Xinzuo Fang, Qichao Shang, Yu Wang, Long Jiao, Tao Yao, Yafei Li, Qun Zhang, Yi Luo, and Hai-Long Jiang*, Single Pt Atoms Confined into a Metal–Organic Framework for Efficient Photocatalysis. Adv. Mater. (30)2018, 1705112.

用于高效电化学锂/钠离子存储的黑磷量子点/碳化钛 MXene 纳米片复合材料

对电极材料进行纳米结构设计并探索新型高效的储能机理是开发高性能可充电电池的关键。以黑磷量子点(BPQDs)和碳化钛纳米片(TNSs)分别作为电池型和赝电容材料，提出新型电池电容双模型储能(DMES)机理，设计 BPQD/TNS 复合负极材料，并将其应用于锂离子电池和钠离子电池。尤其是固定在 TNSs 上的 BPQDs 作为电池型组分，在循环过程中可以提高其导电性及缓解应力，具有高容量及稳定的储能性能。同时，两种组分之间的 P-O-Ti 界面键引起了赝电容 TNS 组分发生进一步原子电荷极化，增强了电荷吸附和有效的界面电子转移，提供了更高的赝电容值和快速的能量储存。DMES 机理通过 X 射线光电子能谱，北京同步辐射装置(BSRF) 1W1B-XAFS，扩展的 X 射线吸收精细结构光谱(EXAFS)，4B7A-中能实验站 X 射线近吸收谱(XANES)，密度泛函理论计算和动力学分析得到证实。因此，复合电极表现出优越的电池性能，尤其在锂离子电池性能方面，例如在 100 mA g^{-1} 电流密度时，具有 910 mAh g^{-1} 高容量，在超长 2400 圈充放电循环中容量保持率约为 100%，同时具有高的倍率性能，是目前基于黑磷的复合材料中最佳的综合电池性能。相关的研究成果发表在 2018 年 8 月 1 日的《Advanced Energy Materials》上。

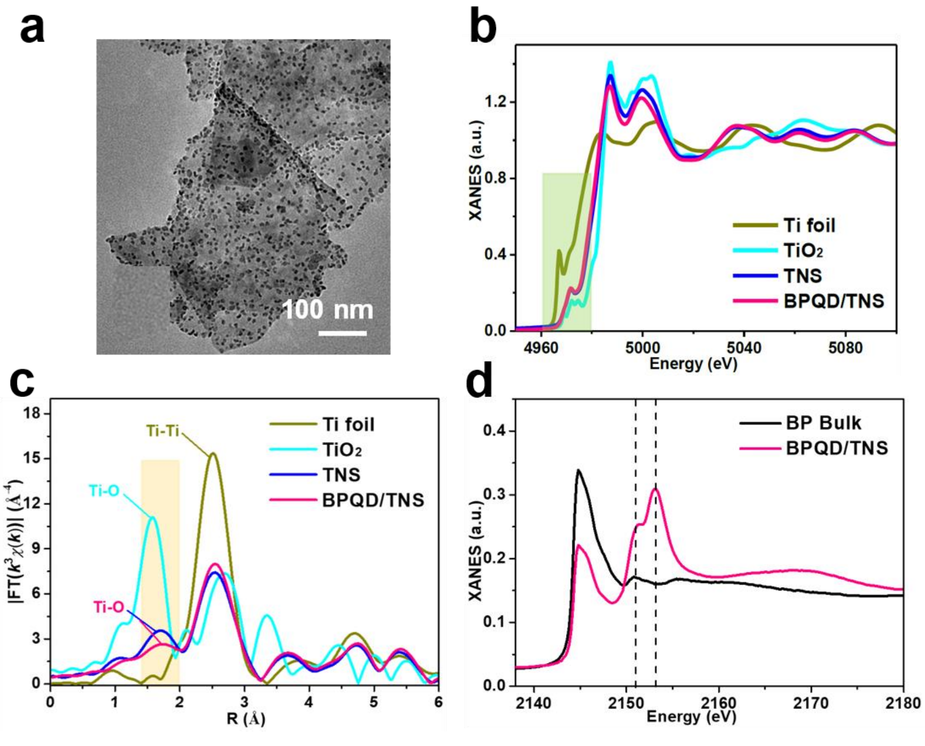


图 a 为 BPQD/TNS 复合材料 TEM 照片，由图 a 可知，BPQDs 均匀的分散在 TNSs 表面。该课题组进一步采用 XANES 和 EXAFS 技术在原子水平上给出复合材料结构信息。图 b 中的 BPQD/TNS 复合材料和 TNS 的 XANES 曲线显示了它们在 TiO_2 和金属钛箔之间的近边吸收

能，表明 Ti 价态在两个参比之间。在图 b 中，样品的 FT-EXAFS 显示 1.5-3.0 范围内的两个峰，分别对应于 Ti-O(C)和 Ti-Ti 键。BPQD/TNS 复合材料的 FT-EXAFS 在 TNSs 和 TiO_2 上呈现出类似的振荡(Ti-O 键，黄色区域)，具有显著减小的幅度，表明 BPQD/TNS 复合材料的局部原子排列不同。为了获得定量结构信息，进行扩展边分析计算。BPQD/TNS 复合材料中的 Ti 原子具有比 TNSs 中更高的配位数(7)和更长的 Ti-O(C)平均键长(2.08Å)，这是因 P 原子的存在形成 P-O-Ti 键。图 c 可以看出：黑磷的白线峰值为 2145.0 eV，来自 P 1s→P 3p 的电子跃迁。对于 BPQD/TNS 样品，P *K* 边吸收光谱的另外两个主要吸收特征峰在 2151 和 2153 eV，对应含有 O 和 P 的基团，电子跃迁来自 P 1s→O 2p。BPQD/TNS 复合材料的 P *K* 边分析进一步证实了复合材料中存在 P-O-Ti 界面键。在 TNSs 和 BPQDs 界面处形成的 P-O-Ti 键有利于复合材料的界面电子转移和界面结构稳定性，提高了 BPQD/TNS 电极的电化学性能。

发表文章：

Ruijin Meng*, Jimei Huang*, Yutong Feng, Lianhai Zu, Chengxin Peng, Lirong Zheng, Lei Zheng, Zhibin Chen, Guanglei Liu, Bingjie Chen, Yongli Mi & JinhuYang, Black Phosphorus Quantum Dot/Ti_3C_2 MXene Nanosheet Composites for Efficient Electrochemical Lithium/Sodium‐Ion Storage, Advanced Energy Materials, 8 (26), 2018, 1801514.

微波法急速制备石墨烯基金属单原子电催化剂

单原子催化剂兼具了均相催化剂和传统异相催化剂的优势，如最大原子利用率、高活性、高选择性、易与产物/溶剂分离等，是近几年来催化领域的研究热点和前沿。石墨烯基金属单原子催化剂因具有高比表面积、高导电性、高（电）化学稳定性而被广泛应用于电催化领域。对于该类材料，行之有效的合成方法是探索和实现其电催化性能的重要前提，但是目前该类材料的制备以热解法为主，存在耗时、耗能、金属单原子易发生团聚等问题。因此，针对石墨烯基金属单原子电催化剂，开发高效、简单、快速的合成方法具有重要的意义。鉴于此，美国加州大学洛杉矶分校的段镶锋课题组、黄昱课题组与北京同步辐射装置的研究人员合作，首次提出了采用瞬时微波加热（2 秒）来快速制备多种石墨烯基金属单原子材料的新方法，具有高效性、普适性、简易性、可量产化等优点。相关研究成果发表在 2018 年 7 月 17 日的《Advanced Materials》上。

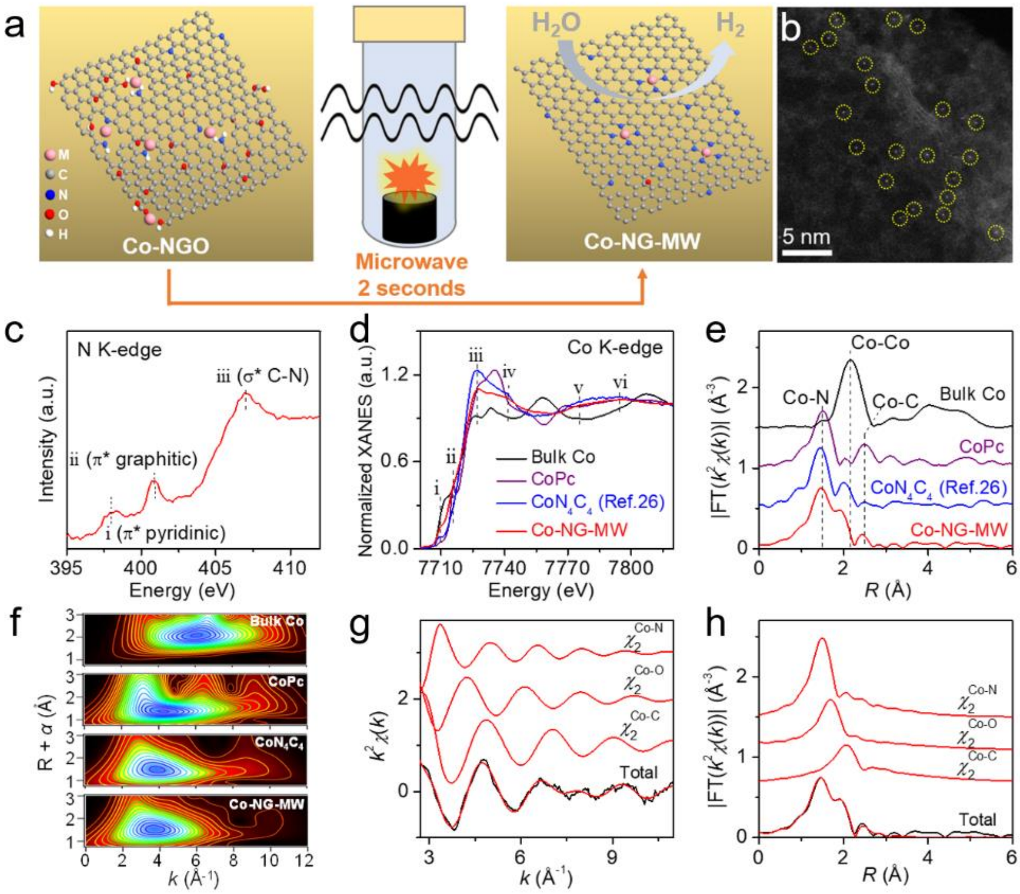


图 1 石墨烯基钴单原子合成与结构表征。（a）微波合成示意图；（b）球差电镜图；（c-h）同步辐射 X 射线吸收谱表征。

研究人员首先将金属盐与氨基化氧化石墨烯溶液进行混合，利用金属离子与氨基之间的

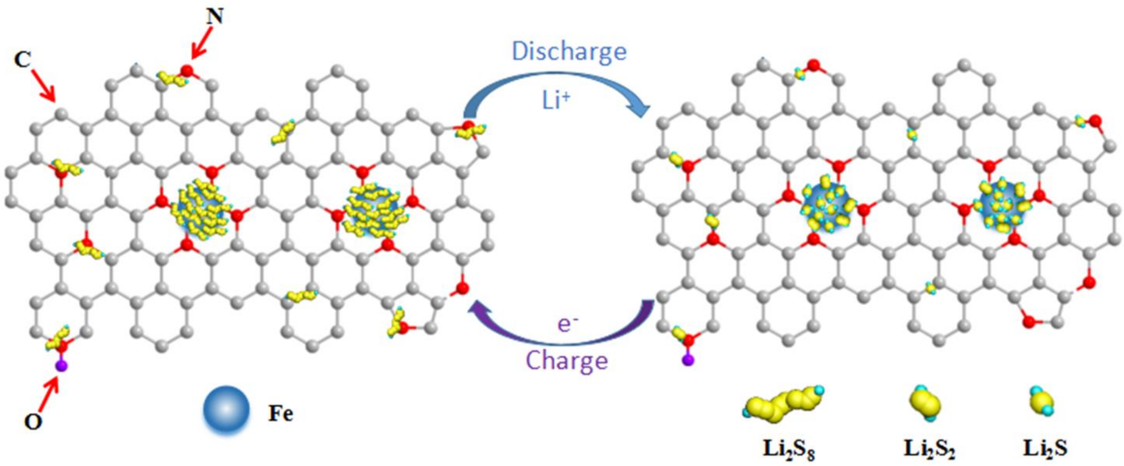
强相互作用力，将金属离子均匀分布于氧化石墨烯片层表面，然后将经干燥处理后的混合物置于家用微波炉中，在 1000 W 下微波处理 2 秒；在微波加热过程中，石墨烯吸收微波而被激发，瞬间产生高温，以一步法同时实现石墨烯的还原、氮元素的掺杂以及金属原子在石墨烯晶格中的嵌入。接着，利用北京同步辐射装置 X 射线吸收谱表征技术，对金属的单原子分布形式、金属原子价态、电子结构、配位结构（包括配位原子种类、配位数、键长等结构参数）进行了精细分析，并结合球差电镜证实了不同种金属（钴、铜、镍等）均以单原子形式分布于石墨烯晶格中。而且，相较于经传统法制备的金属单原子，经微波法合成的金属单原子的配位环境更加无序化，缺陷程度更高。经对比发现，钴原子材料可作为高效电催化剂应用于电解水产氢反应，其初始过电位趋近于 0 mV，Tafle 斜率为 80 mV dec^{-1}，并具有良好的电化学稳定性。该项工作为石墨烯基单原子电催化材料的合成以及金属负载量的提升提供了新的思路和有效途径，并为精确的构效关系研究和性能调控奠定了基础。

发表文章：

Huilong Fei, Juncai Dong, Imran Shakir, Yu Huang, Xiangfeng Duan, et al. Microwave‐Assisted Rapid Synthesis of Graphene‐Supported Single Atomic Metals. Advanced Materials, 2018, 30, 1802146.

单原子催化用于锂硫电池的多硫化合物快速转化及 Li_2S 的活化

锂硫电池具有很高的理论比容量(1675mAh g^{-1})和理论比能量(2600 $Whkg^{-1}$)，远高于传统锂离子电池，被认为是最具前景的二次电池之一。 锂硫电池的反应中间产物多硫化合物(Li_2S_x, $4 \leqslant x \leqslant 8$) 在锂硫电池中扮演着重要的角色，一方面，锂硫电池容量的发挥依赖于多硫化合物在电解质中的溶解度；另一方面，溶解的多硫化合物将穿梭到负极，与负极反应生成短链的多硫化合物和硫化锂，形成所谓的穿梭效应，导致活性物质的损失。北京理工大学化学与化工学院的课题组率先将单原子铁应用于锂硫电池正极中，并对其展开了深入研究。



该课题组发现单原子铁可以促进锂硫电池的多硫化合物高效吸附以及转化，而且可对锂硫电池放电产物 Li_2S 成核/结晶的实现纳米化调控，从而实现 Li_2S 电活化。相对于传统的多孔碳材料，单原子催化剂负载 S 正极，展现了优异的循环稳定性。

利用穆斯堡尔谱和在北京同步辐射装置（BSRF）开展的光电子能谱，发现铁单原子主要是以$Fe-N_4$单原子形式存在，$Fe-N_4$活性位点结构对应D1、D2和D3 三个构型，其中D1 对应于亚铁-氮配位低自旋组态(S=0)， D2对应于亚铁-氮配位中自旋组态(S=1)，D3 对应于亚铁-氮配位。

本研究为锂硫电池正极新型 C/S 正极材料的开发，并为锂硫电池中单质硫多电子电催化机理的研究提供新的思路。

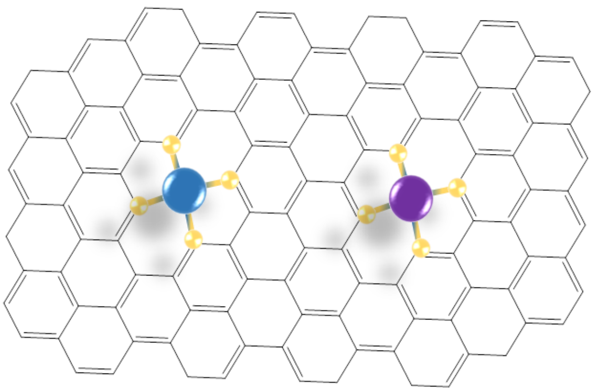
发表文章：

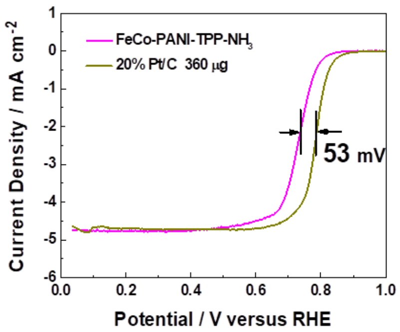
Zhenzhen Li, Lei Zhou, Qi Ge, Renjie Chen,*Mei Ni, Wellars Utetiwabo, Xiaoling Zhang, Wen Yang* Atomic Iron Catalysis of Polysulfide Conversion in Lithium–Sulfur Batteries,ACS Appl. Mater. Interfaces,10 (2018), 19311-19317.

多孔炭负载的双金属-氮配位活性位点用于酸性电解液中的氧还原催化

质子交换膜燃料电池阴极氧气电还原过程为 4 电子过程，动力学过程缓慢，故其用于阴极处铂催化剂的用量是阳极处十倍之多。 因此，开发成本低廉、高效且稳定的非贵金属氧还原催化剂具有重要的科学意义和应用价值。

传统铁-氮掺杂（Fe/N/C）催化剂，经常伴生大量 Fe_3C 和 Fe 副产物，导致其电催化活性较低、稳定性较差等问题。针对这些问题，我们提出能否通过设计具有金属-氮配位（$M-N_4$）单活性位点的 Fe/N/C 非贵金属氧还原催化剂，来解决这些问题？北京理工大学化学与化工学院的课题组将铁-钴双金属单原子催化剂应用于氧气电还原催化中，并对其展开了深入研究。





该课题组采用硬模板法制备多孔炭材料负载的铁/钴双金属单原子氧还原催化剂在酸性电解质中双金属掺杂较单金属掺杂性能更高，其电催化性能相对于商业化的 Pt/C 催化剂性能 $E_{1/2}$ 只相差 53 mV。

我们借助穆斯堡尔谱、在北京同步辐射装置开展的 X 射线吸收精细结构等谱学技术研究催化剂活性位点结构和构型，发现双金属单原子催化剂铁以 $Fe-N_6$ 形式存在，而钴以 $Co-N_4$ 形式存在。令人遗憾的是我们有关于 Fe-Co 双金属是否存在键合关系，未能给出清晰的答案。

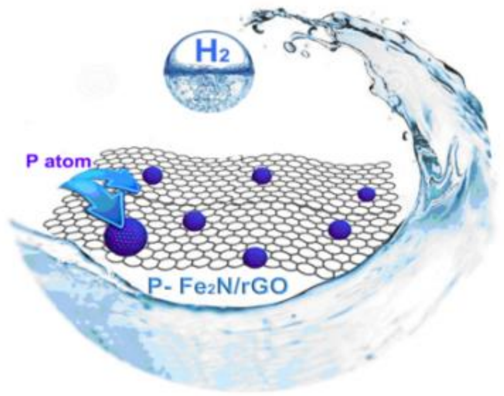
本研究不但为非贵金属氧还原催化剂的新活性位点的鉴定奠定基础，更为重要的是揭示出双金属活性比单原子催化展现了更优良的氧还原电催化性能。

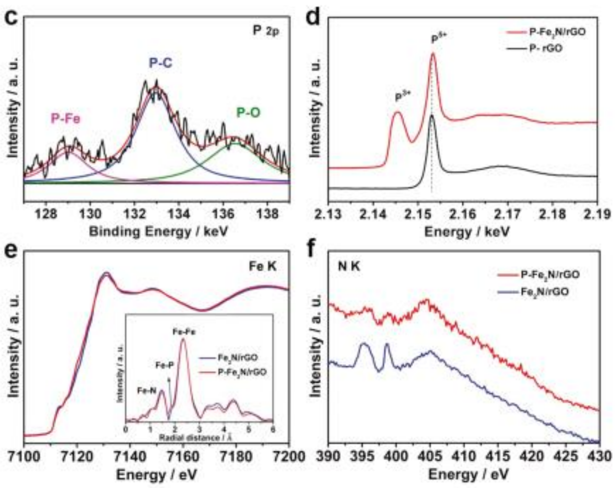
发表文章：

Qiao Zhang, Junhu Wang, Peiwen Yu, Fei Song, Xue Yin, Renjie Chen, Hailiang Nie, Xiaoling Zhang, and Wen Yang*. Porous carbon electrocatalyst with exclusive metal-coordinate active sites for acidic oxygen reduction reaction, Carbon,132 (2018), 85-84.

生长有无定型 FexP 包覆的 Fe2N 纳米颗粒的还原氧化石墨烯复合材料应用于高效的电催化析氢反应

氢能被认为是一种目前极有前景的清洁能源，而电化学析氢反应（HER）是获取氢能源非常重要的途径之一。然而，尽管传统的铂基催化剂性能优异，其稀少的储量和高昂的价格限制了其商业化。因此，设计开发具有高效析氢性能、原料储量丰富的非贵金属催化剂成为必然。黑龙江大学无机功能与材料重点实验室付宏刚课题组对生长有无定型 Fe_xP 包覆的 Fe_2N 纳米颗粒的还原氧化石墨烯复合材料的电催化析氢性能进入了深入的研究，相关的研究成果发表在 2018 年 8 月 2 日的《Small》上。





该研究组采用简单的低温磷化方法制备了生长有无定型磷化铁包覆的氮化铁纳米颗粒的还原氧化石墨烯复合材料(P-Fe_2N-rGO)，在研究工作中，北京同步辐射装置和上海光源帮助该研究组证实了无定型的 Fe_xP 层存在。磷化铁层的存在既提高氮化铁材料在酸性电解液中的稳定性，也为材料提供了更多的催化活性位点，功函和理论计算结果都证实该材料具有类铂的结构以及电化学析氢反应催化特性。将其作为电化学析氢反应的催化剂，该材料在酸性条件下具有较低的过电势和塔菲尔斜率，并且具有优异的循环稳定性，有希望成为替代贵金属的析氢反应催化剂。

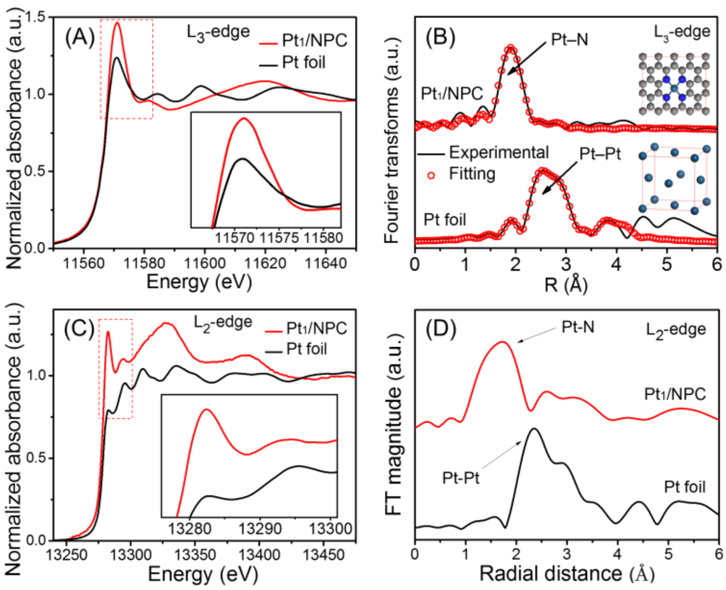
发表文章：

Peng Yu, Lei Wang*, Ying Xie, Chungui Tian, Fanfei Sun, Jingyuan Ma, Miaomiao Tong, Wei Zhou, Jinghong Li, Honggang Fu*, High-Efficient, Stable Electrocatalytic Hydrogen Evolution in Acid Media by Amorphous Fe_xP Coating Fe_2N Supported on Reduced Graphene Oxide, Small, 2018, 14, 1801717.

光化学固相还原法制备高负载量单原子铂催化剂用于氢气析出和氧气还原反应

对于新能源体系中重要的电化学反应，如氢气析出（HER）、氧气还原（ORR）及甲醇氧化等，贵金属铂表现出优异的电催化活性。然而，贵金属的高价格和低储量严重限制了其大规模的商业化应用。为了提高铂的利用率，研究者们将其以单原子形式均匀分散在碳材料或者过渡金属氧化物等载体上，制备了高活性的单原子催化剂，从而有效地降低了这类催化剂的成本。目前，制备单原子铂催化剂的方法有溶液化学法，原子层沉积法等。其中，传统的溶液化学法是目前制备贵金属单原子材料的主流之一，但是金属离子和原子在前驱体溶液中的扩散迁移会导致许多纳米晶体的形成。因此通过这种方法获得的催化剂，贵金属原子的团聚非常严重。而原子层沉积法获得的催化剂，也只能在极低的负载量下（一般小于 0.4 wt%）保持原子级分散，这严重限制了贵金属铂的电催化性能。因此，高的铂负载量和均匀的单原子分散，是发展单原子铂催化剂的关键因素。

有鉴于此，北京化工大学材料电化学过程与技术北京市重点实验室的刘景军教授和王峰教授团队，报道了一种光化学固相还原法来制备原子铂催化剂。简单利用掺氮的碳材料作为载体，吸附贵金属酸根离子或盐离子，然后将获得的前驱体粉末，用一定强度的紫外线照射一段时间，即可得到高负载量的贵金属原子催化剂。铂的负载量达到了 3.8 wt%，且完全处于单原子的分散状态。在酸、及碱性介质中，该催化剂具有优异的 HER 和 ORR 电催化性能。该方法具有制备过程非常简单且易于批量制备的显著特点，也适合制备其他贵金属如 Au、Ru、Ir 等单原子催化剂。该方法有效避免了贵金属单原子在水相制备、洗涤以及干燥过程导致的金属原子的团聚现象，可以实现批量制备。相关的研究成果发表在 2018 年 7 月 31 日的《ACS Catalysis》上。



利用北京同步辐射装置（BSRF，1W1B 线站）获得 Pt_1/NPC 样品的 X 射线吸收光谱（XAS），研究单原子铂的配位化学结构。图 A 显示了样品的 Pt L_3 边归一化 XANES 光谱。可以看出，单原子 Pt 样品的白线(WL)强度明显高于 Pt foil 的 WL 强度，说明相比于 Pt foil，单原子 Pt 有更多未被占据的 5d 轨道（$5d_{5/2}$ 或 $5d_{3/2}$）。此外，EXAFS–FT 曲线用于分析单原子 Pt 的原子配位结构。如图 B 所示，Pt foil 在~2.59 埃处显示出金属铂的 Pt–Pt 键，而 Pt_1/NPC 没有表现出这种 Pt–Pt 键的特征峰。但 Pt_1/NPC 在~1.93 埃处显示出归属于 Pt–N 键的峰，说明 Pt 原子与 N 原子键合。此外，Pt L_2 边光谱可以提供更多关于电子轨道水平上 Pt–N 键形成的信息。如图 C 和 D 所示，与 Pt foil 的 L_2 边相比，Pt 单原子也具有高得多的 WL 强度。此外，对于 Pt_1/NPC，明显的 Pt–N 键存在以及 Pt–Pt 键的消失，这些结果与 L_3 边得到的结果一致。然而，如图 C 所示，在 L_2 边缘处记录的 Pt foil 的 WL 强度非常弱，而在 Pt_1/NPC 中单原子 Pt 的 WL 强度非常强，这说明相对于 $5d_{3/2}$ 轨道充满的金属 Pt 来说，单原子 Pt 具有更多的空 $5d_{3/2}$ 轨道，来接受 Pt $2p_{1/2}$ 轨道的电子跃迁。因此，单原子 Pt 中更多未填充的 Pt $5d_{3/2}$ 轨道，可能与 Pt_1/NPC 中 Pt–N 配位形成有关。为了更有力地证明 Pt_1/NPC 中形成了 Pt–N_4 键，利用图 B 插图中所示的用 Pt–N_4 结构模型，做了 EXAFS 数据拟合。在 R 空间从 1.5 到 3.5 埃的范围，Pt 原子的第一壳层的拟合曲线与实验数据十分吻合，进一步证实了 Pt_1/NPC 中 Pt–N_4 键的形成。同步辐射技术很好地帮助了我们，从原子层面了解活性中心的化学配位结构，是一种表征纳米材料物理化学结构的有效手段。

发表文章：
Tuanfeng Li, Jingjun Liu,* Ye Song and Feng Wang*, Photochemical Solid-Phase Synthesis of Platinum Single Atoms on Nitrogen-Doped Carbon with High Loading as Bifunctional Catalysts for Hydrogen Evolution and Oxygen Reduction Reactions. ACS Catalysis 8 (2018) 8450-8458.

配位高度不饱和的晶格应变低温甲烷化催化剂的制备及构效关系研究

天然气的主要成分为甲烷，是一种低碳、高热值、燃烧无烟无尘的清洁能源，可用于替代煤和石油等化石能源以及解决其带来的环境污染问题，故在世界能源结构中发挥着日益重要的作用。目前，工业上主要通过合成气在 Ni 基催化剂上进行甲烷化反应来生产合成天然气。在热力学上，甲烷化反应在低温下有利，但镍催化剂通常在 500 K 以下催化活性很低。理论计算表明，CO 解离能垒在低配位的 Ni 晶面较低，而晶格应变能够进一步促进 CO 的解离，有助于实现低温甲烷化反应。然而，常规催化剂制备技术难以得到具有上述结构特征的催化材料。复旦大学化学系上海市分子催化和功能材料重点实验室乔明华教授课题组与北京石油化工科学研究院宗保宁教授课题组合作，使用急冷技术制备了配位高度不饱和且具有晶格应变的骨架镍（rapid quenched skeletal nickel, RQ Ni）催化剂(见图 1)，该催化剂显示了优异的低温甲烷化催化性能，研究成果发表在 2018 年 1 月 2 日的《ACS Catalysis》上。

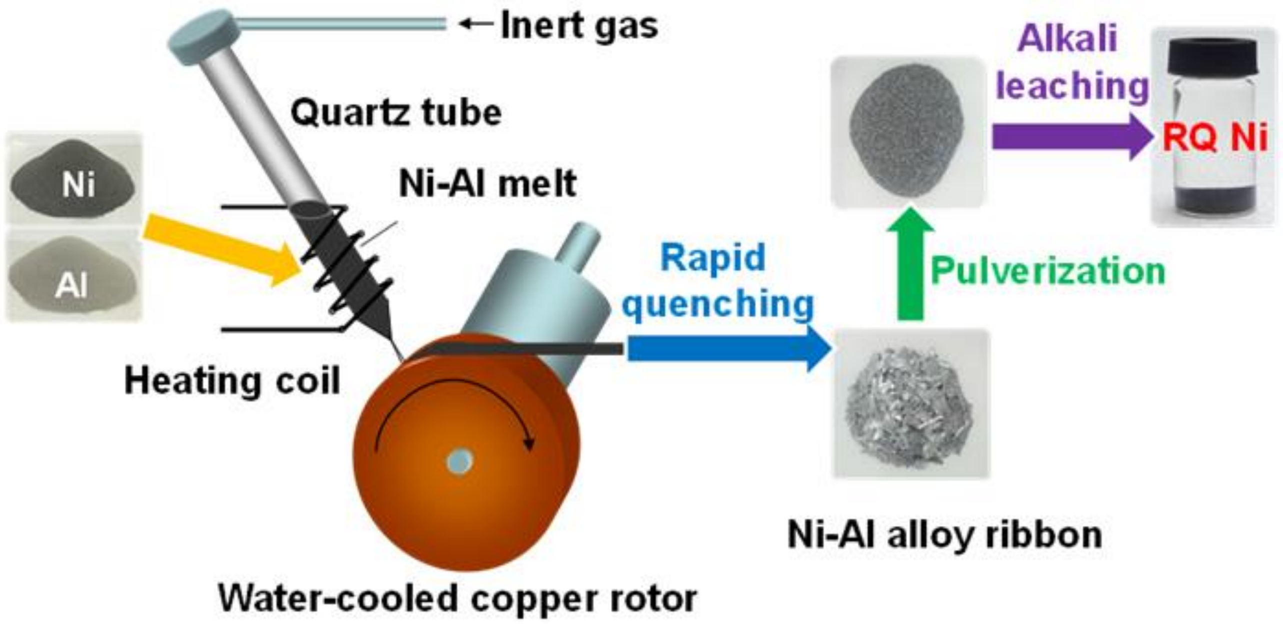


图1 RQ Ni催化剂的制备过程示意图

该研究组利用北京同步辐射装置（BSRF）的1W1B-XAFS实验站的X射线吸收技术对RQ Ni和Raney Ni的微观结构进行了研究。从二者的Ni K边$k^3\chi(k)$数据傅里叶变换后的径向分布函数图可见（图2左），二者与Ni箔标样具有相似的径向分布函数形状，但是主峰的位置和振幅有差异。RQ Ni催化剂的Ni–Ni主峰出现在2.20 Å处，大于Ni箔标样（2.16 Å）和Raney Ni催化剂（2.17 Å），表明RQ Ni中存在晶格应变，并得到HRTEM和XRD的支持。通过对三者的Ni K边第一配位壳层进行拟合（图2右），发现Ni箔标样的Ni–Ni间距为2.48 Å，而RQ Ni和Raney Ni催化剂的Ni–Ni间距分别为2.51和2.49 Å。此外，拟合得到RQ Ni催化剂的Ni配位数为5.13，低

于Raney Ni催化剂的6.78和Ni箔标样的12，表明其配位高度不饱和。上述结果表明，使用急冷法制备的RQ Ni催化剂存在晶格应变，同时有更多的晶格缺陷，有望成为高效的低温甲烷化催化剂。

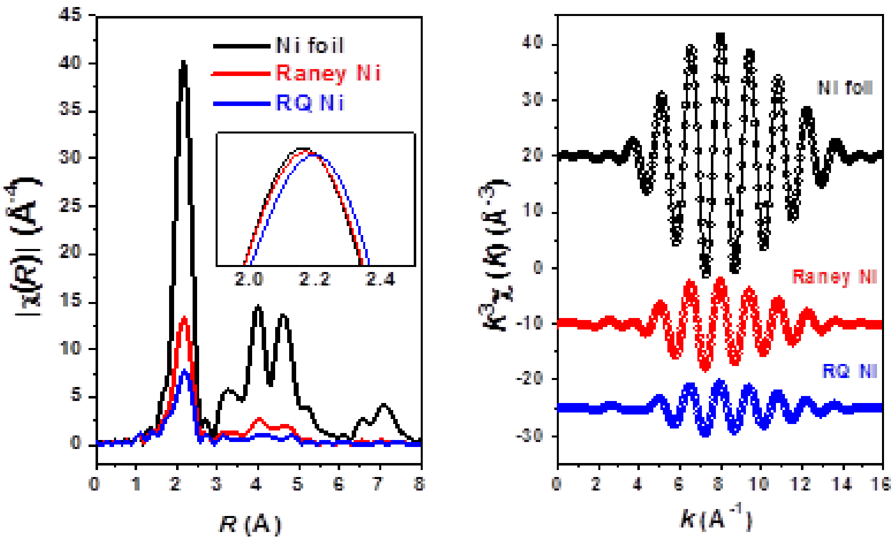


图 2 （左）RQ Ni 和 Raney Ni 催化剂和 Ni 箔标样的 Ni K 边 $k^3\chi(k)$数据经傅里叶变换后的径向分布函数，插图为放大了的 Ni 箔标样、RQ Ni 和 Raney Ni 的 Ni−Ni 第一配位壳层位置；（右）RQ Ni、Raney Ni 催化剂及 Ni 箔标样的实验 $k^3\chi(k)$数据(○)及拟合曲线(—)

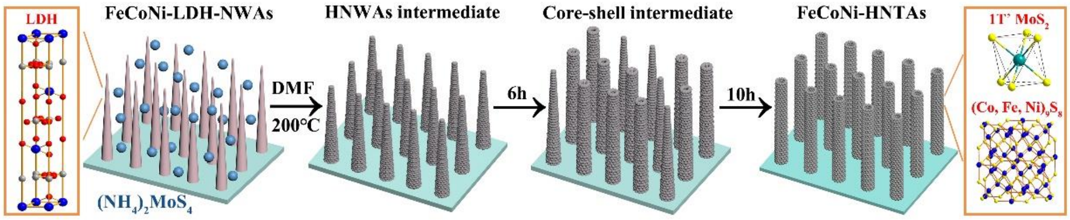
在低温甲烷化反应中，RQ Ni 催化剂显示出优异的催化活性和甲烷选择性。其活性不仅高于 Raney Ni、负载型 Ni 催化剂，还高于 Pt/Al_2O_3 和 Pd/Al_2O_3 贵金属催化剂，仅次于文献中公认的甲烷化活性最高的 Ru/Al_2O_3 贵金属催化剂，但其甲烷选择性（>99%）远高于 Ru/Al_2O_3 催化剂。结合表征和理论计算，我们将 RQ Ni 催化剂在低温甲烷化反应中的优异催化性能，归因于 Ni 的低配位环境及晶格应变对降低决速步骤 CO 键断裂活化能垒的协同作用。在研究过程中，同步辐射 X 射线吸收谱实验为我们深入了解 RQ Ni 催化剂的微观结构以及其在低温甲烷化反应中的构效关系提供了重要的技术支持。

发表文章：

Hao Wang, Ke Xu, Xuanyu Yao, Danhong Ye, Yan Pei, Huarong Hu, Minghua Qiao,* Zhen Hua Li,* Xiaoxin Zhang, and Baoning Zong* Undercoordinated Site-Abundant and Tensile-Strained Nickel for Low-Temperature CO_x Methanation. ACS Catalysis 8(2018), 1207–1211.

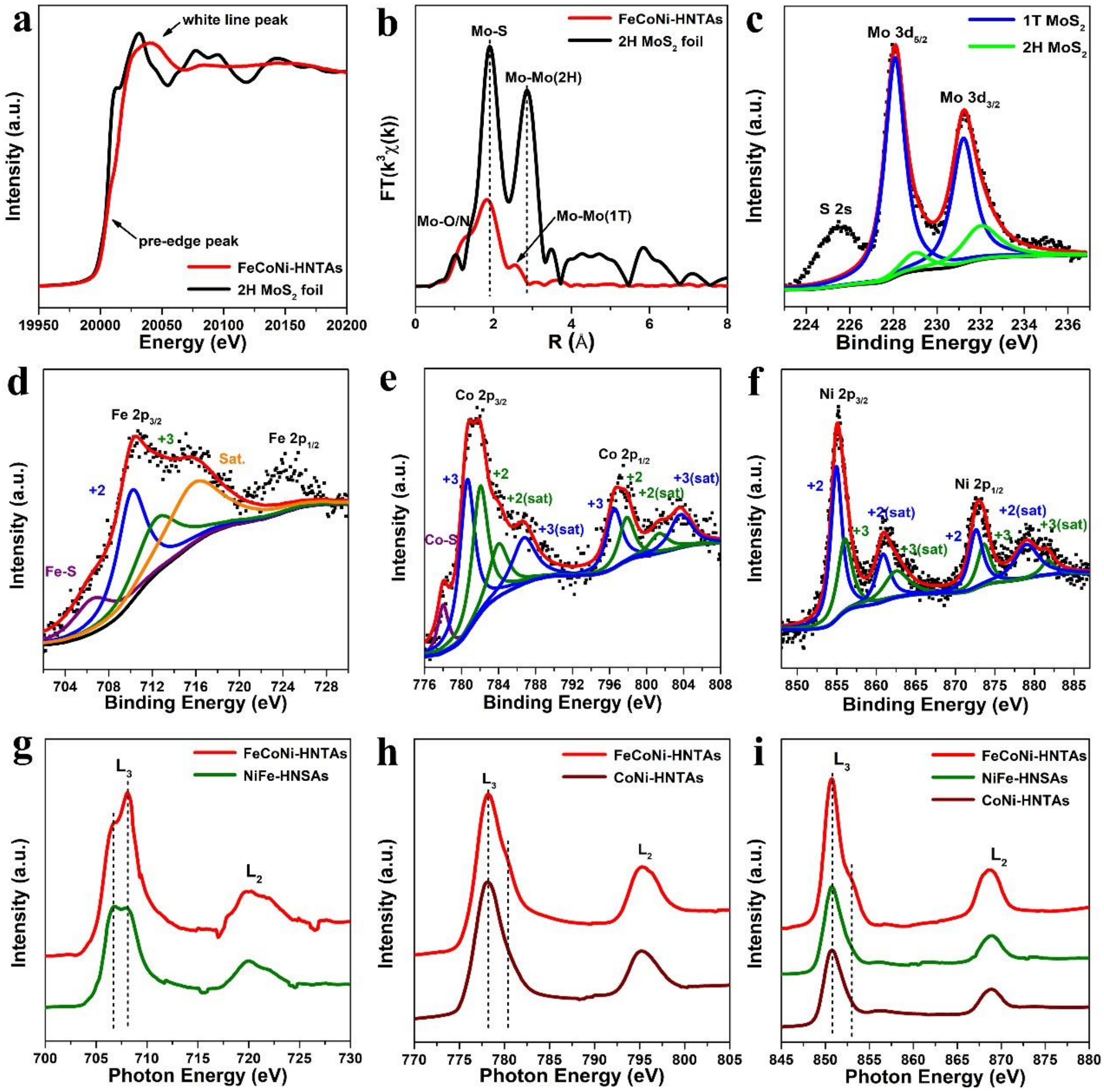
高效电解水材料系统化设计与构筑

电化学全解水析氢技术因其原料来源经济、工艺简单、产品纯度高、电解过程无污染等优势成为新能源催化转化的途径，能够有效降低社会对化石燃料的依赖。但是如何设计并构筑高活性、稳定、廉价易得的电极材料，成为目前该领域研究亟需解决的关键科学问题。目前，研究人员基于非贵金属材料已经发展出众多全解水催化剂，以降低电解过程的过电位，减小能量损失，同时提升电极的催化稳定性。清华大学有机光电及分子工程重点实验室的王训教授课题组系统化设计并制备了基于过渡金属硫化物的超疏气复合纳米管阵列电极，实现了高效电催化水裂解制氢，相关的研究成果发表在 2018 年 6 月 22 日的《Nature Communications》上。



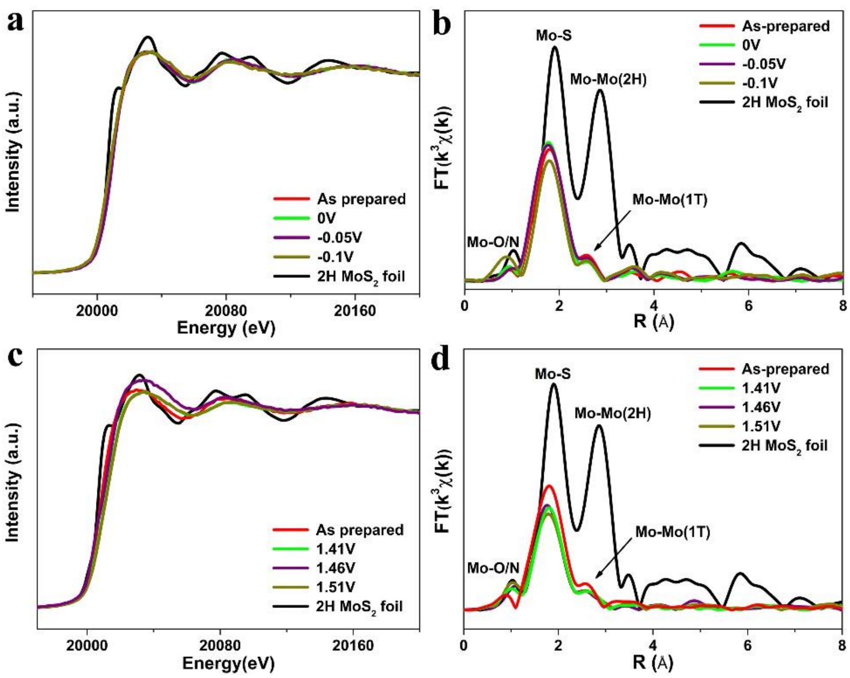
目前所发展出来的全解水催化剂材料大多只关注于对材料组分或结构的调控，是否有可能通过系统化的设计实现对材料组分、电子态、形貌结构以及表面性质的同时调控，来提高电极的全解水催化性能呢？王训教授团队首先制备出铁、钴、镍三金属水滑石纳米线阵列，然后利用$(NH_4)_2MoS_4$在 DMF 体系中实现了铁、钴、镍硫化物与 1T’ MoS_2的成功复合，通过柯肯达尔效应，最终得到了多金属硫化物复合纳米管阵列电极。

在该复合纳米管阵列体系中，1T’ MoS_2 以及铁、钴、镍三种离子之间的协同效应分别提升了催化剂活性位点对于电解水析氢、析氧反应的本征催化活性。同时，1T’ MoS_2 良好的导电性极大地促进了催化过程中的电子传输，加快了电解水的动力学过程。纳米管阵列的结构优势在催化过程中造成了气泡、电解液、电极三者之间不连续的三相接触线，因而气泡和电极之间的接触面积减小，导致了电极对气泡在电解液中的粘附力变小。在气泡析出过程中，与平面电极相比，气泡在还未长大时就离开了电极表面，有利于电解液和电极活性位点的充分接触，促进了催化传质。此外，纳米管阵列的多孔性以及粗糙的表面极大地增加了催化活性位点的数量，进一步提升了电解水催化效率。



利用北京同步辐射装置（BSRF）1W1B 站线的 XAFS 设备实现了对复合纳米管阵列结构中 1T MoS_2 的表征。可以观测到，相比标准 2H MoS_2 样品，复合纳米管中 MoS_2 的 Mo-Mo 键长由 3.16 Å 减小至 2.79 Å，达到了 1T MoS_2 的 Mo-Mo 键长的特征峰位置，证明复合纳米管中的 MoS_2 为纯 1T MoS_2。同时，利用 4B7B 站线的 sXAS 设备表征了铁、钴、镍三金属离子间的相互作用。含铁、钴、镍三金属的复合纳米管相比对应双金属样品，其 L3 区域高能量处三价金属离子的峰有明显增强，说明铁、钴、镍三金属间的相互作用可以有效调节金属离子的电子态，而三价金属离子相比对应二价离子具有更高的电解水析氧催化活性，进一步表明这种金属-金属相互作用可以提升催化剂的本征催化活性。

将此复合纳米管阵列材料应用于电化学析氢和析氧催化中，样品在 10 mA/cm^2 处的过电位分别为 58 mV 和 184 mV，同时能在 200 mA/cm^2 的大电流密度下能够保持超过 80 小时的活性。此外，在全解水催化当中，该纳米管阵列电极也展现出了非常优异的性能，10 mA/cm^2 处的电压低至 1.429V，同时能在 50 mA/cm^2 的电流密度下能够保持超过 100 小时的稳定性。



利用北京同步辐射装置（BSRF）1W1B 站线的 XAFS 设备实现了对复合纳米管阵列结构中 1T’ MoS_2 的原位电化学稳定性表征。对于电解水析氢和析氧反应，分别在三个不同的电位下持续极化复合纳米管阵列电极，并同时在 Mo K 边能量范围进行原位测试。结果显示，Mo-Mo 键长并未发生改变，证明在该复合纳米管阵列体系当中，1T’ MoS_2 具有优异的电化学稳定性。

此研究结果发展了一种系统性优化气体析出反应催化电极策略，同时针对催化位点的本征活性、活性中心的数量、催化剂导电性以及催化传质四个方面实现了电解水性能的优化。此外，对于 1T’ MoS_2 不稳定的问题，文中提出的复合材料体系为 1T’ MoS_2 提供保护的方法为 1T’ MoS_2 的实际应用带来新的契机。

发表文章：

Haoyi Li, Shuangming Chen, Ying Zhang, Qinghua Zhang, Xiaofan Jia, Qi Zhang, Lin Gu, Xiaoming Sun, Li Song, and Xun Wang. Systematic design of superaerophobic nanotube-array electrode comprised of transition-metal sulfides for overall water splitting. Nature Communications, 2018, 9, 2452.

NEXAFS 探测表面化学过程中的轨道层次作用物理机制

纳米表面效应是指纳米材料的表面结构状态对其物理与化学性质所施加的调控作用，而揭示纳米表面化学电子和轨道层次的作用本质是纳米科学、表面科学、团簇科学、表面发光及纳米合成等物质科学领域长期以来共同的基础难题。表面配体仅能局部地扰动最表层原子的成键方式与电子结构，而这些局部变化的电子结构信息会被占多数的内部原子的信号掩蔽，为实验解析表面化学轨道层次的机制带来困难。2D 材料所具有的巨大比表面积能最大程度地提高表面配体与内部原子的比例，最大限度地改变材料的电子结构并产生最显著的表面效应，是实验与计算研究纳米表面化学作用机理的理想模型体系。

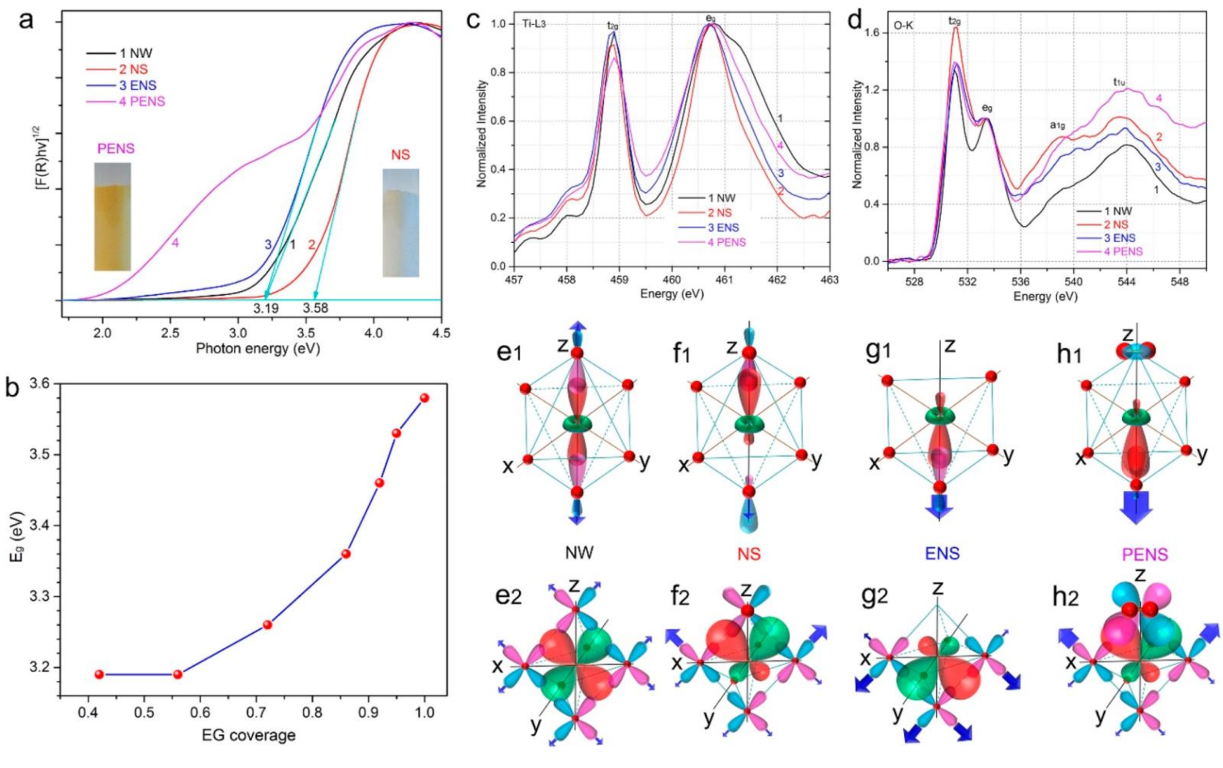


图 1. NEXAFS 表征乙二醇配体诱导的 TiO_2 纳米片表面轨道重构机制。

北京化工大学相国磊与清华大学王训等人以 0.4 纳米厚的 TiO_2 纳米片为模型体系，通过调控表面乙二醇配体的覆盖度，系统研究了表面配体调控禁带宽度与光学性质的物理本质。如图 1 所示，增加乙二醇的覆盖度能够增加 TiO_2 纳米片的禁带宽度，且覆盖度越大其影响越显著。他们与北京同步辐射装置的王嘉鸥副研究员合作，利用软 X 射线吸收光谱技术探索了配体覆盖度对 TiO_2 纳米片导带电子结构的调控机理。Ti-L 和 O-K 边吸收数据表明表面乙二醇配体的存在能够降低 t_{2g} 能带的强度以及 e_g 能带的宽度，说明 Ti-3d 原子轨道在晶格中的离域被削弱，被定域到表面化学键中。这种配体诱导的轨道重构作用是表面化学最核心的电子结构特征，也是普适性的物理规律。

通过结合实验探究、计算模拟与理论分析，研究人员提出了揭示表面配体及配体覆盖度调控纳米材料电子结构与性能机制的纳米尺度协同化学吸附理论。如图 2 所示，该新型纳米尺度吸附模型的本质在于表面配位化学键诱导的协同轨道重构作用，使配体能将表面原子的价原子轨道从离域的能带状态极化到定域的表面吸附键中，进而实现对纳米材料本征电子结构和性质的调控。

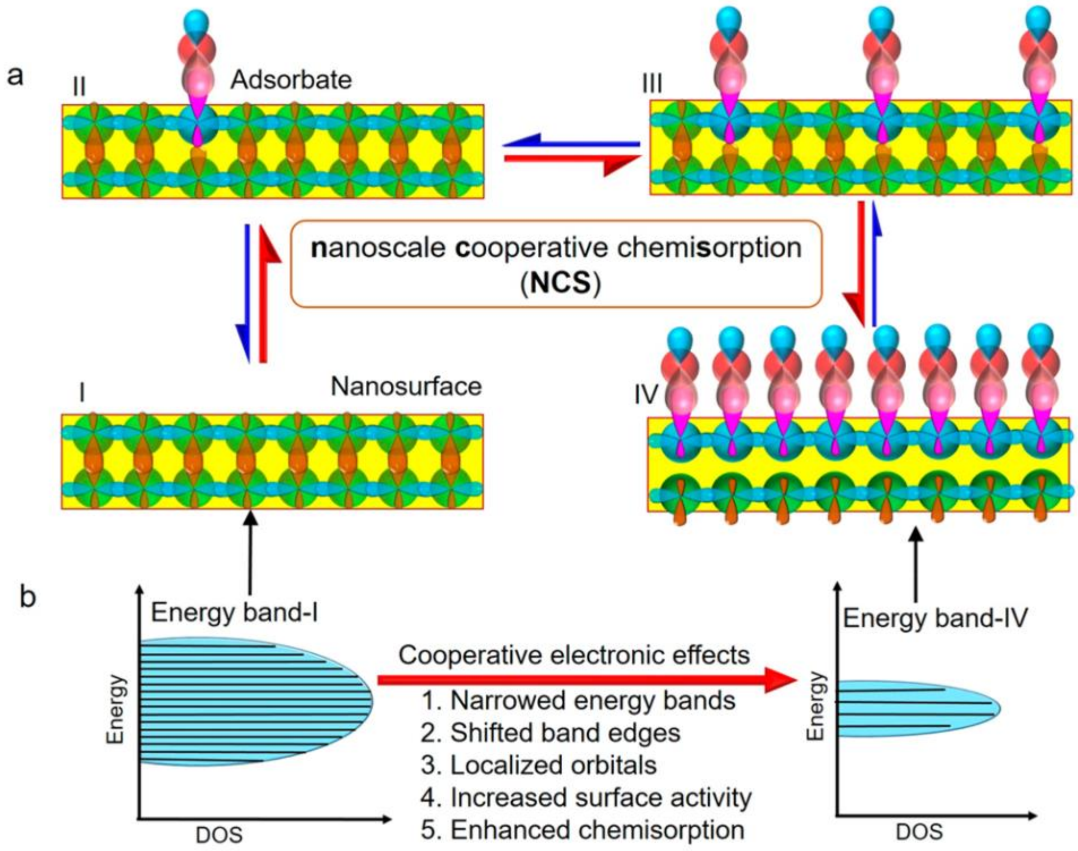


图 2. 纳米尺度协同化学吸附理论图示。

纳米尺度协同化学吸附理论的要点如下：

1.作用机理: 配体通过形成表面配位化学键与纳米材料表面发生化学吸附；表面化学键中的轨道重叠作用诱导表面原子价原子轨道成键构型的重构，实现对纳米材料表面原子局部电子结构的扰动；大量配体的集体作用对纳米材料的能带电子结构及性质表现出协同调制。

2.物理图像：(1)表面没有配体吸附时，表面价原子轨道优先拓展到晶格的 Bloch 电子态参与能带的形成，此时表现出纳米材料本征的电子结构特征。(2)当配体的前线分子轨道与表面原子的价原子轨道满足形成分子轨道的条件时，便可通过 MO-AO 间的重叠形成表面配位化学键。新形成的化学键能够弱化分子与表面原子原有的成键与电子状态，实现对分子的活化以及材料电子结构和性能的调制。对固体表面，化学吸附态能将表面原子的价原子轨道从离

域的能带状态极化重构到定域的表面化学吸附键中，此为配体调控纳米材料性质的物理化学本质。(3)表面配体诱导的轨道重构及其对电子结构与性质的影响程度与表面配体的覆盖度呈正相关，覆盖度越大则纳米材料的电子结构被调控的程度越大，各种纳米表面效应表现得越显著。

3.作用结果: (1)对纳米材料，表面价原子轨道被极化再分配到表面化学键中，该过程使得能带的强度降低，导致相应能带的宽度变窄，能带边的位置发生移动，能带内的态密度进一步量子化，表面原子的反应活性进一步提高。这种内在电子结构的变化深刻影响着纳米材料的光、电、磁及催化等物理与化学性质，此为纳米材料表面效应的电子本质。(2)对配体分子，化学吸附的强度既是表面活性的度量，又是吸附态稳定性的度量。该强度随着覆盖度的增加而增强，这种正相关效应导致纳米材料表面一旦被配体吸附就将自发实现吸附饱和。

相关工作发表在《Nano letters》(*Nano Lett.*, 2018, 18, 7809-7815)上。

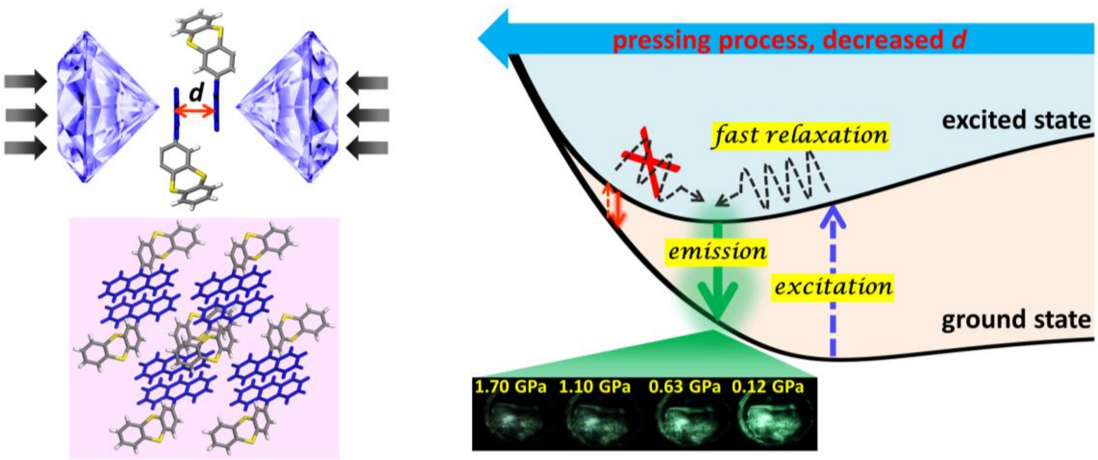
发表文章：

Guolei Xiang, Yan Tang, Zigeng Liu, Wei Zhu, Haitao Liu, Jiaou Wang, Guiming Zhong, Jun Li and Xun Wang, Probing Ligand-Induced Cooperative Orbital Redistribution That Dominates Nanoscale Molecule–Surface Interactions with One-Unit-Thin TiO2 Nanosheets, *Nano Lett.*, 2018, 18, 7809-7815.

蒽激基缔合物平衡构型的面间距离测定

有机发光材料在发光二极管、太阳能电池、生物成像、刺激响应等领域具有潜在的应用价值，其中有机发光材料的激发态构型决定了其光电性质。然而，激发态构型测定一直是有机发光领域的研究难点。由激基缔合物的势能曲线可知，两个分子的面间距离可以决定激基缔合物的发光性质，且基态下二聚体被激发后可以形成激基缔合物。因此，激基缔合物构型可以简化成两个分子的面间距离，为研究有机分子激发态构型提供了捷径和可能。吉林大学邹勃教授和杨兵教授的课题组对蒽二聚体的激发态结构进行了深入的研究，相关的研究成果发表在 2018 年 8 月 6 日的《Advanced Optical Materials》上。

单晶X射线衍射（X-Ray Diffraction, XRD）方法可以明确地观察分子构型及堆积结构，但是这种属于基态下的结构，并不能直接反映出激发态结构。时间分辨单晶XRD方法使激发态结构研究迈向新的台阶，其原理是在样品处于激发态时测定二聚体的构型，然而这种研究手段要求晶体具有强的衍射和长的寿命(磷光，寿命为毫秒级)，对于有机小分子激基缔合物(寿命通常为纳秒级)面间距离的测量是难以实施的。该课题组研究的具有离散蒽二聚体堆积的晶体，在金刚石对顶砧（Diamond Anvil Cell, DAC）产生的高压下表现出独特的发光行为：压强小于1.70 GPa时，发射波长表现出压强的非依赖特性；压强大于1.70 GPa时，发射波长逐渐红移。



利用这个独特的发光现象，结合理论计算的蒽激基缔合物势能曲线，可以推测出：由于二聚体激发后自身可以弛豫到激基缔合物平衡构型，无论在基态和激发态平衡构型的距离范围内的任何压强点，最终都会弛豫到激基缔合物平衡构型进行发光，表现出不变的发射波长；当压强进一步增加后，激发态距离被强制性地压缩而不会弛豫到激基缔合物平衡构型，表现红移的发射光谱。这样，光谱开始发生红移的基态距离（1.70 GPa下）即为激基缔合物平衡构型下的面间距离。利用北京同步辐射装置（BSRF），收集了不同压强下蒽二聚体晶体的衍射数据，表明晶胞在压力下被各向异性地压缩，蒽二聚体的两个分子逐渐地靠近，测定了1.70 GPa下蒽二聚体的面间距离即为激发态平衡构型的面间距离，为3.33 Å。

利用离散二聚体堆积在高压下特殊的光物理行为来研究激基缔合物平衡构型，是一个新的研究激发态的方法。不同于瞬态的时间分辨单晶XRD方法，这篇研究工作介绍的方法是一种稳态的。由实验方法得到的蒽二聚体激发态平衡构型下的面间距离，为进一步理解激基缔合物形成、构型和光物理性质提供了实验依据。

高压同步辐射实验在北京同步辐射高压线站完成。特此感谢。

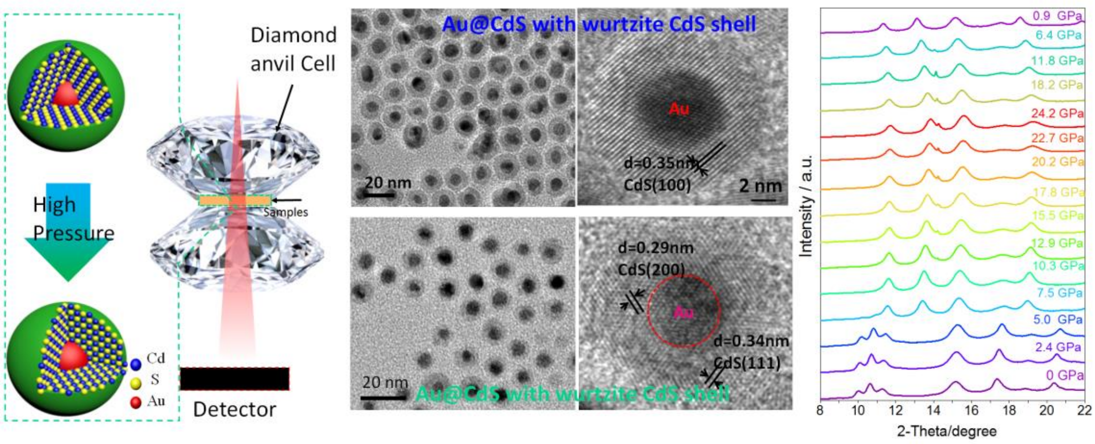
发表文章：

Haichao Liu, Yuxiang Dai, Yu Gao, Hongcheng Gao, Liang Yao, Shitong Zhang, Zengqi Xie, Kai Wang, Bo Zou,* Bing Yang,* and Yuguang Ma. Monodisperse π-π Stacking Anthracene Dimer under Pressure: Unique Fluorescence Behaviors and Experimental Determination of Interplanar Distance at Excimer Equilibrium Geometry. Advanced Optical Materials 6(2018), 1800085.

大晶格失配的金属@半导体核壳纳米晶的原位高压诱导相变

无机纳米材料的物相、形貌、异质界面等在高压条件件的稳定性及相变，对高压下的应用如高压传感器等应用具有重要的科学意义。CdS、CdSe 等纳米晶（量子点）在高压下呈现新颖的相变过程并被广泛研究。异质结构纳米晶，尤其是各向同性的量子尺寸核壳纳米晶在高压条件下的相变、异质界面及纳米效应研究具有重要的科学意义，少有报道。北京理工大学结构可控先进功能材料与绿色应用北京市重点实验室张加涛教授团队利用原创性的非外延生长法制备了具有单晶 CdS 壳层的 Au@CdS 金属半导体核壳纳米晶（Science 2010, 327, 1634；Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54，3683；Adv. Mater. 2014, 26, 1387；Adv. Mater. 2016, 28, 3094）。他们与 Beijing Synchrotron Radiation Facility (BSRF)的李晓东研究员，郑黎荣研究员等合作，对其在高压下的原位相变等进行了深入研究，相关的研究成果发表在 2018 年的《Journal of the Physical Chemistry Letters》杂志上。

该研究团队通过非外延生长方法制备了具有单晶壳层和原子级清晰界面的 Au@CdS 核壳纳米晶，为剖析高压条件下物相转变和结构变化提供了很好的材料模型。该研究团队发现在高压条件下，Au@CdS 纳米晶的核壳结构和异质界面保持完好，而单晶 CdS 壳层则由纤锌矿结构转变为岩盐结构。与 CdS 块体材料和外延生长 Au/CdS 核壳纳米晶在高压过程中可能存在晶格缺陷对 CdS 相变的影响不同，Au@CdS 核壳纳米晶的 CdS 壳层相变过程只受外力和异质结构之间的相互作用影响。这些结果为研究异质结构高压相变中大晶格失配的不同物质在纳米尺寸的相互作用具有很重要的科学意义。



该研究利用北京同步辐射装置（BSRF）4W2-高压实验站 ADXRD 原位表征 Au@CdS 核壳纳米晶高压相变过程。研究表明纤锌矿 CdS 单晶壳层的相变压力超过 5.0 GPa，远高于块体 CdS 的相变压力；压力超过 7.5 GPa 时，纤锌矿 CdS 单晶壳层完全转变为岩盐结构 CdS 单晶壳层；继续增加压力至 24.2 GPa 和卸压后，壳层仍为岩盐结构 CdS 单晶壳层。在相变过程中，核壳结构和 Au 核-CdS 壳层界面保持完好。结合 Raman 光谱表征技术发现与块体 CdS 高

压相变明显不同，CdS 单晶壳层在相变过程中 Raman 位移变化与压力不成线性关系，从而证明了 Au@CdS 结构在高压条件下 Au 核与 CdS 壳层存在相互作用且影响 CdS 单晶壳层相变过程。通过对比 Au 纳米晶与 CdS 纳米晶在高压下的变化，发现 Au@CdS 核壳结构的高压相变过程不同于 Au 纳米晶和与 CdS 纳米晶，进一步证明了 Au 核-CdS 单晶壳层的大晶格失配度和界面应力促使了 CdS 单晶壳层的相变。

发表文章：

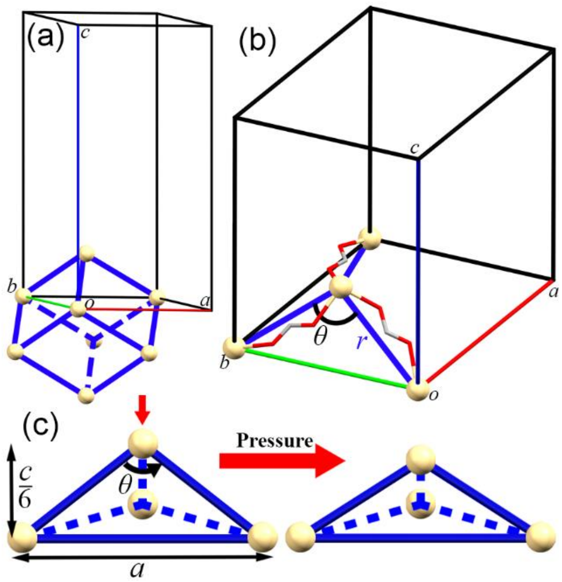
M. Ji, H. Wang, Y. Gong, H. Cheng, L. Zheng, X. Li, L. Huang, J. Liu, Z. Nie, Q. Zeng, M. Xu, J. Liu, X. Wang, P. Qian, C. Zhu, J. Wang, X. Li and J. Zhang, High Pressure Induced *in Situ* Solid-State Phase Transformation of Nonepitaxial Grown Metal@Semiconductor Nanocrystals *J. Phys. Chem. Lett.*, 2018, **9**, 6544-6549.

类钙钛矿金属有机框架材料$[C(NH_2)_3][Cd(HCOO)_3]$的近零面压缩行为研究

零线/面压缩率材料在持续增大的静水压作用下，晶体的某一/两个晶轴长度保持不变。此优异的物理特性使得零线/面压缩材料在制备抗压材料领域中具有极为广阔的应用价值。然而，此前尚未有关于零线/面压缩率材料的报道。吉林大学超硬材料国家重点实验室的一个研究组发现了首例具有近零面压缩率材料$[C(NH_2)_3][Cd(HCOO)_3]$ ($[C(NH_2)_3]^+$ = guanidinium)，相关的研究成果发表在 2018 年 7 月 6 日的《ACS Applied Materials & Interfaces》上。

该组利用金刚石对顶砧装置研究高压下$[C(NH_2)_3][Cd(HCOO)_3]$材料在压力下的结构变化。在北京同步辐射装置 4W2-高压实验站开展的同步辐射 X 光衍射光谱表明，随着压力由常压增大到 0.53 GPa 范围内，布拉格峰（2-10）峰位没有发生变化，表明该晶面面间距在加压过程中既没有增大也没有减小。对三方结构的$[C(NH_2)_3][Cd(HCOO)_3]$的晶体结构进行精修，得出该晶体在压力范围 0 到 0.53 GPa 以内，c 轴的长度随压力增大而减小，但 a 轴与 b 轴的长度随压力增大仅仅缩短了 0.04%。利用晶格参数计算得出晶体的各向晶轴压缩率，发现在 0 到 0.53 GPa 压力范围内，a 轴与 b 轴的压缩率只有 0.94 TPa^{-1}。而一般的材料压缩率在 5 到 50 TPa^{-1}之间。

通过对$[C(NH_2)_3][Cd(HCOO)_3]$材料的晶体结构进行分析，发现此材料晶体内斜菱方结构与晶体结构存在几何上的对应关系，并且$[C(NH_2)_3][Cd(HCOO)_3]$晶体在 ab 面内的近零面压缩的原因正是由于该晶体内特殊的斜菱方结构所导致的。当压力增大时，斜菱方结构内 Cd−OCO−Cd 的链长被压短，而 Cd···Cd···Cd 夹角变大。链长的缩短与夹角的变大对晶格参数 a、b 的大小具有相反的作用，最终在这两种相反的作用下，晶格参数 a 与 b 保持不变。同时，Cd−OCO−Cd 链长的压缩与 Cd···Cd···Cd 夹角的变大均导致晶轴 c 减小，因此在双重作用下，c 轴方向上压缩极快。



为进一步探究晶体结构的压缩机理，利用第一性原理的计算方法对$[C(NH_2)_3][Cd(HCOO)_3]$的晶体结构在高压下的演变进行了理论模拟。结果表明 Cd-O 键键长随压力增大而减小，导致 Cd−OCO−Cd 链缩短，而 O-Cd-O 键键角增大，使得 Cd···Cd···Cd 夹角变大，进而引起 c 轴随压力快速减小而 a 轴与 b 轴在高压下保持不变。本工作是世界上首例报道近零面压缩这一反常压缩行为的工作，为进一步寻找其他零面压缩率或零线压缩率材料提供思路。

发表文章：

Qingxin Zeng, Kai Wang,* and Bo Zou, Near Zero Area Compressibility in a Perovskite-Like Metal–Organic Frameworks $[C(NH_2)_3][Cd(HCOO)_3]$, ACS Applied Materials & Interfaces 10(2018)，23481-23484.

离子掺杂实现卤化铅铯纳米晶高效紫光发射

无机钙钛矿纳米材料由于具有卓越的光电性能，成为极具应用潜力的新一代半导体材料。目前，$CsPbBr_3$和$CsPbI_3$纳米晶在绿光和红光区域的发光效率均可达到90%以上，但紫光区域发光的 $CsPbX_3$ (X=Cl 或 Cl/Br) 纳米晶发光效率低下，这表明了在此类纳米晶中存在大量的结构缺陷。针对这一难题，苏州大学材料与化学化工学部孙洪涛教授课题组提出了一种非光学活性离子掺杂提高无机钙钛矿纳米晶发光效率的策略，实现了紫光发光效率接近 100%。通过详细的结构解析和理论计算，他们发现镍掺杂能够有效抑制结构缺陷并显著提高 $CsPbCl_3$ 纳米晶的短程有序性。相关研究成果发表在 2018 年 7 月 16 日的《Journal of the American Chemistry Society》上。

该课题组发现掺杂非光学活性的镍离子可以使 $CsPbCl_3$ 纳米晶的发光效率接近 100%。该结果首次提出通过非光学活性离子掺杂避免掺杂离子与$CsPbCl_3$纳米晶间的能量传递，从而提高 $CsPbCl_3$ 纳米晶的带边发光效率。在研究其发光增强机理过程中， 北京同步辐射光源的科研人员给予本研究极大的支持。通过 X 射线吸收光谱对掺杂前后 $CsPbCl_3$ 纳米晶进行结构解析。XANES 和 EXAFS 结果表明，Ni 掺杂不影响 Pb 的价态，但可以有效增强 $CsPbCl_3$ 结构的短程有序性（图 1）。结合密度泛函理论分析，他们提出了掺杂纳米晶发光效率增强的内在机理， 即未掺杂 $CsPbCl_3$ 纳米晶易形成深缺陷能级（如 Cl 空位），这些缺陷易捕获载流子，从而使发光效率低下；镍掺杂可以提高$CsPbCl_3$缺陷形成能进而提升短程结构有序性，这一结构上的改变可以有效抑制非辐射跃迁，实现发光效率的显著提高。同时，该课题组发现，这种方法具有很好的普适性，可显著提高其他紫光发射钙钛矿纳米晶的发光效率。

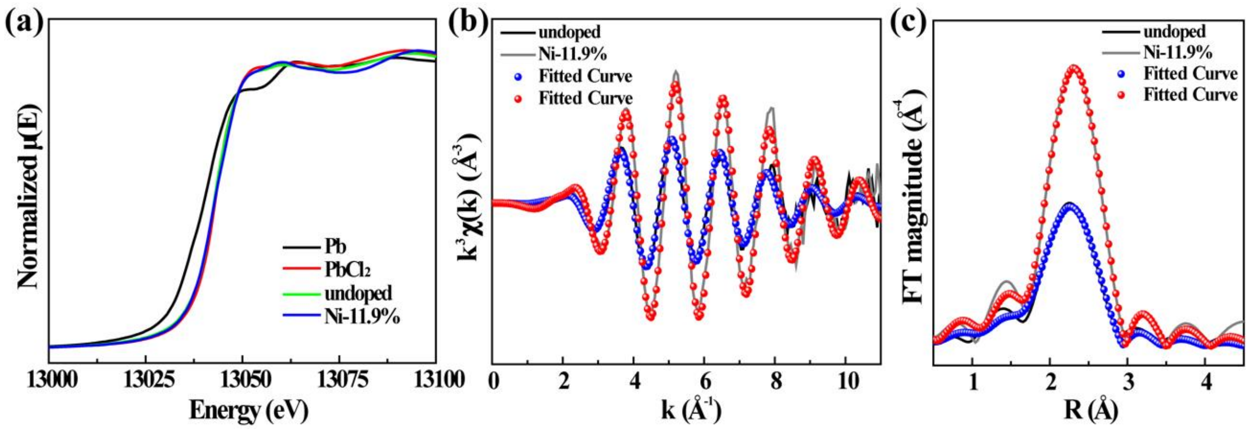


图 1. 北京同步辐射装置（BSRF）测试获得 Pb L_{III} 边的 (a) XANES, (b) k^3 权重下得到的 EXAFS 谱图以及 (c) 相应的傅立叶转换谱图。数据表明镍掺杂后 Pb 的配位数增加即 Cl 空位得到抑制， 同时结果表明 $CsPbCl_3$ 结构的短程有序性增强。undoped 和 Ni-11.9%分别代表未掺杂样品和 Ni 掺杂浓度为 11.9%的样品

同步辐射光源帮助该课题组分析铅的局域配位结构，为合理确定$CsPbCl_3$纳米晶发光增强机理提供了重要支持。该课题组组长苏州大学材料与化学化工学部孙洪涛教授这样描述他们的工作："我们提出了一种普适性的策略来提高卤化铅铯纳米晶的发光效率，这将极大的促进其在紫光发射器件领域的应用，对于其发光机理的理解，同步辐射技术起到不可或缺的作用。"

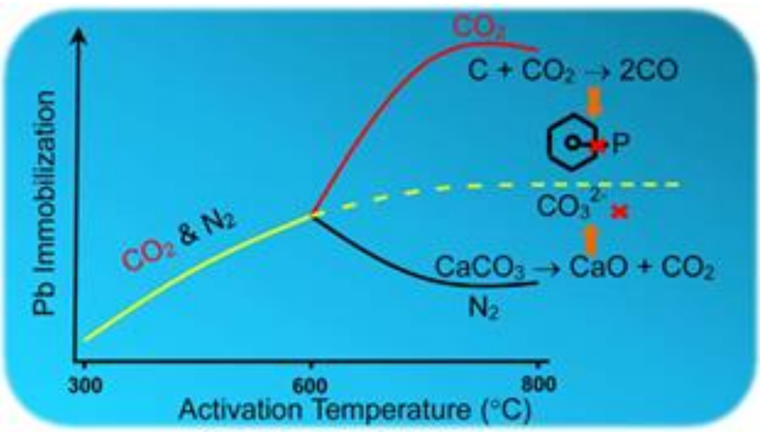
发表文章：

Zi-Jun Yong,† Shao-Qiang Guo,† Ju-Ping Ma,† Jun-Ying Zhang,† Zhi-Yong Li, Ya-Meng Chen, Bin-Bin Zhang, Yang Zhou, Jie Shu, Jia-Li Gu, Li-Rong Zheng, Osman M. Bakr, and Hong-Tao Sun*, Doping-Enhanced Short-Range Order of Perovskite Nanocrystals for Near-Unity Violet Luminescence Quantum Yield. Journal of the American Chemistry Society, 140 (2018), 9942-9951.

抗生素药渣生物炭中碳和磷元素的演变及对 Pb 的固定机制

抗生素药渣热解制备生物炭材料是热点环境问题。碳和磷元素的演变，决定了生物炭材料固定重金属 Pb 的能力。热解过程极其复杂，生物炭中碳和磷元素的演变过程仍没有解释清楚。复旦大学环境科学与工程系、上海市大气颗粒物污染防治重点实验室、上海市污染控制与生态安全研究院张士成教授和朱向东青年研究员研究组，对生物炭中碳和磷元素演变进行了深入的研究，相关研究成果发表在《Chemical Engineering Journal》上。

该研究组发现不仅热解改性温度，而且气氛显著影响了生物炭材料对重金属 Pb 的固定能力。在低温下（< 600 ºC），羧基的热转化和有效磷的演变均不受活化气体类型的影响；而在高温下（> 600 ºC），碳酸根的热转化和有机磷的演变强烈依赖于活化气体类型。该研究利用北京同步辐射装置（BSRF）4B7A-中能实验站开展的 X 射线谱学实验解析了磷酸盐的形态，抗生素药渣生物炭中羟基磷酸石和磷酸铝，这为离子交换吸附重金属 Pb 提供了活性吸附位点。CO_2 气体会抑制碳酸根的热转化，也可以通过消耗炭基质转化有机磷为无机磷。水体中 Pb 的固定主要受碳酸根和有效磷的浓度控制。在高温下，由于较高的有效磷和碳酸根含量，CO_2 气氛下活化的生物炭对水体中 Pb 的固定能力远强于 N2 活化的生物炭。结果表明，生物炭对水体中 Pb 的最大固定容量为 454 mg/g。研究机制如下图所示。



发表文章：

Yuchen Liu, Xiangdong Zhu*, Xinchao Wei, Shicheng Zhang*, Jianmin Chen, Zhiyong Jason Ren. CO_2 activation promotes available carbonate and phosphorus of antibiotic mycelial fermentation residue-derived biochar support for increased lead immobilization. Chemical Engineering Journal 2018, 334, 1101-1107.

五种纳米钙钛矿对大型蚤的慢性毒性的研究：基于结构的毒性机制

钙钛矿纳米材料（perovskite nanomaterials, PNMs）作为燃料电池、催化剂、光伏材料等显示出优越的性能，具有巨大的应用潜力,但其在水生环境中的行为和潜在生态效应却完全没有报道。北京航空航天大学的一个研究组对纳米钙钛矿的行为及对水生生物的毒性进行了深入的研究，相关的研究成果发表在 2018 年 1 月 1 日的《Environmental Science: Nano》上。

作者合成了五种代表性的PNM（$LaFeO_3$，$YFeO_3$，$BiFeO_3$，$LaMnO_3$和$LaCoO_3$），采用XRD，XPS，TEM，同步辐射等多种方法来研究了它们对水生无脊椎动物大型溞的急性和慢性毒性，同时探讨了天然水体中的有机质对其毒性的影响机制。结果表明，1ppm的$LaCoO_3$明显着抑制了大型溞的生长，暴露21天后大型溞全部死亡，而暴露于其他PNM的大型溞中没有出现死亡。主要原因在于$LaCoO_3$与其他PNM相比，$LaCoO_3$的晶体结构中含有氧空位，导致自由离子的溶出。此外，大型溞对自由钴离子的摄入也是导致$LaCoO_3$在其体内产生不同于其他四种钙钛矿的特殊分布的主要原因。而其他四种纳米钙钛矿在21天暴露期间虽然没有对大型溞产生任何负面影响，但是大量的积累在大型溞肠道的钙钛矿可能会随着食物链转移到更高级的生物体内，因此其安全性也不能忽视。

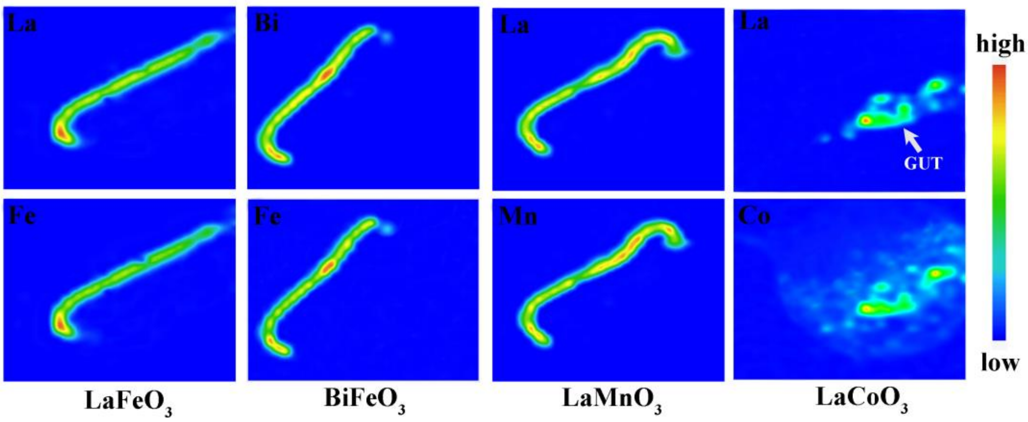


图 1 暴露 21d 后钙钛矿在大型蚤体内的分布

纳米材料在生物体内的空间分布对揭示其毒性机制有着非常重要的意义，利用北京同步辐射装置开展的-X射线荧光微区谱学成像（Synchrotron radiation X-ray fluorescence micro-spectroscopy，SR-μXRF）实验表明，$LaFeO_3$, $BiFeO_3$和$LaMnO_3$仅分布在大型溞肠道；而LaCoO3不仅分布在肠道，钴离子也在大型蚤腹部区域分布，积累在肠道的信号是通过滤食方式进入的LaCoO3，腹部的信号是通过胸枝上肢进入的钴离子，暴露液中溶出的钴离子是LaCoO3主要的致毒原因。

作者还发现，阿拉伯树胶会对纳米钙钛矿的毒性产生影响。在阿拉伯树胶的存在下，

$LaFeO_3$，$BiFeO_3$ 和 $LaMnO_3$ 毒性增加，而 $LaCoO_3$ 毒性降低。而 $YFeO_3$ 的毒性没有发生改变。不同 PNM 受天然有机质不同的影响效果与自身的物理化学性质相关。本研究强调了全面表征纳米材料的必要性，以明确其影响生物毒性的物理化学性质因素。此外，研究纳米钙钛矿在水生环境中的转化能够更准确地评估它们对水生生物的影响。需要对纳米钙钛矿的的生物效应进行更多的生态毒理学研究，以建立纳米钙钛矿的性质-毒性关系。

发表文章：

Tingting Zhou, Wenhong Fan*, Yingying Liu, and Xiangrui Wang. Comparative assessment of the chronic effects of five nano-perovskite to Daphnia magna: a structure based toxicity mechanism. Environmental Science: Nano 5(3): 708-719.

2018 年度各光束线站工作进展

1W1A-漫散射实验站

（1）开放运行

2018 年漫散射实验站向用户提供了一轮兼用光和两轮专用光，为来自中科院各研究所和国内高等院校的用户完成了材料的高角 X 射线衍射(XRD)、X 射线反射(XRR)、掠入射 X 射线衍射(GIXRD)和漫散射（DXS）测量实验，所支持的课题研究包括宽禁带半导体薄膜、铁基超导薄膜材料、聚合物薄膜、有机薄膜器件、介孔材料等。

本年度共有一次兼用光、两次专用光，漫散射实验站在此期间为 63 个课题研究组提供了同步辐射机时。截至 2018 年 12 月初，用户已发表论文 55 篇，其中一区 SCI 论文 22 篇，一些用户取得了很好的实验结果，其论文发表在高影响的学术期刊上（Science、Advanced Energy Materials、Advanced Materials、Energy Environ. Sci.、 Nature Communications 等）。

（2）实验站维护和实验技术发展

本年度，漫散射实验站（1）检修了束线及实验站的部分软硬件设备，如高温样品台、循环水制冷机、空气压缩机、抽风机等；（2）准备搭建 Pilatus-EPICS-Autofilter-Pilatus 联用系统，开始了探测器自动化保护技术研发，订购新设备，完成了弱电流放大器和光电二极管在线测试、返回改进、再次安装使用。（3）有机光电材料表征平台进行了升级，包括 Mar345 面探测器滑台、后探测器系统。

部分系统设备如图 1 所示。

(a) (b) （c）

图 1 BSRF-1W1A 实验站升级改造：(a) 切光保护用光电二极管；(b) 弱电流放大器验收测试；（c）Mar345 面探测器升降切换滑台。

（3）科研成果

本年度，实验站工作人员与北京科技大学的用户合作在漫散射站开展了变温 XRD 实验，

完成了倒易空间绘制，开展了结构随温度的相变研究，测出确认了单一晶格常数 $PbTiO_3/PbO$ 复合外延膜的大轴比。主要结果：$PbTiO_3/PbO$ 复合外延薄膜的轴比由体相的 1.065 提升到了 1.238，极化强度提升了 2 倍，铁电转变温度由 490°C 提升到 725°C。该结果已经具备了工业应用价值，该材料的设计方法启发了类似材料科学的研究。其结果发表在 Science 上（L. Zhang,et al., Science 361, 494-497 (2018)）。

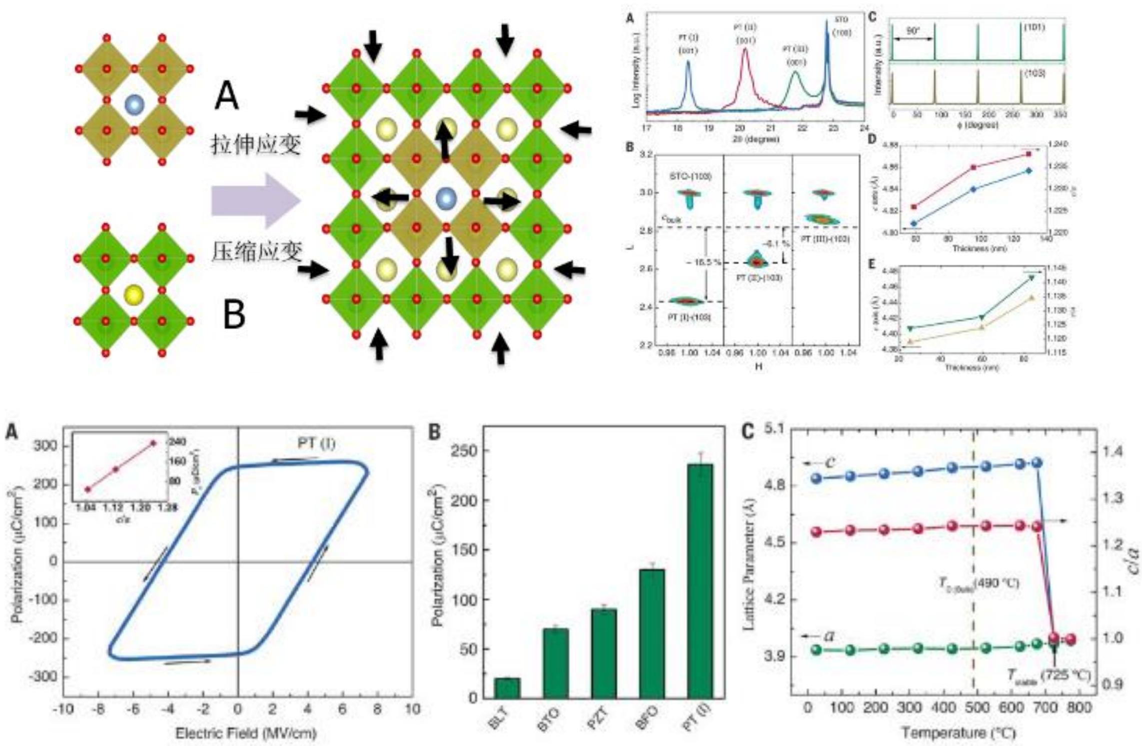


图 2 将两种结构类似但晶格常数不同的物质形成晶格匹配的外延薄膜，小晶格的物质必然受到大晶格物质的拉应力，进而引入巨大应变。

1W1B-XAFS 实验站

（1）开放运行

2018 年度全年共完成了两轮专用光运行和兼用光运行，累计运行时间 130 天，共完成了 117 个申请课题的实验研究：其中包括专用光运行 83 天，完成 85 个课题；兼用光 47 天，完成 32 个课题。光束线运行总体平稳、安全、高效，用户群体主要来自全国各地的 65 个高校和研究所，涉及的研究领域主要是催化、环境、能源以及材料科学，尤其是在单原子催化领域比较突出。

（2）XAFS 方法的发展及应用

A）全局化 XAS 分析方法助力催化剂结构的精确解析

美国加州大学洛杉矶分校段镶锋、黄昱以及沙特阿拉伯沙特国王大学 Imran Shakir（共同通讯作者）等人报道了一种合成具有明确结构的过渡金属（Fe、Ni、Co）MN4C4 型单原子电催化剂的普适性方法，并系统研究了 MN4C4 型单原子电催化剂的构效关系。该课题组与北京同步辐射装置的董俊才博士（共同第一作者）开展合作研究，利用全局化 XAFS 分析方法，以及 TEM 进行精确的结构解析，并结合 DFT 计算，经过电化学测试证实不同过渡金属单原子催化剂的 OER 催化活性趋势为 Ni>Co>Fe。研究成果以封面文章发表在 Nature Catalysis volume 1, pages 63–72 (2018)上。

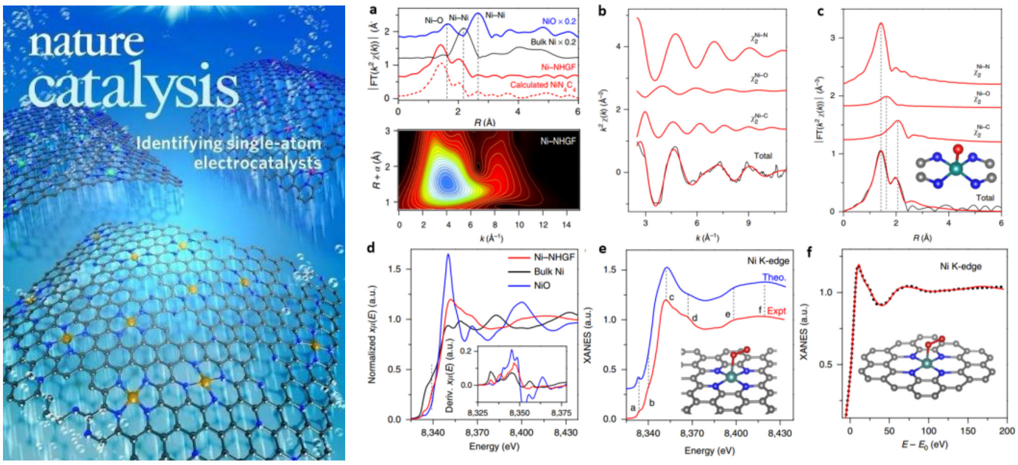


图 1 Nature Catalysis 封面：过渡金属 MN4C4 型单原子电催化剂的普适性合成方法

B）XAFS 在单原子催化剂结构表征中的应用

贵金属单原子催化剂具有超高的催化活性，但是在实际高温反应中，由于金属表面自由能的降低，往往容易烧结团聚，失去活性。如何构建具有热稳定性的单原子催化剂，成为研究人员关注的热点。清华大学的李亚栋院士和李治（共同通讯）等人，报道了一种现象：在 900℃以上，贵金属纳米颗粒（Pd，Pt，Au-NPs）惰性气氛中可以转变为热稳定单原子（Pd，Pt，Au-SAs）。研究人员利用 MOF 衍生的 N-掺杂的碳材料作为锚定基底，发现在 900℃惰性氛围中持续 3h，Pd、Pt 或 Au 等贵金属纳米颗粒可以直接转变成 Pd、Pt 或 Au 单原子，并通过原位环境透射电镜实现了对动态变化过程的实时观察，球差矫正电镜和 XAFS 谱证明了单原子的分散状态。热稳定单原子（Pd-SAs）表现出比纳米颗粒（Pd-NPs）更好的活性和选择性。这项研究为开发具有高度热稳定性的贵金属单原子催化剂开辟了新道路！相关成果以“Direct observation of noble metal nanoparticles transforming to thermally stable single atoms”为题发表在 Nat. Nanotech.上。

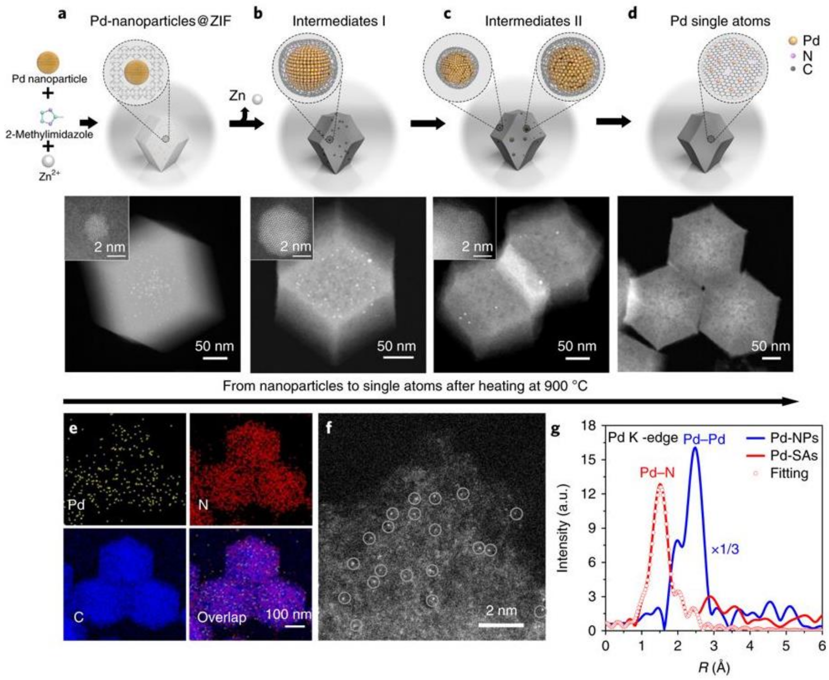


图 2 Nat. Nanotech.：直接观察贵金属纳米粒子转变为热稳定的单原子

C）XAFS 在电化学中的应用

氧还原反应(ORR)在诸如燃料电池和氯碱电解槽等许多储能和转换系统的商业化中起着重要作用。Pt 及其合金是目前最有效的 ORR 催化剂。然而，Pt 的高昂成本和稀缺性严重阻碍了这些涉及 ORR 的能源设备的广泛应用。为了解决这个棘手的问题，大量的研究工作致力于制备可替代、低成本和高性能的无金属和非贵金属(NPM)催化剂。碳负载的氮配位金属(Me/N/C，Me= Fe 或 Co)催化剂已被认为是替代 Pt 基催化剂的最有希望的候选者。目前，大部分 Me/N/C 催化剂在碱性条件下与 Pt/C 催化剂具备可比性，但是在酸性条件下性能不好。

为了提升酸性电解质中 Me/N/C 催化剂的催化性能，中国科学技术大学俞书宏教授和梁海伟教授（共同通讯）等人报道了一种简单的基于聚吡咯(PPy)涂覆的碳质纳米纤维(CNF@PPy)、以 SiO_2 保护壳为介导的热解法来制备 Fe/N/C 催化剂。课题组利用北京同步辐射装置 1W1B 实验站，采集了 Fe 的 K 边 XAFS 谱，从结构上证明了该催化剂在 SiO_2 保护壳下，不仅可以限制铁活性位点的迁移，而且还限制了高温热解过程中挥发性气态物质的捕获，同时优化了 Fe-N-CNFs 催化剂的表面官能和多孔结构。与没有 SiO_2 保护壳制备的催化剂相比，Fe-N-CNFs 催化剂在酸性介质中具有显着提高的 ORR 活性和优异的稳定性。相关文章发表在 Energy Environ. Sci., 2018, 11, 2208-2215。

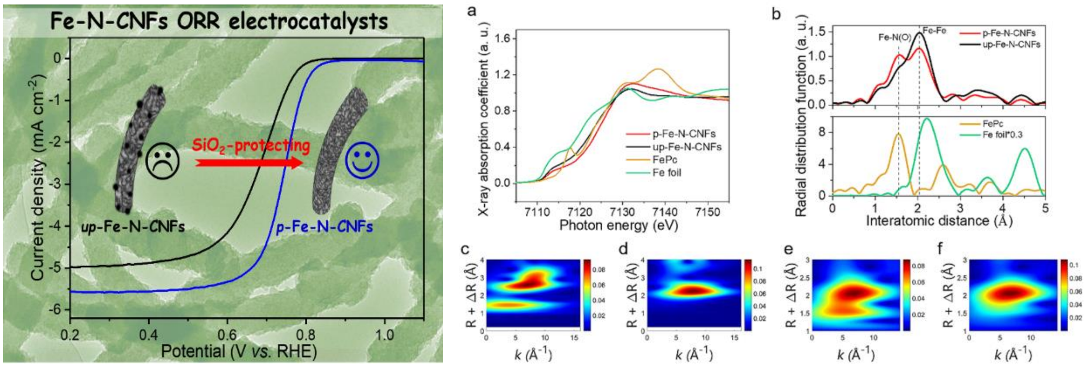


图 3 Energy Environ. Sci.: SiO_2 保护壳模板法合成 Fe-N 掺杂碳纳米纤维及其增强氧还原反应性能

（3）科研成果

2018 年度依托 1W1B 实验站发表的用户文章数目共有 167 篇，一区论文 102 篇，其中 Nature Nanotechnology 1 篇，Nature Catalysis 2 篇，Energy & Environmental Science 3 篇，Adv. Mater. 9 篇，另外还包括 JACS、ACS nano、Angew. Chem. Int. Ed.、Advanced Energy Materials 等著名期刊杂志，总的平均影响因子 9.60。

1W2A-小角散射实验站

（1）开放运行

2018 年，小角站为用户提供了两轮专用光机时。在 6 月 17 日至 7 月 27 日第一轮专用光期间，小角站共接待了来自 25 个单位的 32 个课题组，提供实验机时 890 小时。10 月 1 日至 11 月 11 日第二轮专用光期间，为 26 个单位的 36 个课题组提供机时 931 小时。全年累计为用户提供实验机时 1821 小时。实验站提供了小角（SAXS）、广角（WAXS）、大小角联用（SAXS/WAXS）、掠入射小角(GiSAXS) 及掠入射广角(GiWAXS)等实验模式，实验类型包括原位变温、原位生长、应力应变、毫秒时间分辨等。

（2）工程进展

实验站人员以玻璃碳和纯水为标准样品，在 1W2A 小角站发展了散射绝对强度的标定方法，并将该方法成功应用于卵清蛋白质分子量测定和无烟煤热解过程中孔隙率变化的测量中，验证了标定方法的可靠性，为用户获取分子量、体积分数、电子密度差等与质量密度有关的结构参数奠定基础。工作发表在 *Nuclear Inst. and methods in Physics Research, A* 900 (2018): 64 上。

实验站人员为用户设计了一款专门用于 SAXS 原位测试的煤炭高温干馏炉，温度可达 1200°C。可使煤炭在隔绝氧气条件下加热分解的同时，利用 SAXS 技术实时测量煤炭干馏过

程中碳网络结构的变化。图 1 为干馏炉内部结构示意图(a)以及为用户实验时的照片(b)。

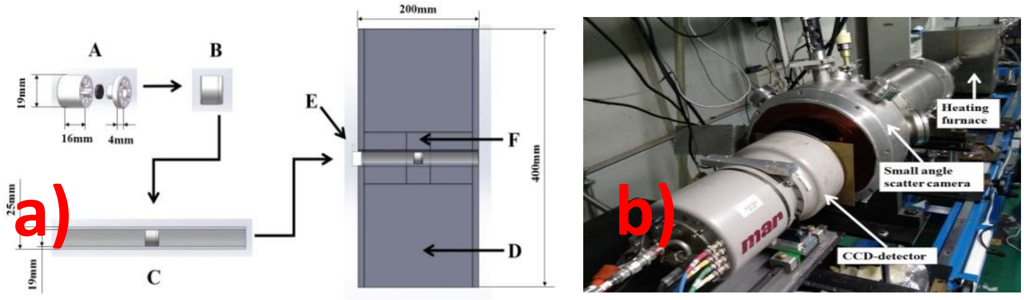


图 1 煤干馏炉内部结构示意图(a)及为用户实验时的图片(b)

（3）科研成果

据不完全统计，2018 年度小角用户共发表论文 57 篇。其中，发表在 *Adv. Mater.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Macromolecules* 等一区刊物论文 20 篇。

1W2B-衍射谱学综合实验站

（1）开放运行

在 2018 年两轮专用光期间，1W2B 衍射谱学综合实验站共提供 1824 小时的实验机时，运行效率大于 99%，共享率大于 95%，接待了来自国内多个研究单位的 62 个课题组，分别开展了晶体衍射、小角散射、吸收谱学和 Pump-probe 时间分辨实验，其中晶体衍射有 10 个课题组，小角散射有 1 个课题组，Pump-probe 时间分辨实验有 4 个课题组，吸收谱学实验有 42 个课题组，其他方向课题组 5 个。2018 年实验站完成了小角散射实验平台的验收工作，开展了小角、广角、吸收谱多方法联用技术研究，2019 年会完成验证性实验。

（2）科研成果

据用户反馈，2018 年度基于 1W2B 线站发表了 40 篇论文，包括 Nature Catalysis、Nano Energy、Advanced Materials 等一流国际期刊。研究亮点集中在吸收谱学领域。

1B3-X 射线光刻实验站

（1）开放运行

2018 年第一次专用光，光刻站共接待用户 7 批次，提供机时 863H。第二次专用光共接待用户 9 批次，为用户提供机时 919H。2018 年兼用光运行 380H，服务用户 3 批次。

（2）线站建设

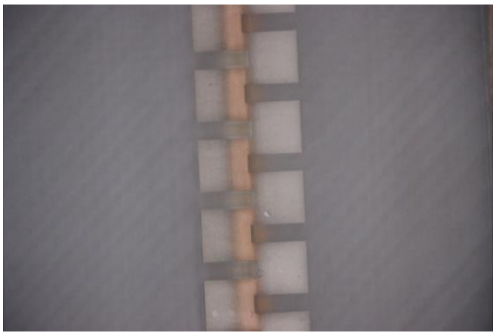
1B3 光刻实验站安装有钨丝，通过钨丝电流变化确定同步辐射光的位置。原来调光时需要扫描钨丝，并观察钨丝位置及电流变化情况，调光工作至上要两人完成。今年在 FOE 内加装了摄像头，并重新布局了钨丝电流表及钨丝驱动控制，调光时一个人即可控制钨丝扫描，并同时观察钨丝位置变化和钨丝电流变化，使调光更方便更快捷。

图 1 （左）钨丝电流及钨丝驱动控制；（右）钨丝位置监控。

（3）科研进展

太赫兹行波管微结构研制

高功率宽频带小型化太赫兹真空电子放大器在军民领域具有重要的应用前景，其中太赫兹器件高频微结构制造是该技术的重要难点。LIGA 技术是制备高频微金属结构的有效制造方法，通过与埋丝工艺相结合，实现微波通道和电子通道交叉结合的太赫兹微金属结构器件的制造。相比于其它加工途径，该方法具有大深宽比、可实现最小尺寸为 0.2μm、结构表面粗糙度优于 30nm 以及工艺重复性好等优点。埋丝工艺是针对太赫兹微结构的特殊要求而开发的，它需要在光刻胶内预制有机丝线，在完成 LIGA 技术的电铸工艺后将其溶解掉，形成所需要的电子通道，而微波通道则是利用 LIGA 技术的深度光刻和电铸完成。该技术通过多年的工艺优化，解决了多项工艺难题，基本完成了所需要的太赫兹微金属结构器件的制造。图 2 左侧为埋丝的光刻胶结构，结构中间胶中为有机丝线，右侧为电铸完成的金属铜结构，有机丝已经去除。



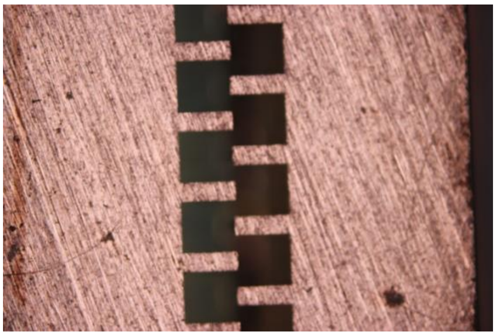


图 2 太赫兹行波管微结构照片。左侧为埋丝的光刻胶结构，右侧为电铸完成的金属铜结构。

4W1A-X 射线成像实验站

（1）开放运行

X 射线成像站在 2018 年度为用户提供两轮专用光运行，第一轮专用光完成用户课题 29 个，提供有效机时 878 小时,机时利用率 98.31%；第二轮专用光完成用户课题 27 个，提供有效机时 936 小时，机时利用率 100%。实验站为用户提供了白光形貌术、衍射增强 CT、纳米分辨 CT 以及原位加温、加载的成像研究等实验技术。

（2）实验站升级改造

A）大数据的网络存储

为满足实验数据采集中大数据的快速传输和存储需求，实验站新增磁盘阵列一台，该设备拥有 16Gb 光纤通道，配置 12 块 4TB 的 NLSAS 磁盘，磁盘总空间为 45TB，可使用有效存储空间为 31TB，并可提供后续的盘位扩充升级功能。经实际测试，实时网络传输速度大于 59MB/s（多台电脑同时数据传输），满足实验站数据采集的实时传输需求。

B）微米相衬成像实验平台改进

2018 年度对实验站的微米相衬成像实验平台进行了升级改造，原有的实验平台是在双轴衍射仪上搭建的，缺点是只能手动进行能量的切换；新建立的实验平台基于两套精度为 0.01 角秒的 Kohzu KTG15D 高精度旋转台，通过对晶体布拉格角的自动调整和一晶、二晶及探测器在 x 方向的自动平移实现成像能量的自动切换，能量调节范围 5-25keV。

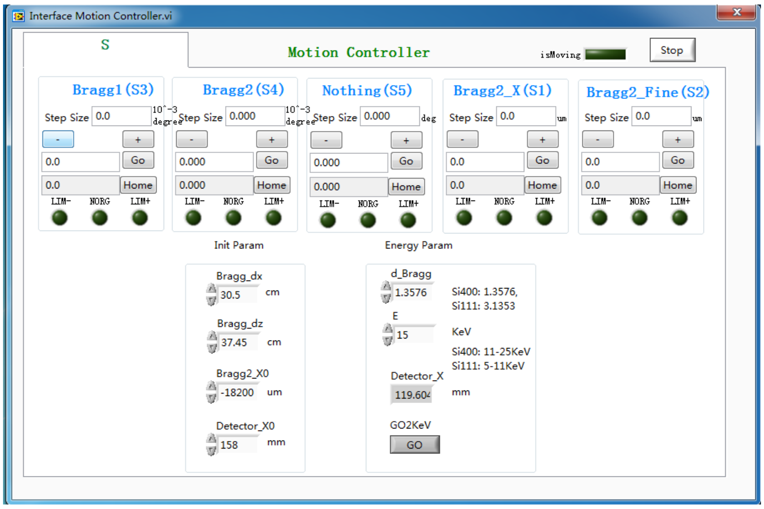


图 1 新建立的微米相衬成像实验平台及控制程序界面

（3）科研成果

本年度基于实验站的科研工作发表研究论文共计 28 篇，其中 SCI I 区文章 5 篇。中科院物理研究所汪卫华课题组与香港城市大学杨勇课题组合作，利用纳米分辨三维成像技术对非晶态合金的微观结构进行了研究，发现了钯基、镐基、镁基等非晶态合金的三维纳米不均匀结构。研究发现非晶态合金中存在从纳米到微米尺度的密度涨落，其密度涨落受温度、应力的影响，呈现出密度渐变、层状、四极矩状等特征。该研究结果对于理解非晶态物质形成的玻璃转变过程、非晶态合金的力学性能等有着十分重要的意义。研究结果发表在 *Acta Materialia*,155(2018)69-79。北京科技大学宋西平课题组利用纳米分辨三维成像技术对纳米多孔镁材料进行研究，发现材料内部具有大量的纳米孔隙，其纳米孔的直径约为 300nm，孔隙率可达 72%。纳米多孔镁材料凭借其纳米多孔特性，显示出独特的电化学特征，其电极电位相比片状金属镁更负，并且呈现孔隙率越高电极电位更负特点。相比其他镁材料具有更好的制氢性能，在 50℃时，其制氢速度可达 311ml/g/min，是目前制氢速度最快的材料之一。相关的研究成果发表在 *Journal of Power Sources*,395(2018)8-15。

4W1B-X 射线荧光微分析实验站

（1）开放运行

2018 年度 X 射线荧光微分析站共开放两轮专用光。专用光期间为用户提供机时共 1829 小时，机时使用率和共享率均接近 100%，完成课题数 36 个，研究涉及环境科学、生命科学、地质科学和古生物、人文考古和国家需求等。用户来自国内高等院校和中科院各研究所，专用光期间荧光站为用户提供高通量微区荧光面扫描（mapping），入射光能量固定在 15.5 keV，样品处光斑尺寸为 50 μm（V）×70 μm（H）。

（2）实验方法和技术发展

A）高能同步辐射光源验证装置（HEPS-TF）——高能量分辨单色器系统通过验收

图 1 高分辨单色器系统及高能同步辐射光源验证装置项目工艺验收会

高能量分辨单色器系统是荧光站承担 HEPS-TF 项目中线站分总体的一个重要组成部分。高分辨单色器系统基于高指数晶体、（++）型几何排列方式，在能量大于 10kev 的硬 X 射线波段实现 10^{-7} 能量分辨率的单色器。主要针对核共振散射和 X 射线非弹性散射的实验要求，在硬 X 射线波段实现毫电子伏的能量分辨率，能够在几十毫电子伏范围内进行能量扫描。2018 年 10 月 29 日，"十二五"国家重大科技基础设施高能同步辐射验证装置通过了工艺验收会，并于 11 月 19 日通过财务、设备材料、档案专业组验收会。

B）高能同步辐射光源（HEPS）——高分辨谱学光束线站初步设计报告完成

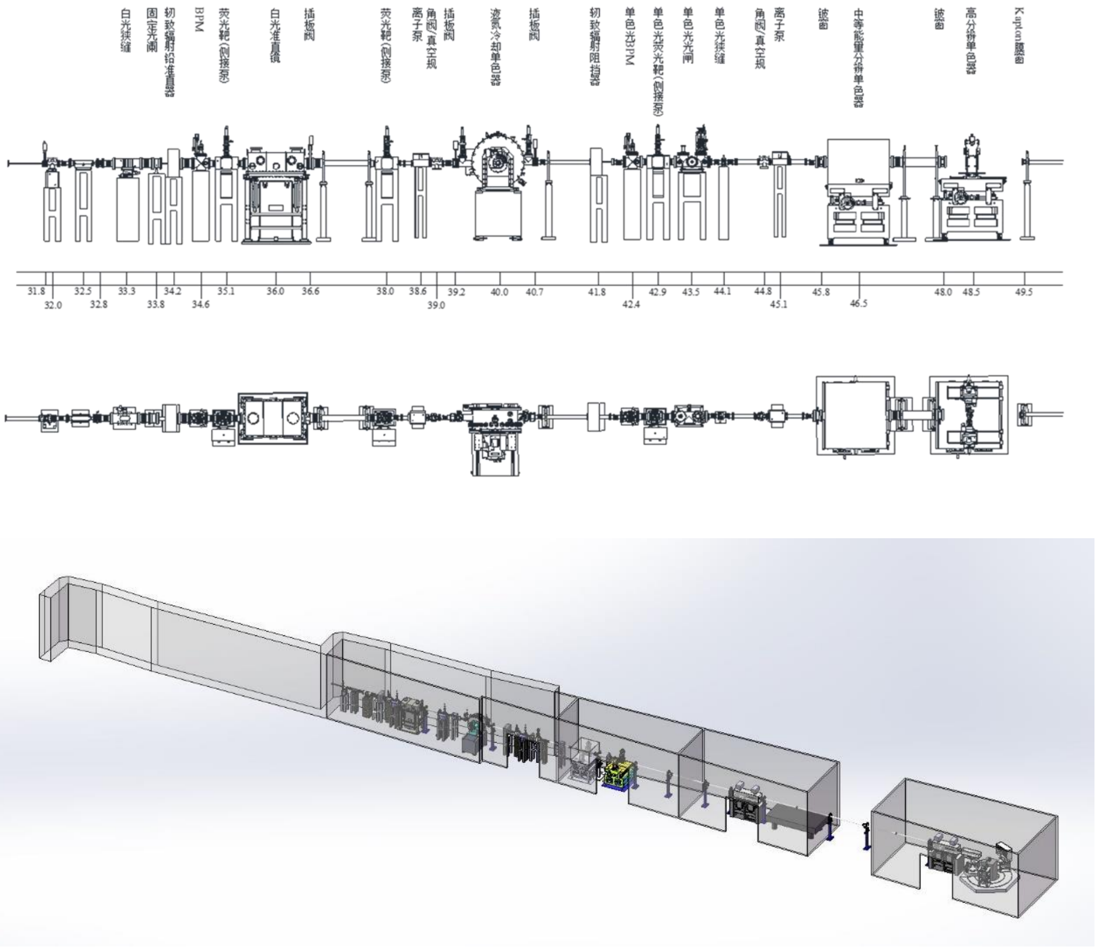


图 2 硬 X 射线高能量分辨谱学光束线站布局图

硬 X 射线高能量分辨谱学光束线站是荧光站承担 HEPS 项目中首批线站之一，科学目标在于获得材料的核能级超精细结构、声子态密度、芯能级电子跃迁等多种元激发信息，服务于凝聚态物理、化学、生物化学、材料学、地学、环境等多学科研究领域，以及与特种材料相关的国家战略需求领域。该光束线站采用一线两站的模式，分别为核共振散射（NRS）站和高分辨非弹性散射谱学站（包括共振非弹性 X 射线散射 RIXS 和 X 射线 Raman 散射 XRS），设计指标为提供 2 meV 的 NRS，100 meV 能量分辨的 RIXS 和 1 eV 能量分辨的 XRS。2018 年度先后完成了《高能同步辐射光源-高分辨谱学线站设计报告》和《高能同步辐射光源-高分辨谱学线站概算》等工作，主要涉及光源与前端区、光束线、关键部件（白光准直镜、双晶单色器、中等能量分辨四晶单色器、核共振散射用高分辨单色器、聚焦镜）设计与技术参数、光学部件的机械设计、实验站及谱仪设计、线站安装调试、控制系统等。

C）实验站方法学研究——von Hamos 型高分辨 X 射线发射谱

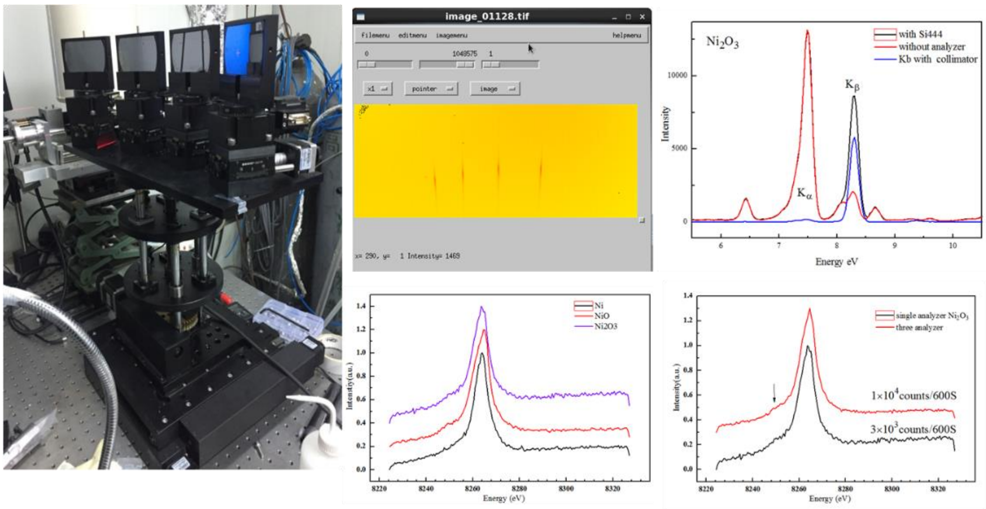


图 3　4 元 Von Hamos 型 XES 谱仪及 Ni 元素的 K_β 发射谱

X 射线发射谱（XES）是研究物质电子结构的重要谱学技术，可探测金属原子的自旋态、配位环境等信息。相对基于 Rowland 圆几何的 XES 谱仪，von Hamos 型 XES 谱仪的优势在于在固定激发能量下可一次性完成几十 eV 范围内 XES 探测，避免依靠机械机构驱动进行的能量扫描。von Hamos 型 XES 谱仪是对 XRF 站现有实验方法和探测能力的重要补充和延伸，同时也是为高能光源的高分辨谱学线站的建设做技术储备。2018 年度 XRF 站完成了 4 元 0.5 米半径 Von Hamos 型谱仪的设计、组装、调试工作，并在 4W1B 光束线完成测试，获得了 Co 和 Ni 两种元素的 K_β 发射谱。2019 年度 XRF 站拟继续完善 Von Hamos 型高分辨 X 射线发射谱技术并向用户进行推广。

（3）科研成果

2018 年度 4W1B 用户共发表文章 11 篇，其中 SCI 一区 4 篇；实验站人员共发表文章 18 篇，第一通讯作者 8 篇。其中，Tingting Zhou 等人在 *Environmental Science: Nano* 发表的文章“Comparative assessment of the chronic effects of five nano-perovskites on Daphnia magna: a structure-based toxicity mechanism”研究了钙钛矿纳米材料在生物体内的空间分布及其毒性机制；Qiao Xu 等人在 *J. Agric. Food Chem* 发表的文章“Influence of Humic Acid on Pb Uptake and Accumulation in Tea Plants”研究了胡敏酸对茶树不同组织吸收累计 Pb 的影响，为控制茶园产品铅污染提供了理论依据；Tian Zhang 等人在 *Science of the Total Environment* 发表的文章“Assessment of heavy metals pollution of soybean grains in North Anhui of China”研究了重金属在大豆中的原位分布情况，进一步揭示了不同金属在大豆中积累分布规律；Yunyun Li 等人在 *Ecotoxicology and Environmental Safety* 发表的文章“Nanoelemental selenium alleviated the mercury load and promoted the formation of high-molecular-weight mercury- and selenium-containing proteins in serum samples from methylmercury-poisoned rats”发现纳米硒能够降低甲基汞中毒大鼠体内汞，且能促进血清中高分子量含汞、硒蛋白的形成。

4W2-高压实验站

（1）开放运行

在 2018 年的两轮专用光期间，实验站为来自 29 个单位的 60 个用户课题共提供机时 1829.22 小时，其中线站机时 6.40 小时，用户机时 1822.82 小时。在实验站人员的努力之下，本年度专用光共享率达到了 99.65%，运行效率达到 100%。

高压实验站 2018 年共发表文章 49 篇，其中有 7 篇一区文章，16 篇二区文章。在已发表文章中，用户文章为 47 篇，实验站发表文章 2 篇。

（2）用户研究成果

A）非外延材料金属@半导体纳米晶体在高压条件下的固态相变行为

金属/半导体杂化纳米晶体(NCs)在大晶格失配情况下，特别是单晶半导体壳层包覆在金属核上的情况，是新出现的具有改进等离子体激子耦合和更强的光-物质-自旋相互作用的纳米材料。为了实现广泛的固态应用，研究这些非外延生长的核/壳型纳米材料在一些特殊条件下的结构稳定性和相变是很重要的。考虑到非外延生长单晶半导体壳和金属核之间的晶格失配引起的界面应变较大，北京理工大学材料科学研究中心张加涛教授领导的科研团队利用高分辨拉曼光谱和同步辐射角散 X 射线衍射（ADXRD）研究了这种非外延生长 Au@CdS 核/壳型 NCs 在高压条件下的固态相变行为。实验结果表明，由于 Au 核与 CdS 壳层之间的强晶格相互作用，这种 Au@CdS 核/壳型 NCs 在高压下具有与 CdS 纳米晶体和 Au 纳米粒子不同的结构演变行为，稳定性也有所提高。这些史无前例的特征表明，非外延生长的核/壳型 NCs 能够改进异质界面和相互作用，这一方法可能开辟新的潜在应用。这篇文章发表在 *Journal of Physical Chemistry Letters*(2018)上。

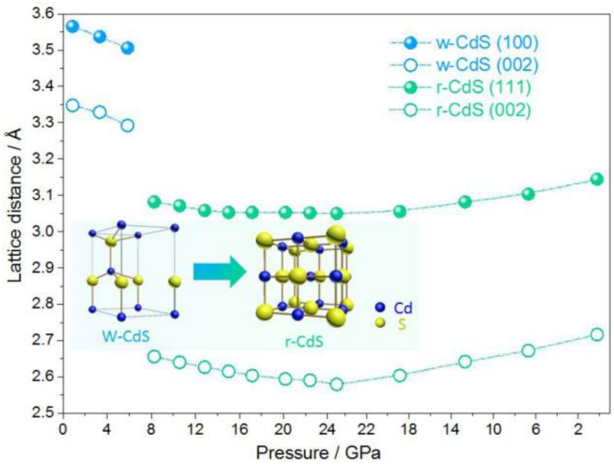


图 1 非外延材料 Au@CdS 核/壳型 NCs 晶格间距随压力的变化关系

B）具有“鲁班凳”结构的非致密性硼酸盐 ZCL 材料

通常情况下，被静水压力挤压的物质总是在各个方向上收缩。然而，为了满足某些特殊的性能需求，应避免这种压力引起的收缩。在某些极端情况下，材料需要沿指定方向保持长度不变，即在静水压力下呈现零线性压缩性（ZLC）行为。然而，探索在静水压力下表现出 ZLC 特性的材料是极其困难的。迄今为止，只发现少数 ZLC 材料，而且几乎都是具有致密结构的超硬材料。为了探索非致密的 ZLC 材料，中科院理化所林哲帅研究员领导的研究团队提出了一种类似于 2500 年前中国木工发明的“鲁班凳”结构的结构模型。将该模型应用于硼酸盐中，借助同步辐射原位高压 X 射线衍射（XRD）技术，在 AEB_2O_4(AE=Ca 和 Sr)中发现了 ZLC，该 ZLC 具有独特的“鲁班凳”结构，从而在压力诱发的膨胀效应和收缩效应之间获得微妙的机械平衡。AEB_2O_4材料的 ZLC 行为，加上其非常宽的紫外透明窗口，可能导致一些独特但重要的应用。这项研究利用“鲁班凳”模型为在非致密结构体系中探索 ZLC 材料开辟了一条新的途径。这篇文章发表在 *Advanced Materials*(2018)上。

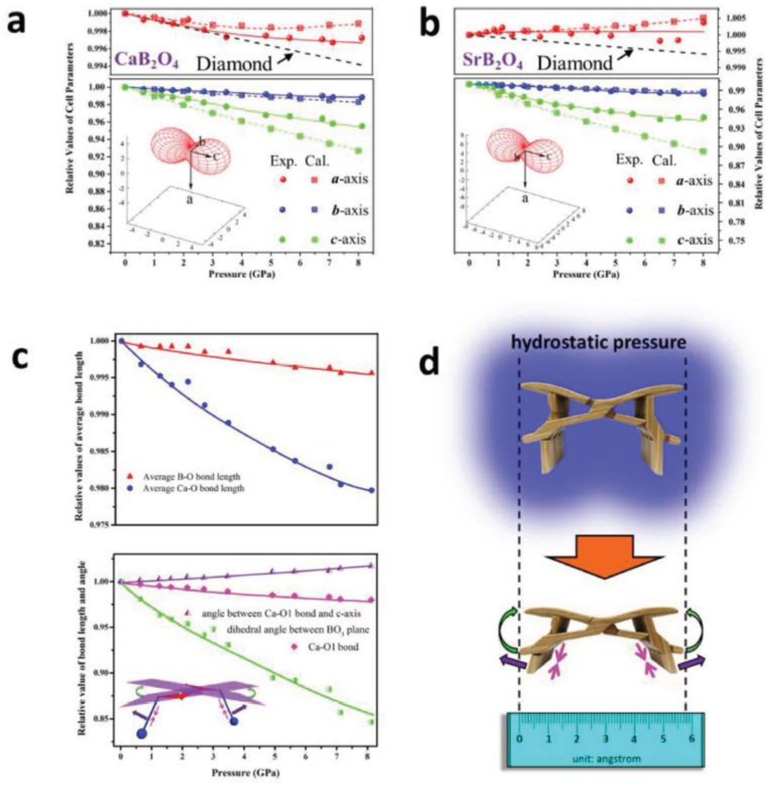


图 2 压力和温度导致的结构变化

（3）实验站设备改进

在运行费的支持下，近年来高压实验站一直在对设备进行小规模的更换与升级，并发展

相关的实验技术。今年的工作主要有：

- 购置原位加压与测压的主要部件；
- 激光打孔设备升级；
- 激光加热拉曼实验装置调试；
- 发展动态加载下材料的热效应测量实验方法；
- 发展外加热 dDAC 快速加载方法。

4B7A-中能实验站

（1）开放运行

4B7A-中能实验站在 2018 年第一轮同步辐射专用光期间为用户提供有效机时 924H，共完成用户课题 20 个；在第二轮专用光期间，为用户提供有效机时 899H，共完成用户课题 30 个。此外，还为 4 个用户单位的 4 个课题提供了兼用光机时。

（2）科研成果

2018 年度，基于 4B7A-中能实验站发表的文章有 42 篇，主要涉及环境、能源、材料和光学计量等研究领域。其中一区文章为 11 篇。

4B7B-软 X 射线实验站

（1）开放运行

4B7B-软 X 射线实验站在 2018 年第一轮同步辐射专用光期间为用户提供有效机时 881H，共完成用户课题 14 个；在第二轮专用光期间，为用户提供有效机时 923H，共完成用户课题 30 个。

（2）科研成果

基于 4B7B-软 X 射线实验站发表的文章有 23 篇，其中一区文章 9 篇。主要涉及同步辐射方法学、能源材料、纳米材料、环境科学、催化剂表征和光学等研究领域。

Fe_3O_4/白云母外延异质结构 Verwey 跃迁的单轴应变调节研究

目前，可穿戴柔性电子设备材料的研究主要基于高聚物基底，而这种基底导致镀层材料难于行程晶型，严重阻碍了柔性自旋电子学的发展。高居里温度、100%自旋极化的 Fe_3O_4 在柔性自旋电子学中有潜在的应用前景。天津大学理学院白海力课题组，通过直接在白云母称

底上生长不同厚度的 Fe_3O_4 材料，研究了动态应变对 Fe_3O_4 Verwey 相变的影响。在向内(向外)弯曲异质结构中，Verwey 转变温度增加(下降)。通过在软 X 光学系统进行的 FeL 2，3 边 X 射线吸收光谱分析中获得了可逆调制是由于不同弯曲态下 Fe 离子在四面体中心和八面体中心上的价态变化而产生的电荷重构效应。同时，电荷重构效应增强了 Fe_3O_4/白云母异质结在弯曲状态下的净磁矩。在这项研究中，软 X 光学系统 XANES 测量提供了强有力的证据证明了不同弯转方向的异质结构具有不同的 Fe^{+2}/ Fe^{+3} 率，成为该文的主要论据。

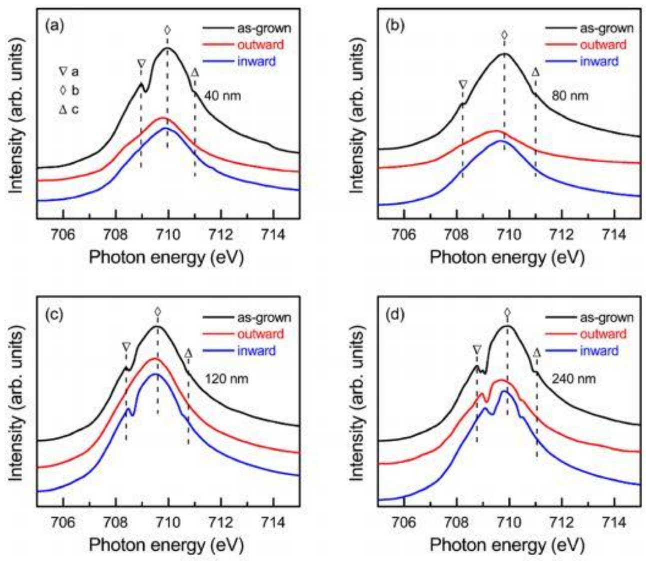


图 1 Fe_3O_4/白云母异质结构中 Fe 元素 $L_{2,3}$ 边 X 射线吸收谱(见上图)。(W.C.Zheng et al., Applied Physics Letters,2018, 113,14,142403)

4B8-真空紫外实验站

（1）开放运行

4B8-真空紫外实验站主要开展稳态真空紫外荧光光谱、器件对 VUV 光响应的测试、圆二色谱探测等实验。兼用光下也可以运行。荧光光谱实验可以异地远程控制。

2018 年，4B8 束线夏季和秋季专用光运行 1622h，兼用光运行 180h，接待 29 个用户。用户发表论文 26 篇。

（2）科研成果

中山大学黄丰课题组发现采用“保形”退火合成(CAS)方法得到的二维 MgO 对 VUV 光具有超灵敏的光响应，能分辨极弱的真空紫外光信号和高的外量子效率。研究结果为研制高响应率、低功耗的一体化 VUV 器件提供了思路。文章发表在 ACS Appl. Mater. Interfaces.。

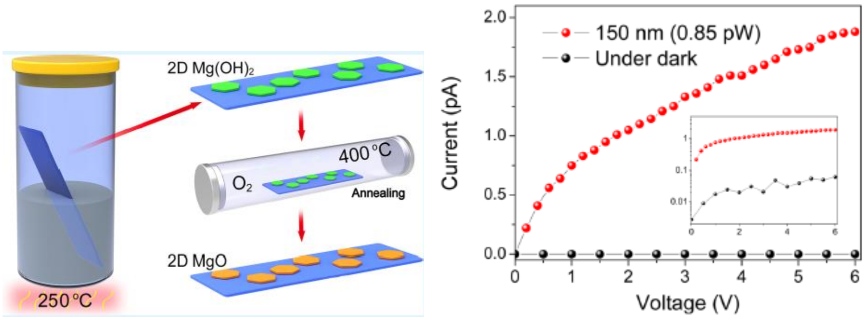


图1 二维MgO合成过程原理图和二维MgO器件的电流-电压曲线

基于低温同步辐射真空紫外荧光光谱技术，中山大学梁宏斌课题组研究了 Ce^{3+}-Pr^{3+}掺杂 $BaY_2Si_3O_{10}$ 材料的发光性质及所涉及的能量传递问题，相关论文发表在 Inorg. Chem.上。

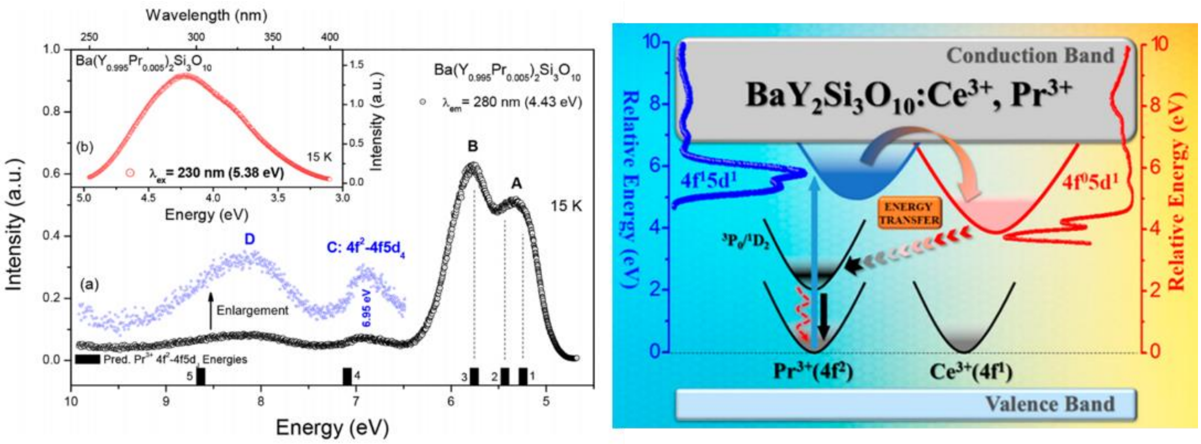


图 2 低温 VUV 荧光光谱及 Ce^{3+}, Pr^{3+}共掺杂样品中能量传递过程

4B9A-衍射实验站

（1）开放运行

2018 年，X 射线衍射实验站为用户提供了两轮专用光和一轮兼用光的实验机时。第一轮专用光(2018 年 6 月 17 日至 7 月 27 日)为用户提供有效机时 864 小时，完成的课题数 25 个。第二轮专用光（2018 年 10 月 1 日至 11 月 11 日）为用户提供有效机时 900 小时，完成的课题数 32 个。用户实验内容涵盖了 X 射线常规粉末衍射，X 射线原位高温衍射，X 射线原位低温衍射，X 射线反射，异常衍射， Mythen 探测探测器原位衍射，X 射线吸收等。

（2）实验技术发展

开展利用 Mythen 探测器单模块进行粉末衍射实验方法研究，编写了 Mythen 探测器空间位置角度标定程序，编写了 Mythen 探测器衍射数据采集程序的编写，完成了标定数据拟合程

序的编写。程序界面如下图所示：

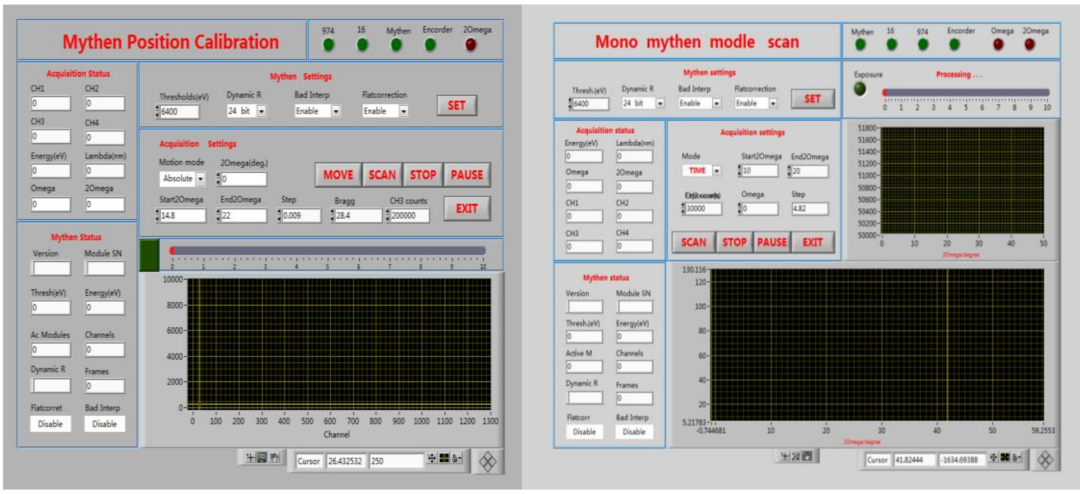
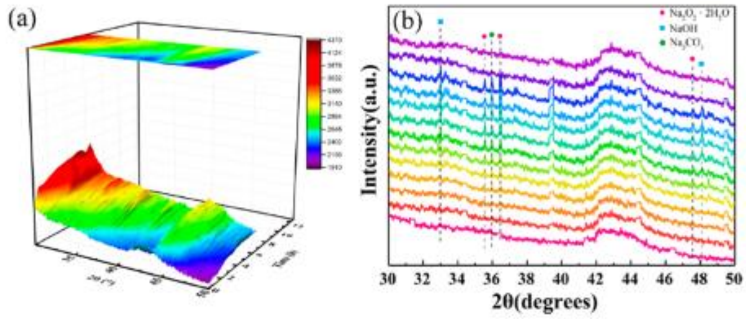


图 1 标定程序界面（左）；数据采集程序界面（右）。

（3）科研成果

2018 年 X 射线衍射实验站用户共发表 16 篇文章， 其中典型用户成果如下：

CoO/CoP Heterostructured Nanosheets with an O–P Interpenetrated Interface as a Bifunctional Electrocatalyst for Na–O_2 Battery

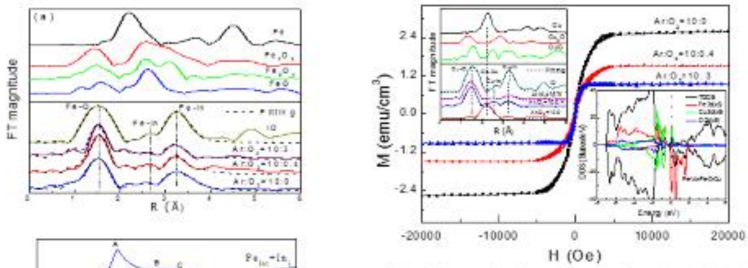


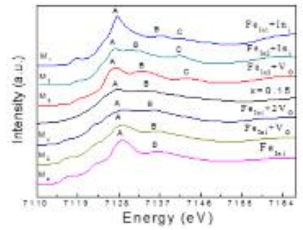
Na-O_2电池CoO/CoP异质结构催化剂的In Situ XRD 图

❖通过水热法合成Co的纳米片前驱体，磷化煅烧调控制备出具有CoP层的CoO/CoP异质结构，并将其作为催化剂应用于钠空气电池的正极。通过原位XRD检测到充放电产物$Na_2O_2\cdot 2H_2O$及少量NaOH，Na_2CO_3杂质的生成和分解。

中国科学院大学刘向峰课题组 ACS Catal. 2018, 8, 8953–8960（IF=11.384)

氧分压调控Fe/Cu共掺杂In_2O_3稀磁氧化物的局域结构与磁性

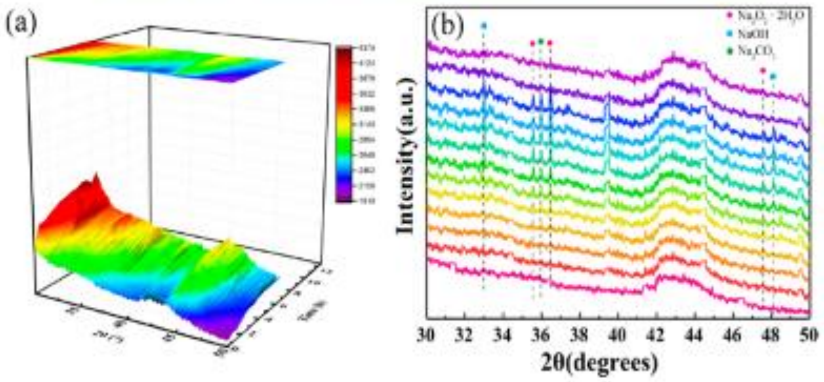




1. 同步辐射EXAFS拟合证实：掺杂Fe原子全部晶格替位In离子。增加氧分压，掺杂Cu原子逐步由金属Cu团簇转为晶格In替位。
2. XANES近边多重散射理论计算，证实掺杂磁性元素第一近邻存在Fe-Vo(氧空位)缺陷结构。
3. 结合第一性原理计算，证实Fe-Vo-Fe磁极子调节铁磁有序。

天津理工大学安玉凯课题组 *J. Phys. Chem. C* 2018, 122, 18759-18768.

CoO/CoP Heterostructured Nanosheets with an O–P Interpenetrated Interface as a Bifunctional Electrocatalyst for Na–O_2 Battery



(a) 3D in situ XRD patterns of Na-O2 cell at a current density of 200 mA g-1

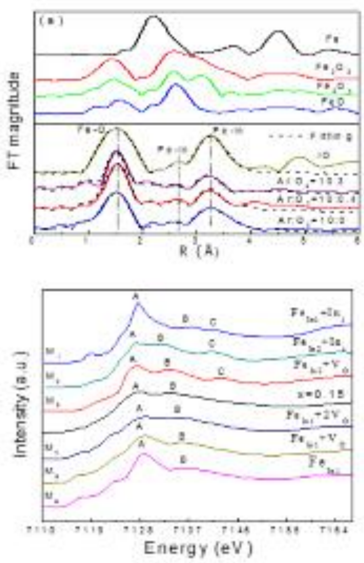
(b) 2D in-situ XRD patterns

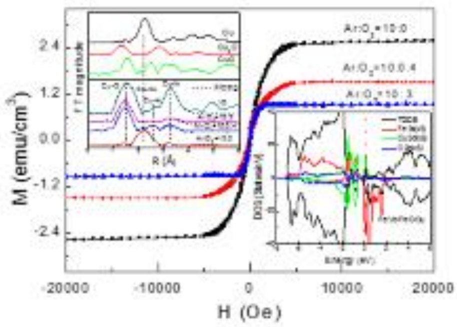
The situ XRD spectrum confirms that there are a small amount of NaOH , Na2CO3 and $Na_2O_2{\cdot}2H_2O$ production

University of Chinese Academy of Sciences-
Liu Xiangfeng Research Group

ACS Catal. 2018, 8, 8953–8960

Influences of Oxygen Partial Pressure on the Cu Metal Clustering and the In2O3 Films





1. The EXAFS reveal that Fe dopants substitute In3+ sites of In2O3 lattice for all the films , while the majority of Cu dopants exist as Cu metal clusters in the (In0.89Fe0.06Cu0.05)2O3 films without oxygen partial pressure 。
2. The first-principles calculations suggest that the xygen vacancy defects can well mediate the magnetic interaction for the ferromagnetic coupling between Fe atoms 。

Tianjin University of Technology-
Yukai An Research Group

J. Phys. Chem. C **2018, 122, 18759-18768.**

4B9B-光电子能谱实验站

（1）开放运行

2018 年，光电子能谱站为用户提供了两轮专用光和兼用光：第一轮专用光为用户提供有效机时 900 小时，完成的课题数 21 个；第二轮专用光为用户提供有效机时 958 小时，完成的课题数 19 个；兼用光为用户提供有效机时 596 小时，完成的课题数 6 个。装置在 2018 年内平稳运行。

（2）科研进展

2018 年度我们的用户正式共发表 SCI 文章 33 篇（1 区 20 篇、2 区 9 篇、3 区 2 篇、4 区 2 篇），其中北京科技大学邢献然团队的“通过相界面应变制备巨大极化的超四方薄膜”工作（见附图 1），发表在 Science 期刊上[Science 361, 494 (2018)]；天津大学郑雪莉及加拿大多伦多大学 Edward H. Sargent 团队“理论预测和原位同步辐射实现电催化产氧活性位的调控”工作，发表在 Nature Chemistry 期刊上[Nature Chemistry 10,149 (2018)]；澳大利亚卧龙岗大学杜轶团队的“蓝磷中电子超晶格引发的带隙调制”工作，发表在 ACS Nano 期刊上[ACS Nano 12, 5059 (2018)]。

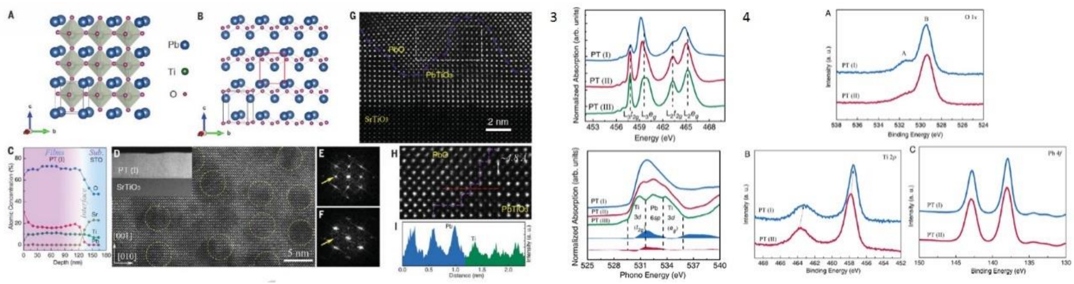


图 1 （左） $PbTiO_3/PbO$ 外延薄膜的微观结构；（右）PT(I)、PT(II)、 PT(III)薄膜 Ti L2,3 边、O K 边吸收谱及 PT(I)、 PT(II)薄膜光电子谱。

2018 年度用户科技论文汇总目录

序号	文章题目	期刊，年份，卷（期），页码	作者
1	1D/1D Hierarchical Nickel Sulfide/Phosphide Nanostructures for Electrocatalytic Water Oxidation	ACS Energy Lett., 2018, 3 (9), pp 2021–2029	Huai Qin Fu, 刘鹏飞 & 杨化桂
2	2000~2800 eV 软 X 光入射 CsI(TI)闪烁体的探测效率标定	Infrared and Laser Engineering,Vol.47 No.9（2018）	王 静，韦敏习
3	A 3D Calcium Spirobifluorene Metal-Organic Framework: Single-Crystal-to-Single-Crystal Transformation and Toluene Detection by a Quartz Crystal Microbalance Sensor	Inorganic chemistry, 57, 4, 1689, 2018	X. Fang, Z. Duan
4	A CaMnAl-hydrotalcite solid basic catalyst toward the aldol condensation reaction with a comparable level to liquid alkali catalysts	Green Chem.,2018, 20, 3071-3080	Weihan Bing, Yangdong Wang & 卫敏
5	A comparative study on structures and magnetic properties of SmCo4B and SmCo3.1Fe0.9B ribbons	Physica B: Condensed Matter, 卷：545, 页：176–181, 2018	Chi Xiang, Sun Jibing, Zhang Ying
6	A convenient dynamic loading device for studying kinetics of phase transitions and metastable phases using symmetric diamond anvil cells	High Pressure Research, 2018,38,32-40	程虎，李延春
7	A flattened enantiornithine in mid-Cretaceous Burmese amber: morphology and preservation	Science Bulletin,63, 235–243	Lida Xing, Ryan C. McKellar
8	A high temperature furnace for in-situ SAXS measurement of coal carbonisation	Int. J. Oil, Gas and Coal Technology, DOI: 10.1504/IJOGCT.2018.10017596	Fei Xie, Zhihong Li
9	A highly active and durable iron/cobalt alloy catalyst encapsulated in N-doped graphitic carbon nanotubes for oxygen reduction reaction by a nanofibrous dicyandiamide template	J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 5962-5970	Li An，夏定国 & 孙在成
10	A method to fabricate high-aspect-ratio microstructures using PMMA photoresist	Microsystem Technologies,24,1223-1226, 2018	张天冲

11	A modified discrete tomography for improving the reconstruction of unknown multi-gray-level material in the ‘missing wedge’ situation	J. Synchrotron Rad., (2018). 25 1847-1859	Jianhong Liu, Yong Guan
12	A modular strategy for decorating isolated cobalt atoms into multichannel carbon matrix for electrocatalytic oxygen reduction	Energy & Environmental Science,2018, 11, 1980-1984	张华斌，楼熊文
13	A New Cretaceous Insect with a Unique Cephalo-thoracic Scissor Device	Current Biology, 28, 438-443, 2018	Ming Bai, Benjamin Wipfler
14	A new Sm(Co,Fe,Cu)4B/Sm2(Co,Fe,Cu)7 cell structure with the coercivity of up to 5.01 T	Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 卷：458, 页：66–74, 2018	Chi Xiang, Sun Jibing
15	A Novel Graphdiyne-Based Catalyst for Effective Hydrogenation Reaction	ACS Appl. Mater. Interfaces, DOI: 10.1021/acsami.8b00566	Han Shen, 李永军 & Zhiqiang Shi
16	A novel material of nanoporous magnesium for hydrogen generation with salt water	Journal of Power Sources, 395 (2018) 8–15	Jingru Liu, Xiping Song
17	A Novel Method for Manufacturing High-Performance Layered Silicate/Epoxy Nanocomposites Using an Epoxy-Diamine Adduct to Enhance Compatibility and Interfacial Reactivity	MACROMOLECULAR MATERIALS AND ENGINEERING, 303(6),1800065, 2018	魏然，王小群
18	A Polymer Encapsulation Strategy to Synthesize Porous Nitrogen‐Doped Carbon‐Nanosphere‐Supported Metal Isolated‐Single‐Atomic‐Site Catalysts	Advanced Materials,2018, 30, 1706508	Aijuan Han, 王定胜 & 李亚栋
19	A Pyrolysis‐Free Covalent Organic Polymer for Oxygen Reduction	Angew. Chem. Int. Ed.,2018, 130, 12747-12752	Jianning Guo, Zhenhai Xia & Zhonghua Xiang
20	A rationally designed Fe-tetrapyridophenazine complex: a promising precursor to a single-atom Fe catalyst for an efficient oxygen reduction reaction in high-power Zn–air cells	Nanoscale,2018, 10, 16145-16152	Zheng Kun Yang ,An-Wu Xu
21	A soft X-ray cryogenic radiometer built on BSRF	Radiat Detect Technol Methods,2(2): 1-6, 2018	Zhao xiaoliang, Zhao yidong
22	A versatile MOF-based trap for heavy metal ion capture and dispersion	Nature Communications, volume 9, Article number: 187 (2018)	Yaguang Peng, Hongliang Huang & Chongli Zhong

23	Absolute intensity calibration and application at BSRF SAXS station	Nuclear Inst. And Methods in Physics Research A, Volume 900, 2018, Pages 64-68	Fei Xie, Zhihong Li
24	Absorption, refraction and scattering retrieval in X-ray analyzer-based imaging	J. Synchrotron Rad., (2018). 25, 1206–1213	Zhili Wang
25	Acceleration of crystal transformation from crystal form II to form I in Polybutene-1 induced by nanoparticles	POLYMER, 150, 119-129, 2018	张星星，孙昭艳
26	Activating Titania for Efficient Electrocatalysis by Vacancy Engineering	ACS Catalysis,8, 4288 (2018)	Haifeng Feng, 杜轶
27	Active Sites Engineering toward Superior Carbon‐Based Oxygen Reduction Catalysts via Confinement Pyrolysis	Small,2018, 14, 1800128	Sidi Wang, 江海龙 & 宋礼
28	Adaptive weighted total variation regularized phase retrieval in differential phase-contrast imaging,	Optical Engineering, 57(5), 053108, 2018	Yan Wang ,Peiping Zhu
29	Addition of Pd on La0.7Sr0.3CoO3 Perovskite To Enhance Catalytic Removal of NOx	Ind. Eng. Chem. Res.,2018, 57 (2), pp 521–531	Dongyue Zhao, 李新刚
30	Aging shapes the distribution of copper in soil aggregate size fractions	Environ Pollut,233 (2018) 569-576	Qi Li, Wenli Chen
31	Alumina‐Supported CoFe Alloy Catalysts Derived from Layered‐Double‐Hydroxide Nanosheets for Efficient Photothermal CO2 Hydrogenation to Hydrocarbons	Advanced Materials,2018, 30, 1704663	Guangbo Chen, 张铁锐
32	Ammonia-Induced Size Convergence of Atomically Monodisperse Au6 Nanoclusters	J. Phys. Chem. C,2018, 122 (11), pp 6405–6411	Ting Huang, 孙治湖 & Yong Jiang
33	Amorphous FeCoPOx nanowires coupled to g-C3N4 nanosheets with enhanced interfacial electronic transfer for boosting photocatalytic hydrogen production	Applied Catalysis B: Environmental, Volume 238, 2018, Pages 161-167	Peng Zhou, 郭少军
34	Amplified Spontaneous Emission Based on 2D Ruddlesden–Popper Perovskites	Advanced Functional Materials, 28(17): 1707006	Li Meili

35	An additive dripping technique using diphenyl ether for tuning perovskite crystallization for high-efficiency solar cells	Nano Research,11(5): 2648-2657, 2018	Huang Di
36	An efficient sodium-ion battery consisting of reduced graphene oxide An efficient sodium-ion battery consisting of reduced graphene oxide bonded Na 3 V 2 (PO 4) 3 in a composite carbon network	Journal of Alloys and Compounds, 767 (2018) 131-140	Erlong Gu, Xiaosi Zhou
37	An IAEA multi-technique X-ray spectrometry endstation at Elettra Sincrotrone Trieste: benchmarking results and interdisciplinary applications	Journal of synchrotron radiation, 25(1): 189-203	Karydas, Andreas Germanos
38	Anchoring black phosphorus quantum dots on molybdenum disulfide	Applied Catalysis B: Environmental, 238 (2018) 444–453	Rongjuan Feng, Gang Liu
39	Anion De/Intercalation in Nickel Hydroxychloride Microspheres: A Mechanistic Study of Structural Impact on Energy Storage Performance of Multianion-Containing Layered Materials	ACS Appl. Energy Mater.,2018, 1 (4), pp 1522–1533	Sixian Fu, 李广社
40	Anomalous compression behaviour in Nd2O3 studied by x-ray diffraction and Raman spectroscopy	AIP ADVANCES, 2018, 8, 025019	蒋升
41	Applications of thin film plastic scintillator in measurement of soft x rays generated from Z-pinch implosion	REVIEW OF SCIENTIFIC INSTRUMENTS, 89, 103112 (2018)	Qingyuan Hu
42	Aromatic motifs dictate nanohelix handedness of Tripeptides	ACS Nano,2018,DOI: 10.1021/acsnano.8b06173	Qiguo Xing, Yuefei Wang, Wei Qi
43	Arsenic associated with gypsum produced from Fe(III)-As(V) coprecipitation: Implications for the stability of industrial As-bearing waste	Journal of Hazardous Materials, Volume 360, 2018, Pages 311-318	王少峰，贾永峰
44	Arsenic concentrations and speciation in wild birds from an abandoned realgar mine in China	Chemosphere,Volume 193, 2018, Pages 777-784	Fen Yang, Chaoyang Wei
45	Arsenic release and speciation during the oxidative dissolution of arsenopyrite by O2 in the absence and presence of EDTA	Journal of Hazardous Materials, Volume 346, 2018, Pages 184-190	王少峰，贾永峰
46	Assembly of Hollow Carbon Nanospheres on Graphene Nanosheets and Creation of Iron–Nitrogen-Doped Porous Carbon for Oxygen Reduction	ACS Nano, 2018, 12 (6), pp 5674–5683	Haibo Tan, Jing Tang & Yusuke Yamauchi

47	Assessment of heavy metals pollution of soybean grains in North Anhui of China	Science of the Total Environment, 646, 914–922, 2018	Tian Zhang, Zhenyan He
48	Atomic Cobalt Covalently Engineered Interlayers for Superior Lithium‐Ion Storage	Advanced Materials, 2018, 30, 1802525	王昌达，陈双明 & 宋礼
49	Atomic Iridium Incorporated in Cobalt Hydroxide for Efficient Oxygen Evolution Catalysis in Neutral Electrolyte	Advanced Materials,2018, 30, 1707522	Youkui Zhang, 江海龙 & 宋礼
50	Atomic Iron Catalysis of Polysulfide Conversion in Lithium–Sulfur Batteries	ACS Appl. Mater. Interfaces, 10, 19311 (2018)	Zhenzhen Liu, 杨文
51	Atomically dispersed Au1 catalyst towards efficient electrochemical synthesis of ammonia	Science Bulletin,Volume 63, Issue 19, 2018, Pages 1246-1253	Xiaoqian Wang,吴宇恩
52	Atomic-Level Co3O4 Layer Stabilized by Metallic Cobalt Nanoparticles: A Highly Active and Stable Electrocatalyst for Oxygen Reduction	ACS Appl. Mater. Interfaces,2018, 10 (8), pp 7052–7060	Min Liu, Jingjun Liu & Feng Wang
53	Au@Pd Bimetallic Nanocatalyst for Carbon–Halogen Bond Cleavage: An Old Story with New Insight into How the Activity of Pd is Influenced by Au	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (7), pp 4244–4255	Rui Liu
54	Ball-in-ball hierarchical design of P2-type layered oxide as high performance Na-ion battery cathodes	Electrochimica Acta,265,284-291, 2018	HuiXie, 储旺盛
55	Band Gap Modulated by Electronic Superlattice in Blue Phosphorene	ACS Nano,12, 5059 (2018)	庄金呈，杜轶
56	Bay‐annulated indigo based near‐infrared sensitive polymer for organic solar cells	Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry, 56(2): 213-220, 2018	Zhu Jingshuai
57	Bifunctional CO oxidation over Mn-mullite anchored Pt sub-nanoclusters via atomic layer deposition	Chem. Sci., 2018, 9, 2469-2473	刘潇，单斌 & 陈蓉
58	Binding of Cd by ferrihydrite organo-mineral composites: Implications for Cd mobility and fate in natural and contaminated environments	Chemosphere, Volume 207, 2018, Pages 404-412	Huihui Du, Caroline L.Peacock &黄巧云
59	Bio-inspired FeN5 moieties anchored on a three-dimensional graphene aerogel to improve oxygen reduction catalytic performance	J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 18488-18497	Jianshe Huang, Xiurong Yang
60	Biomimetic twisted plywood structural materials	National Science Review, 5:703-714,2018	Si-Ming Chen, Shu-Hong Yu

61	Biphenyl Triarylamine Hole Transport Material for Highly Efficient and Low-Temperature Solution-Processed p–i–n Perovskite Solar Cells	Journal of Nanoscience and Nanotechnology,18(11): 7374-7379, 2018	Meng Juan
62	Bisphenylsulfone- based polycatenar mesogens via CuAAC click reaction: Self-assembly and their applications in waterpurification	Tetrahedron,74, 2735-2742, 2018	Huifang Cheng, Xiaohong Cheng
63	Black Phosphorus Quantum Dot Ti3C2 MXene Nanosheet Composites for Efficient Electrochemical Lithium Sodium-Ion Storage	Advanced Energy Materials, 2018, 1801514	Ruijin Meng, Jinhu Yang
64	Boosting the thermoelectric performance of misfit-layered (SnS)1.2(TiS2)2 by a Co- and Cu-substituted alloying effect	J. Mater. Chem. A, 2018, ***6***, 22909-22914	Cong Yin, 昂然
65	Bridge-type interface optimization on a dual-semiconductor heterostructure toward high performance overall water splitting	J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 7871-7876	Chong Wang, Jingbin Han & 卫敏
66	Bright multicolor emitting phosphors Ba2Gd(BO3)2Cl: RE3+(RE = Dy,Sm, Tb, Eu) for multifunctional application	Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 2018, Volume 29, Issue 10, pp 8465–8472	Lei Zhao
67	Bulk Microstructure of Modern Composites Studied Jointly by Impulse Acoustic Microscopy and X-ray Microtomography Techniques	AIP Conf. Proc.,1981, 020040 (2018)	Vadim Levin
68	CaMnAl-hydrotalcite solid basic catalyst toward aldol condensation reaction with a comparable level to liquid alkali catalysts	Green Chemistry, 2018, 20, 3071	Weihan Bing, Wei Min
69	Carbon nitride supported Fe2 cluster catalysts with superior performance for alkene epoxidation	Nature Communications, volume 9, Article number: 2353 (2018)	Shubo Tian, 王定胜
70	Catalytic Performance of Gold Supported on Mn, Fe and Ni Doped Ceria in the Preferential Oxidation of CO in H2-Rich Stream	Catalysts, 2018, 8(10), 469	李淑娜,秦张峰 & 王建国
71	Cation Conformational Changes of 1-Butyl-3-methylimidazolium Halides at High Pressures	J. Phys. Chem. C,2018,122,9320-9331	Fengjiao Chen, Jianbo Liu, 王霖
72	Cavitation in Poly(4-methyl-1-pentene) during Tensile Deformation	J Phys Chem B,122(14),4159-4168, 2018	Chen Ran, Men Yongfeng
73	Characteristics of airborne lead in Hangzhou, southeast China: Concentrations, species, and source contributions based on Pb isotope ratios and synchrotron X-ray fluorescence based factor analysis	Atmospheric Pollution Research,9, 607–616, 2018	Jing Fang, Qi Lin

74	Characterization and on-line adjustment of the sagittal-bent Laue crystal profile,	J. Synchrotron Rad., (2018)25,1346-1353	Weiwei Dong, Lingfei Hu
75	Characterization of Kinoform X-Ray Lens Using Image Stitching Method Based on Marked Structures	IGTA 2018, CCIS, 875, pp.88-97,2018	Wenqiang Hua, Keliang Liao
76	Characterization of magnetic properties in a 316 stainless steel after deformation and irradiation	Fusion Engineering and Design,133 (2018) 125–129	徐超亮
77	Chemical speciation of lead in secondary fly ash using X-ray absorption spectroscopy	Chemosphere, Volume 197, 2018, Pages 362-366	Shulei Tian, 于梅娟 & Qifei Huang
78	Chemically activating MoS2 via spontaneous atomic palladium interfacial doping towards efficient hydrogen evolution	Nature Communications, (2018) 9:2120	Zhaoyan Luo, Junjie Ge
79	Chlorine levels and species in fine and size resolved atmospheric particles by X-ray absorption near-edge structure spectroscopy analysis in Beijing, China	Chemosphere,196 (2018) 393-401	Jie Ouyang, Ling-Ling Ma
80	Chromium detoxification in arbuscular mycorrhizal symbiosis mediated by sulfur uptake and metabolism	Environmental and Experimental Botany, Volume 147, 2018, Pages 43-52	Songlin Wu, 陈宝东
81	CO2 activation promotes available carbonate and phosphorus of antibiotic mycelial fermentation residue-derived biochar support for increased lead immobilization	Chemical Engineering Journal,334 (2018) 1101–1107	Yuchen Liu, Xiangdong Zhu
82	Co‐Based Catalysts Derived from Layered‐Double‐Hydroxide Nanosheets for the Photothermal Production of Light Olefins	Advanced Materials,2018, 30, 1800527	Zhenhua Li, 张铁锐
83	Co‐doping Nitrogen/Sulfur through a Solid‐State Reaction to Enhance the Electrochemical Performance of Anatase TiO2 Nanoparticles as a Sodium‐Ion Battery Anode	ChemElectroChem, 5, 316 (2018)	Wei Song, Zhong Li
84	Colloidal Synthesis of Ultrathin Monoclinic BiVO4 Nanosheets for Z-Scheme Overall Water Splitting under Visible Light	ACS Catal.,2018, 8 (9), pp 8649–8658	董春伟，刘毅
85	Columnar Liquid Crystals Self-Assembled by Minimalistic Peptides for Chiral Sensing and Synthesis of Ordered Mesoporous Silica	Chemistry of Materials,2018,30(21): 7902-7911	Yuefei Wang, Wei Qi
86	Combined DFT and XPS Investigation of Cysteine Adsorption on the Pyrite (1 0 0) Surface	Minerals,8, 366 (2018)	X Zheng, Jinlan Xia
87	Combined electron and structure manipulation on Fe containing N-doped CNTs to boost bifunctional oxygen electrocatalysis	ACS Appl. Mater. Interfaces, 2018, 10 (42), pp 35888–35895	Lei Zhao, Cheng Deng & Mengfu Zhu

88	Comparative assessment of the chronic effects of five nano-perovskites on Daphnia magna: a structure-based toxicity mechanism	Environ. Sci.: Nano,5, 708–719, 2018	Tingting Zhou, Wenhong Fan
89	Comparative Investigation of Semipolar (11-22) GaN Layers on m-Plane Sapphire with Different Nucleation Layers	Journal of Nanoscience and Nanotechnology,18(11), 7446-7450, 2018	Lianshan Wang
90	Comparison of magnetic properties of austenitic stainless steel after ion irradiation	Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B,427 (2018) 87-90	徐超亮
91	Comparison of the quality of single-crystal diamonds grown on two types of seed substrates by MPCVD	Journal of Crystal Growth,491 (2018) 89-96	Yun Zhao, Chengming Li
92	Competitive sorption of Ni and Zn at the aluminum oxide/water interface: an XAFS study	Geochemical Transactions,2018, 19:9	Wenxian Gou, Wei Li
93	Compressibility and expansivity of anglesite ($PbSO_4$) using in situ synchrotron X-ray diffraction at high-pressure and high-temperature conditions	Physics and Chemistry of Minerals,2018,45,883-893	Bo Li,范大伟
94	Compression behavior and phase transition of β-Si_3N_4 under high pressure	Chinese Physics B,2018,27,056101	龚红霞,寇自力
95	Confined small-sized cobalt catalysts stimulate carbon-chain growth reversely by modifying ASF law of Fischer–Tropsch synthesis	Nature Communications,volume 9, Article number: 3250 (2018)	Qingpeng Cheng,Noritatsu Tsubaki & 李新刚
96	Conformation Directed Mpemba Effect on Polylactide Crystallization	CRYSTAL GROWTH & DESIGN,18(10), 5757-5762, 2018	Hu Cunliang, Li JQ; Jiang SC, Li HF, Luo CF, Chen JZ
97	Conformation Selected Direct Formation of Form I in Isotactic Poly(butene-1)	CRYSTAL GROWTH & DESIGN,18(4), 2525-2537, 2018	Jingqing Li, Jiang SC
98	Control of Luminescence in Eu^{2+}-Doped Orthosilicate-Orthophosphate Phosphors by Chainlike olyhedra and Electronic Structures	Inorg. Chem,2018, 57, 609−616	Lizhu He, Quanlin Liu
99	Control of supramolecular nanoassemblies by tuning the polarities of linkages and solvents	J. Mol. Liq., 272,1-7, 2018	Wei Xing, Xiaohong Cheng
100	CoO/CoP Heterostructured Nanosheets with an O-P Interpenetrated Interface as a Bifunctional Electrocatalyst for Na-O-2 Battery	ACS CATALYSIS,卷: 8, 期: 9, 页: 8953-8960, 2018	Wang Junkai,Liu Xiangfeng, Sun Limei

101	Copolymer dielectrics with balanced chain-packing density and surface polarity for high-performance flexible organic electronics	Nature communications,9(1): 2339, 2018	Ji Deyang
102	Copolymers of bis-diketopyrrolopyrrole and benzothiadiazole derivatives for high-performance ambipolar field-effect transistors on flexible substrates	ACS applied materials & interfaces,10(31): 25858-25865, 2018	Chen Jinyang,
103	Core–Shell ZIF-8@ZIF-67-Derived CoP Nanoparticle-Embedded N-Doped Carbon Nanotube Hollow Polyhedron for Efficient Overall Water Splitting	J. Am. Chem. Soc.,2018, 140 (7), pp 2610–2618	Yuan Pan,王定胜 & 李亚栋
104	Correlation between microstructures and mechanical properties of cryorolled CuNiSi alloys with Cr and Zr alloying	Materials Characterization, 卷：144，页：532-546, 2018	Wang Wei, Kang Huijun, Wang Tongmin
105	Coumarin-based emissive hexacatenars: synthesis, 2D, 3D self-assembly and photodimerization	J. Mater. Chem. C, 6, 10782-10792, 2018	Yulong Xiao, Xiaohong Cheng
106	Coupled Kinetics of Ferrihydrite Transformation and As(V) Sequestration under the Effect of Humic Acids: A Mechanistic and Quantitative Study	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (20), pp 11632–11641	Shiwen Hu, 石振清
107	Coupling confinement activating cobalt oxide ultra-small clusters for high-turnover oxygen evolution electrocatalysis	J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 15684-15689	Linlin Cao, 姚涛
108	Covalent Phenanthroline Framework Derived FeS@Fe3C Composite Nanoparticles Embedding in N‐S‐Codoped Carbons as Highly Efficient Trifunctional Electrocatalysts	Adv. Funct. Mater., 2018, 1803973	孔繁涛,孔爱国 & 单永奎
109	Crystal Imperfection Modulation Engineering for Functionalization of Wide Band Gap Semiconductor Radiation Detector	Advanced Electronic Materials, 4(2): 1700307, 2018	Ji Xu
110	Cu(II) sorption by biogenic birnessite produced by Pseudomonas putida strain MnB1: structural differences from abiotic birnessite and its environmental implications	CrystEngComm, 2018, 20, 1361-1374	刘雨薇,李艳 & 鲁安怀
111	Cube-like CuCoO nanostructures on reduced graphene oxide for H2 generation from ammonia borane	Inorg. Chem. Front.,2018,5, 1180-1187	Hechuang Zheng, Zhenhui Kang & 钟俊
112	Cu-Ni-Al spinel oxide as an efficient durable catalyst for methanol steam reforming	ChemCatChem,201801472	Liu, Yajie, Qing, Shaojun
113	Defect dipole-induced domain reorientation of NdFeO3–PbTiO3 thin films	Inorganic chemistry frontiers, Issue 5, pp 1156-1161, 2018	王艺霖，邢献然

114	Defect Effects on TiO2 Nanosheets: Stabilizing Single Atomic Site Au and Promoting Catalytic Properties	Advanced Materials,2018, 30, 1705369	Jiawei Wan, 王定胜
115	Defective Carbon–CoP Nanoparticles Hybrids with Interfacial Charges Polarization for Efficient Bifunctional Oxygen Electrocatalysis	Adv. Energy Mater.,2018, 8, 1703623	Yunxiang Lin, 江海龙 & 宋礼
116	Density fluctuations with fractal order in metallic glasses detected by synchrotron X-ray nano-computed tomography	Acta Materialia,155 (2018) 69-79	B. Huang, W.H. Wang
117	Dirac Signature in Germanene on Semiconducting Substrate	Advanced Science,10.1002/advs.201800207	Jincheng Zhuang, 杜轶
118	Direct formation of form I' crystals in polybutene-1/polypropylene blend enhanced by cold crystallization	Polymer,卷: 156 页: 30-38, 2018	Zhong Zhenxing , Su Zhaohui
119	Direct information retrieval after 3D reconstruction in grating-based X-ray phase-contrast computed tomography,	J. Synchrotron Rad., (2018). 25, 1222-1228	Zhao Wu,Yangchao Tian
120	Direct observation of noble metal nanoparticles transforming to thermally stable single atoms	Nature Nanotechnology,volume 13, pages856–861 (2018)	Shengjie Wei, Zhi Li & 李亚栋
121	Direct observation of the kinetics of gas–solid reactions using in situ kinetic and spectroscopic techniques	React. Chem. Eng.,2018, 3, 668	Adam S. Hoffman, Dante A. Simonetti
122	Direct transformation of bulk copper into copper single sites via emitting and trapping of atoms	Nature Catalysis,1, pages781–786 (2018)	Yunteng Qu, 吴宇恩 & 李亚栋
123	Directional Self‐Assembly and Photoinduced Polymerization of Diacetylene‐Containing Platinum (II) Terpyridine Complexes	Chemistry–A European Journal, 24(58): 15596-15602, 2018	Fang Shishi
124	Dissolution and phase transformation processes of hausmannite in acidic aqueous systems under anoxic conditions	Chemical Geology, Volume 487, 2018, Pages 54-62	Yao Luo, 邱国红
125	Dithienylmethanone-Based Cross-Conjugated Polymer Semiconductors: Synthesis, Characterization and Application in Field-Effect Transistors	J. Polym. Scien., Part A: Polym. Chem., 2018, 56, 1012–1019.	史柯利,于贵
126	Do Olefin Hydrogenation Reactions Remain Structure Insensitive over Pt in Nanostructured Pt-on-Au Catalyst?	ACS Catal.,2018, 8 (11), pp 10254–10260	Jia-Wei Yang, 徐伯庆

127	Donkey milk lysozyme ameliorates dextran sulfate sodium-induced colitis by improving intestinal barrier function and gut microbiota composition	Journal of Functional Foods,48,,144-152	LunJiang,Huiyuan Guo
128	Doping-Enhanced Short-Range Order of Perovskite Nanocrystals for Near-Unity Violet Luminescence Quantum Yield	Journal of the American Chemical Society, 140, 31, 9942-9951, 2018	Zi-Jun Yong, 孙洪涛
129	Doping-induced structural phase transition in cobalt diselenide enables enhanced hydrogen evolution catalysis	Nature Communications, (2018) 9:2533	Ya-Rong Zheng, Min-Rui Gao
130	Dynamic influence of S fertilizer on Cu bioavailability in rice (Oryza sativa L.) rhizosphere soil during the whole life cycle of rice plants	Journal of Soils and Sediments, doi.org/10.1007/s11368-018-2009-0	Lijuan Sun, 施积炎
131	Earliest use of birch bark tar in Northwest China: evidence from organic residues in prehistoric pottery at the Changning site	Veget Hist Archaeobot, (2018). doi.org/10.1007/s00334-018-0694-7	Huiyun Rao, Yimin Yang
132	Effect of Destined High-Pressure Torsion on the Structure and Mechanical Properties of Rare Earth-Based Metallic Glasses	Metallurgical and Materials Transactions A, 2018, 49, 842-847	W Zhao, W Zhao
133	Effect of gold photocathode contamination on a flat spectral response X-ray diode	Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 884 (2018) 75–81	Kun-lun Wang, Xiao-dong Ren
134	Effect of microstructural features on the failure behavior of hybrid laser welded AA7020	FATIGUE & FRACTURE OF ENGINEERING MATERIALS & STRUCTURES,2018,41:2010-2023	Y.N. Hu, S.C. Wu
135	Effect of nanopore confinement on the thermal and structural properties of heneicosan	THERMOCHIMICA ACTA, 卷: 664 页: 57-63, 2018	Deng Shuping, Lan Xiaozheng
136	Effect of Protective Agents upon the Catalytic Property of Platinum Nanocrystals	ChemCatChem,2018, 10, 2433-2441	Muyu Yan, 陈文星 & Yan Liu & Chao Lian
137	Effect of Soil Fulvic and Humic Acids on Pb Binding to the Goethite/Solution Interface: Ligand Charge Distribution Modeling and Speciation Distribution of Pb	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (3), pp 1348–1356	熊娟, 谭文峰

138	Effect of Structure on Electric Properties of Polyimide/Al2O3 Composites Investigated by SAXS	12th IEEE International Conference on the Properties and Applications of Dielectric Materials,2018, p 960-965	Jialong Li, Jinghua Yin
139	Effect of support composition on the structural and catalytic properties of Ru/AlOOH–SiO2 catalysts for benzene selective hydrogenation	Catal. Sci. Technol.,2018, 8, 1435-1446	Gongbing Zhou, Gongbing Zhou
140	Effect of Surface Fe-Sn Intermetallics on Oxide Films Formation of Stainless Steel in High Temperature Water	HIGH TEMPERATURE MATERIALS AND PROCESSES, 2018, 37(4): 387-395	赵艳，管建军
141	Effects of high pressure on the electrical resistivity and dielectric properties of nanocrystalline SnO 2	Scientific Reports,2018,8,5086	Wenshu Shen, 高春晓
142	Effects of Mineral Compositions on Matrix Diffusion and Sorption of 75Se (IV) in Granite	Environmental science & technology,52,3,1320-1329, 2018	X. Yang, 刘春丽
143	Effects of Mn average oxidation state on the oxidation behaviors of As(III) and Cr(III) by vernadite	Applied Geochemistry,Volume 94, 2018, Pages 35-45	张爽，殷辉
144	Effects of Particle Size on Voltage Fade for Li-Rich Mn-Based Layered Oxides	ACS Omega, 2018, 3, 11136-11143	Yuxuan Zuo, 夏定国
145	Effects of ultrasonication on the interfacial interactions between poly (3-hexylthiophene) and graphene oxide	Soft matter, 14(40): 8172-8181, 2018	Zhang Xuan
146	Efficient and Robust Hydrogen Evolution: Phosphorus Nitride Imide Nanotubes as Supports for Anchoring Single Ruthenium Sites	Angew. Chem. Int. Ed.,2018, 57, 9495-9500	Jian Yang, 吴宇恩
147	Efficient assembly of hierarchical NaY aggregates by using an organosilane modified SDA	Microporous and Mesoporous Materials,264,92-103, 2018	赵晓萌，巩雁军，李志宏
148	Efficient design principle for interfacial charge separation in hydrogen-intercalated nonstoichiometric oxides	Nano Energy,Volume 53, 2018, Pages 887-897	Zhenao Gu, Xiaoqiang An & Li-Min Liu
149	Efficient ternary non-fullerene polymer solar cells with PCE of 11.92% and FF of 76.5%	Energy Environ. Sci.,2018, 11, 841--849	张苗，张福俊
150	Efficient Ternary Polymer Solar Cells with Two Well-Compatible Donors and One Ultranarrow Bandgap Nonfullerene Acceptor	Adv. Energy Mater., 2018, 8, 1702854	马晓玲，张福俊
151	Efficient U(VI) Reduction and Sequestration by Ti2CTx MXene	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (18), pp 10748–10756	Lin Wang,石伟群

152	Elastic properties and thermal expansion of lead-free halide double perovskite Cs2AgBiBr6	Computational Materials Science,2018,141,49-58	Liyuan Dong, 李伟，Fengxia Wei ， Yajun Qi ， U. Ramamurty
153	Electrocatalysis on Separator Modified by Molybdenum Trioxide Nanobelts for Lithium–Sulfur Batteries	Advanced Materials Interfaces, Volume5, Issue15, 2018, 1800243	Sumair Imtiaz, zhaoliang zhang
154	Electrochemical prepared phosphorene as a cathode for supercapacitors	Journal of Alloys and Compounds,770: 26-34, 2018	Z, Lei
155	Electron density modulation of NiCo2S4 nanowires by nitrogen incorporation for highly efficient hydrogen evolution catalysis	Nature Communications, 9, Article number: 1425 (2018)	Yishang Wu, 郑旭升 Xiangheng Xiao & Gongming Wang
156	Electronic structure engineering to boost oxygen reduction activity by controlling the coordination of the central metal	Energy & Environmental Science,2018, 11, 2348-2352	Yunhu Han, 王定胜 & 李亚栋
157	Engineering cobalt defects in cobalt oxide for highly efficient electrocatalytic oxygen evolution	ACS Catalysis,8,5,3803-3811, 2018	Rongrong Zhang, Ji-Jun Zou
158	Enhanced Adsorption of p-Arsanilic Acid from Water by Amine-Modified UiO-67 as Examined Using Extended X-ray Absorption Fine Structure, X-ray Photoelectron Spectroscopy, and Density Functional Theory Calculations	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (6), pp 3466–3475	田晨,林樟
159	Enhanced Detectivity and Response Time of Perovskite Photodetector by Modifying PEDOT: PSS with Dimethyl Sulfoxide-Flushing	Journal of Nanoscience and Nanotechnology,18(11): 7380-7386, 2018	Qin Zilun
160	Enhanced kinetics of polysulfide redox reactions on Mo2CCNT in lithium–sulfur batteries	Nanotechnology,29 (2018) 295401 (11pp)	Rameez Razaq, haoliang Zhang
161	Enhanced photocatalytic hydrogen evolution activity of carbon and nitrogen self-doped TiO2 hollow sphere with the creation of oxygen vacancy and Ti3+	Materials Today Energy, Volume 10, 2018, Pages 132-140	Dainan Zhang, Quanjun Xiang
162	Enhanced scintillation of Ba3In(B3O6)3 based on nitrogen doping	Journal of Solid State Chemistry,258 (2018) 351–357	Z.X. Wang, G.M. Cai
163	Enhanced switchable photovoltaic response and ferromagnetic of Co-doped BiFeO3 based ferroelectric thin films	Journal of Alloys and Compounds,742, 351 (2018)	L Zhang, 邢献然

164	Enhanced thermoelectric performance through grain boundary engineering in quaternary chalcogenide Cu2ZnSnSe4	AIP Advances,8, 045218 (2018)	朱英才，徐伟
165	Enhancing the Catalytic Activity of Co3O4 for Li–O2 Batteries through the Synergy of Surface/Interface/Doping Engineering	ACS Catal.,2018, 8 (3), pp 1955–1963	Rui Gao, 刘向峰
166	Enormously improved CH3NH3PbI3 film surface for environmentally stable planar perovskite solar cells with PCE exceeding 19.9%	Nano Energy,48,,43392, 2018	Yingguo Yang, Xingyu Gao
167	Environmentally persistent free radicals mediated removal of Cr(VI) from highly saline water by corn straw biochars	Bioresource Technology,260 (2018) 294–301	Nan Zhao, Jing Zhang
168	Epitaxial growth of flat antimonene monolayer: a new honeycomb analogue of graphene	Nano Lett. ,18, 2213 (2018)	Yan Shao,王业亮
169	Epitaxially grown monolayer VSe2: an air-stable magnetic two-dimensional material with low work function at edges	Science Bulletin,63, 419 (2018)	ZL Liu, 王业亮
170	Ethyne-Reducing Metal–Organic Frameworks to Control Fabrications of Core/shell Nanoparticles as Catalysts	ACS Catal.,2018, 8 (8), pp 7120–7130	张成华，李永旺
171	Evaluation of the clean characteristics and combustion behavior of hydrochar derived from food waste towards solid biofuel production	Bioresource Technology, 266 (2018) 275–283	Tengfei Wang, Yunbo Zhai
172	Evidence of the oxygen vacancies-induced room temperature ferromagnetism in multiferroic Co-doped LiNbO3 films	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS,卷: 768 页: 750-755, 2018	Ye Jiaxin, Liu Jiwen, An Yukai
173	Ex vivo detection of calcium phosphate and calcium carbonate in rat blood serum	Journal of structural biology, doi.org/10.1016/j.jsb.2018.11.010	Bao-Di Gou, Tian-Lan Zhang
174	Exfoliation of ultrathin FePS3 layers as a promising electrocatalyst for the oxygen evolution reaction	Chem. Commun.,2018, 54, 4481-4484	Wen Zhu,陈双明 & 宋礼
175	Expansivity of arsenopyrite (FeAsS) determined by in situ synchrotron X-ray diffraction experiment at high temperature and ambient pressure	High Temperatures-High Pressures, 2018,47,323-330	Xianxu Hu, 范大伟，周文戈
176	Experimental Observation of the High Pressure Induced Substitutional Solid Solution and Phase Transformation in Sb2S3	Scientific Reports, 2018, 8, 14795	Yingying Wang, Yanmei Ma, 张剑
177	Experimental Progress of Inertial Confinement Fusion Based on ShenGuang III Laser Facility in China	NUCLEAR FUSION, DOI: 10.1088/1741-4326/aabdb6	Shaoen Jiang, Feng Wang

178	Exploration of the Energetic Material Ammonium Perchlorate at High Pressures: Combined Raman Spectroscopy and X-ray Diffraction Study	J. Phys. Chem. C, 2018,122,15937-15944	Lei Kang, Qingguang Zeng
179	Exploring the energy transfer processes in Lu2(1-x)Y2xSiO5:Ce crystals	Journal of Rare Earths,36 (2018) 685e689	Tiantian Wang, Dongzhou Ding
180	Extracting structural information of higher coordination shells by analyzing EXAFS derivative spectrum	Physica Scripta,2018, 93, 125701	陈涛，胡天斗
181	Fabrication and photovoltaic effect of ZnO/silicon nanopillars heterojunction solar cell	Microsystem Technologies, 24:1919–1923, 2018	刘静，刘静
182	Fabrication of a Single‐Atom Platinum Catalyst for the Hydrogen Evolution Reaction: A New Protocol by Utilization of HxMoO3−x with Plasmon Resonance	ChemCatChem, 2018, 10, 946-950	Wei Liu，许群
183	Fabrication of absorption gratings with X-ray lithography for X-ray phase contrast imaging	International Journal of Modern Physics B, 32(13)1850163, 2018	王波，王波
184	Fabrication of microelectrodes on diamond anvil for the resistance measurement in high pressure experiment	Microsystem Technologies, 24:3193–3199, 2018	刘静,伊福廷
185	Fabrication of polymer composite films with carbon composite nanofibers doped MWNTs-OH for multilevel memory device application	Composites Part B, doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.08.045	Yuanyuan Liu, Jinghua Yin
186	Facet-dependent electrical and mechanical properties of polyhedral Cu2O under compression	Journal of Alloys and Compounds,2018,762,835-841	Shujia Li，刘才龙，隋永明，韩永昊
187	Facile “Spot-Heating” Synthesis of Carbon Dots/Carbon Nitride for Solar Hydrogen Evolution Synchronously with Contaminant Decomposition	Advanced Functional Materials, 2018, 28,1706462	Zhang, Gong,Liu, Huijuan
188	Facile one-pot synthesis of MOF supported gold pseudo-single-atom catalysts for hydrogenation reactions	Mater. Chem. Front.,2018, 2, 1024-1030	Zumin Wang, Ranbo Yu
189	Facile Preparation and Characterization of Soluble Aramid	Journal of Applied Polymer Science,135(23), 4634159	周胜，沈志豪
190	Facile synthesis of highly efficient ZnO/ZnFe2O4 photocatalyst using earth-abundant sphalerite and its visible light photocatalytic activity	Applied Catalysis B: Environmental, Volume 226, 2018, Pages 324-336	李艳，鲁安怀
191	Facile synthesis of NiAl-LDHs with tunable establishment of acid-base activity sites	Materials Chemistry and Physics, Volume 211, 2018, Pages 72-78	Xu Wu, Xianmei Xie

192	Fatty acid based phosphite ionic liquids as multifunctional lubricant additives in mineral oil and refined vegetable oil	Tribology International,123 (2018) 316–324	Ganlin Zheng, Tianhui Ren
193	Fe Isolated Single Atoms on S, N Codoped Carbon by Copolymer Pyrolysis Strategy for Highly Efficient Oxygen Reduction Reaction	ADVANCED MATERIALS, Adv. Mater. 2018, 1800588	Qiheng Li, Zhi Li
194	Fe5C2 nanoparticles as low-cost HER electrocatalyst: the importance of Co substitution	Science Bulletin,Volume 63, Issue 20, 2018, Pages 1358-1363	Siwei Li, 温晓东 & 马丁
195	Ferroelectric Field Effect Tuned Giant Electroresistance in La0.67Sr0.33MnO3/BaTiO3 Heterostructures	ACS Applied Materials & Interfaces,10, 40328, 2018	Dongxing Zheng, Haili Bai
196	Ferromagnetic Resonance of Facing-Target Sputtered Epitaxial γ'-Fe4N Films: The Influence of Thickness and Substrates	Journal of Physics D: Applied Physics,51, 245001, 2018	Zhenxun Lai, Wenbo Mi
197	FeS2/CoS2 Interface Nanosheets as Efficient Bifunctional Electrocatalyst for Overall Water Splitting	Small,2018, 14, 1801070	Yuxuan Li, Pinxian Xi
198	Fine Tuning the Heterostructured Interfaces by Topological Transformation of Layered Double Hydroxide Nanosheets	Ind. Eng. Chem. Res.,2018, 57 (31), pp 10411–10420	Yanqi Xu,赵宇飞 & Haohong Duan & Yu-Fei Song
199	First-principles study of CN point defects on sidewall surface of [0 0 0 1]-oriented GaN nanowires	Applied Surface Science,467: 293-297	Liao Hui
200	Fused-Ring Nonfullerene Acceptor Forming Interpenetrating J-Architecture for Fullerene-Free Polymer Solar Cells	Adv. Energy Mater.,2018, 8, 1800204	Dong Yan, 詹传郎
201	Gas Phase Electrolysis of Carbon Dioxide to Carbon Monoxide Using Nickel Nitride as the Carbon Enrichment Catalyst	ACS Appl. Mater. Interfaces,2018, 10 (44), pp 38024–38031	侯鹏飞, 康鹏
202	General synthesis and definitive structural identification of MN4C4 single-atom catalysts with tunable electrocatalytic activities	Nature Catalysis,1, 63-72 (2018)	Huilong Fei,段镶锋 & Yu Huang
203	Giant polarization in super-tetragonal thin films through interphase strain	Science,361, 494 (2018)	Linxing Zhang, 邢献然
204	Glass forming ability and bending plasticity evolutions in Zr-Co-Al bulk metallic glasses and their structural origin	Journal of Non-Crystalline Solids, Volume 488, 2018, Pages 52-62	K.M. Yu,蒋建中
205	Head-Tail Asymmetry Determines the Formation of Polymer Cubosomes or Hexasomes in a Rod-Coil Amphiphilic Block Copolymer	Angewandte Chemie International Edition, 57(32), 10132-10136, 2018	吕晓林, 沈志豪

206	Heavy metal behavior in “Washing-Calcination-Changing with Bottom Ash” system for recycling of four types of fly ashes	Waste Management, Volume 75, 2018, Pages 215-225	Fenfen Zhu, Yiqun Xiong
207	Heterogeneous catalytic reaction of SO_2 on the surface of ultrafine Fe_3O_4 particle by XANES	NUCLEAR TECHNIQUES, 2018, 41: 050101	张丹，丰伟悦
208	Heterogeneous Single‐Atom Catalyst for Visible‐Light‐Driven High‐Turnover CO_2 Reduction: The Role of Electron Transfer	Advanced Materials, 30, 13, 1704624, 2018	Chao Gao, 熊宇杰
209	Hierarchical Self‐Assembly in Liquid‐Crystalline Block Copolymers Enabled by Chirality Transfer	Angewandte Chemie International Edition, 57(38): 12524-12528, 2018	Huang Shuai
210	Hierarchically Ordered Structures of Disk-Cube Triads Containing Hexa-peri-Hexabenzocoronene and Polyhedral Oligomeric Silsesquioxane	Soft Matter, 14(32), 6774-6782, 2018	张伟，沈志豪
211	High pressure experimental studies on $Na_3Fe(PO_4)(CO_3)$ and $Na_3Mn(PO_4)(CO_3)$: Extensive pressure behaviors of carbonophosphates family	Journal of Physics and Chemistry of Solids,2018,115,248-253	Jing Gao,巫翔
212	High Pressure Induced in Situ Solid-State Phase Transformation of Nonepitaxial Grown Metal@Semiconductor Nanocrystals	J. Phys. Chem. Lett., 2018,9,6544-6549	纪穆为，王虹智，宫宇 张加涛
213	High pressure, a protocol to identify the weak dihydrogen bonds: experimental evidence of C–H···H–B interaction	Science China Chemistry, 2018,61,276-280	Guangyu Qi,王凯，邹勃
214	High-Efficiency All Polymer Solar Cell with a Low Voltage Loss of 0.56	ACS Appl. Energy Mater.,1, 2350−2357, 2018	陈小丰，王海侨
215	High-efficiency and air stable fullerene-free ternary organic solar cells	Nano Energy, 2018, 45, 177–183	安桥石，张福俊
216	High‐Efficient, Stable Electrocatalytic Hydrogen Evolution in Acid Media by Amorphous FexP Coating Fe2N Supported on Reduced Graphene Oxide	Advanced Science,Small 2018, 14, 1801717	Peng Yu,L ei Wang
217	Highly Efficient and Operational Stability Polymer Solar Cells Employing Non-Halogenated Solvent and Additive	ACS applied materials & interfaces, **2018**, *10* (28), pp 24075–24081	Zhao Jiao
218	Highly Sensitive Field-Effect Ammonia/Amine Sensors with Low Driving Voltage Based on Low Bandgap Polymers	Advanced Electronic Materials,2018,1800025	王志杰，张德清，刘子桐

219	Highly wettable and metallic NiFe-phosphate/phosphide catalyst synthesized by plasma for highly efficient oxygen evolution reaction	J. Mater. Chem. A,6, 7509 (2018)	Qixing Zhang, 周玉荣
220	High-performance Cu2+ adsorption of birnessite using electrochemically controlled redox reactions	Journal of Hazardous Materials, Volume 354, 15 July 2018, Pages 107-115	Xiong Yang,邱国红
221	High-performance FDTE-based polymer semiconductors with F···H intramolecular noncovalent interactions: Synthesis, characterization, and their field-effect properties	Dye and Pigm.,2018, 149,149–157	张卫锋,于贵
222	High-pressure dissociation of selenium and tellurium	Phys. Chem. Chem. Phys.,2018,20,6116-6120	李鑫，崔田，Wang Xin
223	High-pressure strength and compressibility of titanium diboride (TiB2) studied under non-hydrostatic compression	Journal of Physics and Chemistry of solids, 2018, 121, 256-260	梁浩,Haihua Chen,彭放
224	High-Pressure Synthesis of CeOCl Crystals and Investigation of Their Photoluminescence and Compressibility Properties	Crystal Growth & Design,2018,18,1843-1847	Leilei Zhang, Li Lei, Xianlong Wang
225	High-sensitivity QCM with multielectrode piezoelectric quartz crystal design	INTERNATIONAL JOURNAL OF APPLIED CERAMIC TECHNOLOGY, 卷: 15, 期: 3, 页: 751-757, 2018	Lei Ou, Tian Wenjie
226	Hybrid 0D−2D black phosphorus quantum dots−graphitic carbon nitride nanosheets for efficient hydrogen evolution	Nano Energy,50, 552 (2018)	WanyingLei, 刘鸣华
227	Hydrogen Evolution Reaction in Alkaline Media: Alpha- or Beta-Nickel Hydroxide on the Surface of Platinum?	ACS Energy Lett.,2018, 3 (1), pp 237–244	Xiaowen Yu,Jing Ma & Gaoquan Shi
228	Improving Ambipolar Semiconducting Properties of ThiazoleFlanked Diketopyrrolopyrrole-Based Terpolymers by Incorporating	Macromolecules,2018,51,6003-6010	马静，张德清刘子桐
229	Improving the Charge Carrier Transport and Suppressing Recombination of Soluble Squaraine-Based Solar Cells via Parallel-Like Structure	Materials,11(5): 759, 2018	Zhu Youqin
230	Improving the detection efficiency and modulation transfer function of lens-coupled indirect X-ray imaging detectors based on point spread functions simulated according to lens performance parameters	J. Synchrotron Rad., (2018). 25,1093-1105	Yanping Wang, Xiaoming Jiang

231	Improving the electrochemical performances of Li-rich Li1.20Ni0.13Co0.13Mn0.54O2 through a cooperative doping of Na+ and PO43− with Na3PO4	Journal of Power Sources, Volume 375, 2018, Pages 1-10	Yi Liu,刘向峰
232	Impurity and defect-related luminescence of Ce3+doped LiLa9(SiO4)6O2crystals upon UV-VUV, X-ray and cathode ray excitation	Optical Materials,84 (2018) 66–72	Vladimir A. Pustovarov, Konstantin V. Ivanovskikh
233	In Situ Synchrotron X-ray Diffraction and Raman Spectroscopy Studies of Gd@C82–S8 under High Pressure	J. Phys. Chem. C, 2018,122,10992-10998	Huanli Yao, 李延春，孙宝云
234	In Situ Time-Resolved X-ray Absorption Fine Structure and Small Angle X-ray Scattering Revealed an Unexpected Phase Structure Transformation during the Growth of Nickel Phosphide Nanoparticles	J. Phys. Chem. C, 2018, 122 (28), pp 16397–16405	谭圆圆, Hongying Yu & Shuqiang Jiao & 吴忠华
235	Increasing surface active Co2+ sites of MOF-derived Co3O4 for enhanced supercapacitive performance via NaBH4 reduction	Electrochimica Acta,Volume 289, 2018, Pages 319-323	Shujie Liu, Wei Zhang & 郑伟涛
236	Influence of annealing temperature on morphologies and crystallinity of pure and blended diketopyrrolopyrrole-containing oligothiophene thin films	Thin Solid Films, 645: 209-214, 2018	Yang Dan
237	Influence of aqueous sulfide on speciation of U(VI) adsorbed to nanomagnetite	Environmental Science-Nano, 2018, 5, 1981–1989	Yubing Sun, Jianhui Lan
238	Influence of Fe (II) on the Se (IV) sorption under oxic/anoxic conditions using bentonite	Chemosphere,193,376-384, 2018	J. He, 刘春丽
239	Influence of Humic Acid on Pb Uptake and Accumulation in Tea Plants	J. Agric. Food Chem,66, 12327−12334, 2018	Qiao Xu, Jiyan Shi
240	Influence of Regio-Configuration on the Phase Diagrams of Double-Chain Giant Surfactants	Macromolecules,51, 1110−1119, 2018	Xiao-Man Wang, Yu Shao,Wen-Bin Zhang
241	Influence of the bridges on prism-array lens focusing for high energy X-rays	Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A, 910:115–120, 2018	刘静，张伟伟，常广才
242	Influences of Oxygen Partial Pressure on the Cu Metal Clustering and Room Ferromagnetism of the (In0.89Fe0.06Cu0.05)2O3 Films	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C,卷: 122 期: 32 页: 18759-18768, 2018	Sun Xianke, An Yukai

243	Inhibition of Lysozyme Fibrillation by Gold Nanorods and Nanoparticles	Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Volume 18, Number 5, 2018, pp. 3087-3094(8)	Liang, Hongli, Weiyue Feng
244	Insight into crystal structure and Eu/Tb doped luminescence property of a new phosphate	Journal of Alloys and Compounds,762 (2018) 444-455	J. Zhang, G.M. Cai
245	Insight into Eu redox and Pr3+ 5d emission in KSrPO4 by VRBE scheme construction	Dalton Trans, 2018, 47, 306–313	Rongfu Zhou, Hongbin Liang
246	Insight into graphene/hydroxide compositing mechanism for remarkably enhanced capacity	Journal of Power Sources,399,238-245, 2018	Haoxiang Wang,郑伟涛
247	Insight into the biological effects of acupuncture points by X-ray absorption fine structure.	Analytical and Bioanalytical Chemistry, 410, 4959–4965, 2018	Chenglin Liu, Xinyi Zhang
248	Insights into Interfacial Synergistic Catalysis over Ni@ TiO2–x Catalyst toward Water–Gas Shift Reaction	Journal of the American Chemical Society,140,36,11241-11251	Ming Xu,卫敏
249	Insights into the effects of surface/bulk defects on photocatalytic hydrogen evolution over TiO2 with exposed {001} facets	Applied Catalysis B: Environmental, Volume 220, 2018, Pages 126-136	Hao Zhang, 李新刚 & 巩金龙
250	Insights on Active Sites of CaAl-Hydrotalcite as a High-Performance Solid Base Catalyst toward Aldol	ACS Catalysis,2018, 8, 656−664	Weihan Bing, Lirong Zheng
251	In‐situ Thermal atomization to Transfer Supported Metal Nanoparticles to Surface Enriched Ni Single atom catalyst	Angew. Chem. Int. Ed.,2018, 57, 1-7	Jian Yang, 吴宇恩
252	Interaction between Surface Charge-Modified Gold Nanoparticles and Phospholipid Membranes	Langmuir, 34,12583−12589, 2018	邢雪青，万顺，吴忠华
253	Interface chemistry and surface morphology evolution study for InAs/Al2O3 stacks upon in situ ultrahigh vacuum annealing	Applied Surface Science,443, 567 (2018)	Xinglu Wang, 董红
254	Interface engineered in situ anchoring of Co9S8 nanoparticles into a multiple doped carbon matrix: highly efficient zinc–air batteries	Nanoscale,2018, 10, 2649-2657	Yang Li, 张华斌 & 张建
255	Interface Engineering of High-Energy Faceted Co3O4/ZnO Heterostructured Catalysts Derived from Layered Double Hydroxide Nanosheets	Ind. Eng. Chem. Res.,2018, 57 (15), pp 5259–5267	Yanqi Xu,赵宇飞 & Haohong Duan & Yu-Fei Song

256	Introducing alkylthio side chains into acceptor units to improve the photovoltaic performance of a quinoxaline based D-A polymer	Organic Electronics,61, 197–206, 2018	林延锐，王海侨
257	Investigating the surface electronic structures of retired components and irradiated KDP crystals with different fluences by XANES spectroscopy	Optical Materials Express, 8(4),816-823, 2018	X IANGCAO L I , X IN J U
258	Investigation of the multiplet features of SrTiO3 in X‐ray absorption spectra based on configuration interaction calculations	Journal of Alloys and Compounds, 25, 777 (2018)	吴猛,王惠琼
259	Investigations of the valence states, cobalt ion distribution, and defect structures in Co-doped ITO films	Journal of Materials Research,Volume 33, Issue 16, 2018 , pp. 2336-2341	Zhen Lin, Yukai An
260	Ion‐Exchangeable Microporous Polyoxometalate Compounds with Off‐Center Dopants Exhibiting Unconventional Luminescence	Chemistry–A European Journal, Volume24, Issue39, 2018, Pages 9976-9982	Dan‐Dan Zhou,孙洪涛
261	Iron Plaque: A Barrier Layer to the Uptake and Translocation of Copper Oxide Nanoparticles by Rice Plants	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (21), pp 12244–12254	Cheng Peng, 柳建设 & 施积炎
262	Janus [3:5] Polystyrene–Polydimethylsiloxane Star Polymers with a Cubic Core	Macromolecules,51, 419−427, 2018	Peng-Fei Jin, Yu Shao, Wen-Bin Zhang
263	Lamellar Thickness Dependence of Crystal Modification Selection in the Syndiotactic Polystyrene γ-to-α/β Phase Transition Process	Macromolecules,51(2),497-503, 2018	Wang Hai, Men Yongfeng
264	Lattice Dynamics and Thermal Conductivity in Cu2Zn1–xCoxSnSe4	Inorg. Chem.,2018, 57 (10), pp 6051–6056	朱英才,徐伟
265	Layered Double Hydroxide‐Based Catalysts: Recent Advances in Preparation, Structure, and Applications	Adv. Funct. Mater.,2018, 1802943	Ming Xu,卫敏
266	Local conformation controlled crystallization of isotactic poly(butene-1)	Journal of Polymer Research,25, 219, 2018	Li, JQ; Jiang, SC; Li, HF; Luo, CF; Chen, JZ
267	Local structural changes during the disordered substitutional alloy transition in Bi2Te3 by high-pressure XAFS	Journal of Applied Physics,124, 065901 (2018)	郭志英,陈栋梁
268	Local structure and magnetic properties of Mn and Co co-doped SiC films	JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE-MATERIALS IN ELECTRONICS, 卷： 29, 期: 15, 页: 12927-12931, 2018	Sun Xianke, Liu Kuili, Xu Liuyang

269	Localization and Speciation of Chromium in Coptis chinensis Franch. using Synchrotron Radiation X-ray Technology and Laser Ablation ICP-MS	Scientific Reports,8, 8603, 2018	Wenli Huang, Zongsuo Liang
270	Local-structure change rendered by electronic localization-delocalization transition in cerium-based metallic glasses	Phys. Rev. B,97, 064104 (2018)	Qiang Luo, Jun Shen
271	Luminescence and Cationic-Size-Driven Site Selection of Eu3+ and Ce3+ Ions in Ca8Mg(SiO4)4Cl2	Inorg. Chem,2018, 57, 14872−14881	Weijie Zhou, Hongbin Liang
272	Luminescence and Energy Transfer between Ce3+ and Pr3+ in BaY2Si3O10 under VUV−vis and X-ray Excitation	Inorg. Chem.,2018, 57, 8414−8421	Rui Shi, Hongbin Liang
273	Manipulating the Structural and Electronic Properties of Epitaxial SrCoO2.5 Thin Films by Tuning the Epitaxial Strain	ACS Appl. Mater. Interfaces,10, 10211 (2018)	赵佳丽，奎热西
274	Measurement of semi-polar (11–22) plane AlN/GaN heterojunction band offsets by X-ray photoelectron spectroscopy	Applied Physics A,124(2), 130, 2018	Guijuan Zhao, Lianshan Wang
275	Mechanism of activity enhancement of the Ni based hydrotalcitederived materials in carbonyl sulfide removal	Materials Chemistry and Physics,卷：205, 页：35-43, 2018	Zhao Shunzheng, Yi Honghong
276	Mechanism of Significant Improvement of Large Strain Elasticity in Soft Propylene–Ethylene Random Copolymer via Blending with Hard Propylene–Ethylene Copolymer	Industrial & Engineering Chemistry Research, 57(14), 4967-4977, 2018	Zhao Jiayi, Men Yongfeng
277	Mercury transformations in resuspended contaminated sediment controlled by redox conditions, chemical speciation and sources of organic matter	GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA, 220 (2018) 158–179	Wei Zhu, Ulf Skyllberg
278	Metallic CuCo2S4 nanosheets of atomic thickness as efficient bifunctional electrocatalysts for portable, flexible Zn-air batteries	Nanoscale,2018, 10, 6581-6588	Yuxuan Li,Pinxian Xi
279	Microstructural Evolution Underlying the Ternary Stages of the Elastic Behaviors for Poly(ether-b-amide) Copolymer Elastomers	JOURNAL OF POLYMER SCIENCE, PART B: POLYMER PHYSICS ,56, 855–864, 2018	朱平，董侠
280	Microstructure evolution effect on high-temperature thermal conductivity of LDPE/BNNS investigated by in-situ SAXS	Materials Letters, doi.org/10.1016/j.matlet.2018.09.061	Jialong Li, Jinghua Yin
281	Microwave-Assisted Rapid Synthesis of Graphene-Supported Single Atomic Metals	Advanced Materials,2018, 30, 1802146	Huilong Fei,Xiangfeng Duan

282	MIL-125-NH2@TiO2 Core–Shell Particles Produced by a Post-Solvothermal Route for High-Performance Photocatalytic H2 Production	ACS Appl. Mater. Interfaces, 2018, 10 (19), pp 16418–16423	Bingxing Zhang, 张建玲 & 韩布兴
283	Mo-Al co-doped VO2(B) thin films: CVD synthesis, thermal sensitive properties, synchrotron radiation photoelectron and absorption spectroscopy study	Journal of Alloys and Compounds,745, 247, (2018)	B Guo, 万冬云
284	Modification of Cu/SiO2 Catalysts by La2O3 to Quantitatively Tune Cu+ - Cu0 Dual Sites with Improved Catalytic Activities and Stabilities for Dimethyl Ether Steam Reforming	ChemCatChem, 2018, 10, 3862-3871	黄静静，李新刚
285	Modification of YNbO4 and YNbTiO6 photoluminescence by nitrogen doping	AIP ADVANCES, 8, 045107 (2018)	H. Pei, G.M. Cai
286	Molecular-Level Insight into Selective Catalytic Reduction of NOx with NH3 to N2 over a Highly Efficient Bifunctional Va-MnOx Catalyst at Low Temperature	ACS Catal.,2018, 8 (6), pp 4937–4949	Ying Xin,张昭良 & James A.Anderson
287	Monodisperse π–π Stacking Anthracene Dimer under Pressure: Unique Fluorescence Behaviors and Experimental Determination of Interplanar Distance at Excimer Equilibrium Geometry	Advanced Optical Materials, 2018,6,1800085	Haichao Liu,邹勃，杨兵
288	Morphological Control of Coil−Rod−Coil Molecules Containing m-Terphenyl Group: Construction of Helical Fibers and Helical Nanorings in Aqueous Solution	Langmuir,34, 10613−10621, 2018	杨云天,金龙一
289	Morphologies and photonic properties of an asymmetric brush block copolymer with polystyrene and polydimethylsiloxane side chains	Polymer,156, 169-178, 2018	王倩，沈志豪
290	Multi-contrast diffraction enhanced computed laminography at Beijing Synchrotron Radiation Facility	Analytical and Bioanalytical Chemistry, (2018) 410: 7221-7228	Jian Fu
291	Multiphase Structure and Electromechanical Behaviors of Aliphatic Polyurethane Elastomers	Macromolecules,51 (16), 6369–6379, 2018	项东，梁永日
292	Nanostructural hereditability in polyacrylonitrile based fibers studied bysmall angle X-ray scattering	Polymer,153:485-497, 2018	宫宇，吴忠华
293	N-doped defective carbon with trace Co for efficient rechargeable liquid electrolyte-/all-solid-state Zn-air batteries	Science Bulletin, Volume 63, Issue 9, 2018, Pages 548-555	Zhiyan Chen, Yongpeng Lei & Yaobing Wang

294	N-doped graphene combined with alloys (NiCo, CoFe) and their oxides as multifunctional electrocatalysts for oxygen and hydrogen electrode reactions	Carbon,Volume 139, 2018, Pages 35-44	Zexing Wu, Xien Liu
295	N-doped mesoporous carbon embedded Co nanoparticles for highly efficient and stable H2 generation from hydrolysis of ammonia borane	Journal of Power Sources,399,89-97, 2018	Fengwei Zhang, Xian-Ming Zhang
296	Near Zero Area Compressibility in a Perovskite-Like Metal–Organic Frameworks [C(NH2)3][Cd(HCOO)3]	ACS Appl. Mater. Interfaces,2018,10,23481-23484	Qingxin Zeng, 王凯
297	Neutron powder diffraction and high-pressure synchrotron x-ray diffraction study of tantalum nitrides	Chinese Physics B,2018,27,026201	冯雷豪, 雷力
298	New insight into the mechanism of enhanced crystallization of PLA in PLLA/PDLA mixture	JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE, 135(2), 45663, 2018	Lv, Tongxin ,Li, JQ, Jiang, SC
299	New Phase of Ca(BH4)2 at Near Ambient Conditions	J. Phys. Chem. C,2018,122,14272-14276	李鑫 崔田，黄晓丽
300	Nickel Vacancies Boost Reconstruction in Nickel Hydroxide Electrocatalyst	ACS Energy Lett.,2018, 3 (6), pp 1373–1380	Qun He, 吴小军 & 宋礼
301	Novel theranostic nanoplatform for complete mice tumor elimination via MR imaging-guided acid-enhanced photothermo-/chemo-therapy	Biomaterials,Volume 177, 2018, Pages 40-51	Bei Li, Zi Gu & Zhi Ping Xu
302	n-Type organic light-emitting transistors with high mobility and improved air stability	Journal of Materials Chemistry C,6(3): 535-540, 2018	Ma Lanchao
303	One-step synthesis of ultrathin α-Co(OH)2 nanomeshes and their high electrocatalytic activity toward the oxygen evolution reaction	Chem. Commun.,2018, 54, 4045-4048	Bingxing Zhang,张建玲
304	Optical Properties of Ce-Doped Li4SrCa(SiO4)2: A Combined Experimental and Theoretical Study	Inorg. Chem,2018, 57, 1116−1124	Rui Shi, Hongbin Liang
305	Ordered Porous Nitrogen‐Doped Carbon Matrix with Atomically Dispersed Cobalt Sites as an Efficient Catalyst for Dehydrogenation and Transfer Hydrogenation of N‐Heterocycles	Angew. Chem. Int. Ed.,2018, 130, 11432-11436	Yunhu Han,王定胜 & 李亚栋
306	Organophosphoric acid-derived CoP quantum dots@S,N-codoped graphite carbon as a trifunctional electrocatalyst for overall water splitting and Zn–air batteries	Nanoscale,2018, 10, 14613-14626	Tao Meng,郑黎荣 & 曹明华

307	Origin of negative thermal expansion in Zn2GeO4revealed by high pressure study	Journal of Physics D: Applied Physics,2018,51,095303	Xuerui Cheng, Zeming Qi
308	Partial Nitridation - Induced Electrochemistry Enhancement of Ternary Oxide Nanosheets for Fiber Energy Storage Device	Adv. Energy Mater.,2018, 8, 1800685	Hua Tan,刘宏 & Hong Jin Fan
309	Pb sorption on montmorillonite-bacteria composites: A combination study by XAFS, ITC and SCM	Chemosphere,Volume 200, 2018, Pages 427-436	Chenchen Qu, 陈文莉 & 黄巧云
310	PDA-assisted formation of ordered intermetallic CoPt3 catalysts with enhanced oxygen reduction activity and stability	Nanoscale,2018, 10, 9038-9043	Yige Zhao, Jingjun Liu & Feng Wang
311	Peroxymonosulfate activation by iron (III)-tetraamidomacrocyclic ligand for degradation of organic pollutants via high-valent iron-oxo complex	Water research,147, 233-241, 2018	Hongchao Li, 潘丙才
312	Persistent Formation of Self-Assembled Cylindrical Structure in a Liquid Crystalline Block Copolymer Constructed by Hydrogen Bonding	Macromolecules,51(15), 5676-5684, 2018	潘洪兵，沈志豪
313	Perspectives of XRF and XANES Applications in Cryospheric Sciences Using Chinese SR Facilities	Condensed Matter,3,4,29, 2018	徐伟
314	Phase transition and thermoelastic behavior of cadmium sulfide at high pressure and high temperature	Journal of Alloys and Compounds,2018,743,419-427	Bo Li,范大伟
315	Phosphorus speciation and release kinetics of swine manure biochar under various pyrolysis temperatures	ENVIRONMENTAL SCIENCE AND POLLUTION RESEARCH, (2018) 25:25780–25788	Xinqiang Liang, Xinqiang Liang
316	Phosphorus transformation response to soil properties changes induced by manure application in a calcareous soil	Geoderma,322 (2018) 163–171	Zhengjuan Yan, Qing Chen
317	Photochemical Formation and Transformation of Birnessite: Effects of Cations on Micromorphology and Crystal Structure	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (12), pp 6864–6871	张腾飞,邱国红
318	Photochemical Solid-Phase Synthesis of Platinum Single Atoms on Nitrogen-Doped Carbon with High Loading as Bifunctional Catalysts for Hydrogen Evolution and Oxygen Reduction Reactions	ACS Catal.,2018, 8 (9), pp 8450–8458	Tuanfeng Li, Jingjun Liu & Feng Wang
319	Photoluminescence, scintillation properties and trap states of La2Si2O7Ce single crystal	Mater. Res. Express,5 (2018) 086202, 2018	Huanhuan Wan, He Feng

320	Polycatenar bent-shaped liquid crystals with columnar and cubic phases:Synthesis multi-responsive organogels and chemosensors	J. Mol. Liq.,249,723-731, 2018	Huifang Cheng, Xiaohong Cheng
321	Pore growth and stabilization in uniaxial stretching polypropylene microporous membrane processed by heat - setting	Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics ,	RuijieXu ,Caihong Lei, RuijieXu
322	Pore structure characterization of coal by synchrotron radiation nano-CT	Fuel,215(2018)102-110	Yixin Zhao, Yixin Zhao
323	Porous carbon electrocatalyst with exclusive metal-coordinate active sites for acidic oxygen reduction reaction	Carbon,132, 85 (2018)	Qiao Zhang, 杨文
324	Porous carbon supported atomic iron as electrocatalysts for acidic oxygenreduction reaction	Science Bulletin, 63, 213 (2018)	P Yu, 杨文
325	Porous Ni@C derived from bimetallic Metal–Organic Frameworks and its application for improving LiBH4 dehydrogenation	Journal of Alloys and Compounds, Volume 735, 25 2018, Pages 1637-1647	XianHe Meng, 巨新
326	Porphyrin-like Fe-N4 sites with sulfur adjustment on hierarchical porous carbon for different rate-determining steps in oxygen reduction reaction	Nano Research, 2018, Volume 11, Issue 12, pp 6260–6269	Kongliu Wu,Zheng Chen & Chen Chen
327	Post - formation Copper - Nitrogen Species on Carbon Black: Their Chemical Structures and Active Sites for Oxygen Reduction Reaction	Chemistry-A European Journal,2018, 24, 9968-9975	Xin Xie, Jingjun Liu & Feng Wang
328	Preliminary Study on High-sensitive Diffraction Enhanced Imaging at BSRF	Microsc. Microanal.,24(suppl2),p100,2018	Qingxi Yuan ,Qingxi Yuan
329	Preparation of MgAl-EDTA-LDH based electrospun nanofiber membrane and its adsorption properties of copper (II) from wastewater	Journal of hazardous materials,345,43109, 2018	Hong Chen, Qidan Ling
330	Pressure and Photoinduced Phase Transitions of Elemental Sulfur Confined by Open-End Single-Wall Carbon Nanohorns	J. Phys. Chem. C,2018,122,6976-6983	Li Bo, 宋小龙, 苏磊
331	Pressure effects on superconductivity and structural parameters of ThFeAsN	Europhysics Letters,2018,123,67004	Honghong Wang,孙力玲
332	Pressure induced solid-solid reconstructive phase transition in LiGaO2 dominated by elastic strain	PHYS REV B ,2018,97,014106	胡启威, 雷力

333	Pressure-induced emission of cesium lead halide perovskite nanocrystals	Nature communication,2018,9,4506	Zhiwei Ma,肖冠军,张立军,邹勃
334	Pressure-induced melting of magnetic order and emergence of a new quantum state in α-RuCl3	PHYS REV B, 2018, 97, 245149	Zhe Wang, 孙力玲
335	Pressure-induced ordering phase transition in high-entropy alloy	Intermetallics,2018,103,63-66	Ma Yimo, 李工
336	Pressure-induced structural and semiconductor-semiconductor transitions in Co0.5Mg0.5Cr2O4	PHYS REV B ,2018,97,174102	S. Rahman,Junling Lu, 王霖
337	Pressure-induced structural evolution of apatite-type La9.33Si6O26	Chinese Physics B, 2018,27,018202	尹广超,高伟
338	Pressure-induced structural phase transition and electrical properties of Cu2S	Journal of Alloys and Compounds,2018,766,813-817	Xue Yang,陈晓嘉
339	Probing Ligand-Induced Cooperative Orbital Redistribution That Dominates Nanoscale Molecule–Surface Interactions with One-Unit-Thin TiO2 Nanosheets	Nano Lett., 10.1021/acs.nanolett.8b03572	相国磊
340	Propagation topography of redox phase transformations in heterogeneous layered oxide cathode materials	Nature Communications, (2018) 9:2810	Linqin Mu,Yijin Liu，Feng Lin
341	Proton and Copper Binding to Humic Acids Analyzed by XAFS Spectroscopy and Isothermal Titration Calorimetry	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (7), pp 4099–4107	Jinling Xu, 方临川 & 谭文峰
342	Quantifying nano-pore heterogeneity and anisotropy in gas shale by synchrotron radiation nano-CT	Microporous and Mesoporous Materials,258 (2018) 8-16	Yingfeng Sun, Yixin Zhao
343	Quasi free K cations confined in hollandite-type tunnels for catalytic solid (catalyst)-solid (reactant) oxidation reactions	Applied Catalysis B: Environmental, Volume 232, 15, 2018, Pages 108-116	Taizheng Liu, 张昭良 & Pu-Xian Gao
344	Radial X-ray diffraction study of the static strength and texture of tungsten to 96 GPa	Solid State Communication, 2018,269,83-89	熊伦
345	Rational design of mimic multienzyme systems in hierarchically porous biomimetic metal−organic frameworks	ACS Applied Materials & Interfaces (Supplementary Cover), 2018, 10(39): 33407-33415	Xiao Liu, Wei Qi, Yuefei Wang
346	Reassessing the origin and chronology of the unique achondrite Asuka 881394: Implications for distribution of 26Al in the early Solar System	Geochimica et Cosmochimica Acta,244: 478-501, 2018	Wimpenny Josh,

347	Reciprocating Compression of ZnO Probed by X-ray Diffraction: The Size Effect on Structural Properties under High Pressure	Inorg. Chem., 2018, 57, 5390-5388	王齐明,祝文军
348	Reduction of Ce(IV) to Ce(III) induced by structural characteristics and performance characterization of pyrophosphate MgIn2P4O14-based phosphors	Journal of Luminescence, 203 (2018) 590–598	J. Zhang, G.M. Cai
349	Reductive Transformation of Layered‐Double‐Hydroxide Nanosheets to Fe‐Based Heterostructures for Efficient Visible‐Light Photocatalytic Hydrogenation of CO	Advanced Materials,2018, 30, 1803127	Yufei Zhao, 温晓东 马丁, 张铁锐
350	Refining Defect States in W18O49 by Mo Doping: A Strategy for Tuning N2 Activation towards Solar-Driven Nitrogen Fixation	J. Am. Chem. Soc.,2018, 140 (30), pp 9434–9443	Ning Zhang, 吴小军 & 熊宇杰
351	Regioisomeric Tandem Triblock Shape Amphiphiles Based on Polyhedral Oligomeric Silsesquioxanes	Chem. Eur.J. ,24,12389–12396	Yu Shao, Wen-Bin Zhang
352	Regulating the polymer crystallize behavior via the synergistic additives towards high-performance bulk heterojunction solar cells	Organic Electronics,58: 178-184, 2018	Zhao, Jiao,
353	Relationship between Birefringence and Surface Morphology in Single-Crystal Diamonds Grown by MPCVD	Cryst. Res. Technol.,2018, 1800055	Yun Zhao,Chengming Li
354	Relationship between Iron Carbide Phases (ε-Fe2C, Fe7C3, and χ-Fe5C2) and Catalytic Performances of Fe/SiO2 Fischer–Tropsch Catalysts	ACS Catal.,2018, 8 (4), pp 3304–3316	常强, 张成华 & 杨勇
355	Research of Trap and Electron Density Distributions in the Interface of Polyimide/Al2O3 Nanocomposite Films Based on IDC and SAXS	CHIN. PHYS. LETT.,Vol. 34, No. 4 (2017) 048201	Yuan-yuan Liu, Jinghua Yin
356	Reversible Tuning of the Ferromagnetic Behavior in Mn-Doped MoS2 Nanosheets via Interface Charge Transfer	ACS Appl. Mater. Interfaces,2018, 10 (37), pp 31648–31654	Hao Tan, 孙治湖 & 闫文胜
357	Revisit the effect of manganese oxidation state on activity in low-temperature NO-SCR	Molecular Catalysis,Volume 446, 2018, Pages 49-57	Jun Huang, Licheng Liu & Hongtao Jiang
358	Role of Al3+ on tuning optical properties of Ce3+‐activated borosilicate scintillating glasses prepared in air	Journal of the American Ceramic Society, 101, 10, 4480-4485, 2018	Xin‐Yuan Sun, Xin‐Yuan Sun
359	Role of chelant on Cu distribution and speciation in Lolium multiflorum by synchrotron techniques	Science of the Total Environment, 621, 772–781, 2018	Yan-ping Zhao, Xiang-dong Li

360	Role of lanthanum in thermoluminescence properties of La2xLu2(12x)SiO5:Ce crystals	J Mater Sci,(2018) 53:6450–6458	Tiantian Wang, Dongzhou Ding
361	Role of the X and n factors in ion-irradiation induced phase transformations of M n+ 1 AX n phases	Acta Materialia,144: 432-446, 2018	Wang, Chenxu,
362	Room Temperature Synthesis of Covalent Organic Framework (COF‐LZU1) Nanobars in CO2/Water Solvent	ChemSusChem,2018, 11, 1-6	Fanyu Zhang, 张建玲
363	Ru–Zn/ZrO2 Nanocomposite Catalysts Fabricated by Galvanic Replacement for Benzene Partial Hydrogenation	ChemCatChem,2018, 10, 1184-1191	Gongbing Zhou, 乔明华 & Baoning Zong
364	Salt-mediated synthesis of bimetallic networks with structural defects and their enhanced catalytic performances	Chemical Communications,54（85）12065-12068	Zhang Pei, Han Buxing
365	Selective catalytic reduction of NOx with NH3 over short-range ordered WOFe structures with high thermal stability	Applied Catalysis B: Environmental, Volume 229, 5 2018, Pages 81-87	Ying Xin,张昭良 & James A.Anderson
366	Selective Passivation of Pt Nanoparticles with Enhanced Sintering Resistance and Activity toward CO Oxidation via Atomic Layer Deposition	ACS Appl. Nano Mater.,2018, 1 (2), pp 522–530	蔡佳明,陈蓉
367	Selective Surface Enhanced Raman Scattering for Quantitative Detection of Lung Cancer Biomarkers in Superparticle@MOF Structure	Advanced Materials,2018, 30, 1702275	Qiao xuezhi（乔学志）,Wang tie（王铁）
368	Self-assembled Ag-MXA Superclusters with Structure-dependent Mechanical Properties	Advanced Materials,2018, 30, 1706237	Qin xiaoyun ,Wang tie
369	Self-assembled microporous peptide-polysaccharide aerogels for oil-water separation	Langmuir,2018,34 (36),10732-10738	Xin Yang, Yanyan Xie,Yuefei Wang, Wei Qi
370	Self-assembly, conductivity and chemosensor behavior of biphenylsulfone based Janus polycatenar	J. Mol. Liq.,264,691-698, 2018	Huifang Cheng, Xiaohong Cheng
371	Silica‐Protected Ultrathin Ni3FeN Nanocatalyst for the Efficient Hydrolytic Dehydrogenation of NH3BH3	Adv. Energy Mater.,2018, 8, 1702780	Xin Zhang, 张铁锐
372	Simultaneous multi-wavelength ultraviolet excited single-phase white light emitting phosphor Ba1-x(Zr,Ti)Si3O9:xEu	Optical Materials,79 (2018) 53-62	Zhenzhen Zhou, Zhenzhen Zhou

373	Simultaneously Enhancing Stability and Activity of Maghemite via Site-Specific Ti(IV) Doping for NO Emission Control	ChemCatChem, 2018, 10, 4683–4688	Junxiao Chen, Xingfu Tang
374	Simultaneously improved efficiency and average visible transmittance of semitransparent polymer solar cells with two ultra-narrow bandgap nonfullerene acceptors	J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 21485–21492	马晓玲,张福俊
375	Single Cobalt Atoms Anchored on Porous N-Doped Graphene with Dual Reaction Sites for Efficient Fenton-like Catalysis	J. Am. Chem. Soc.,2018, 140 (39), pp 12469–12475	Xuning Li, Yanqiang Huang & Bin Liu
376	Single Pt Atom with Highly Vacant d-Orbital for Accelerating Photocatalytic H2 Evolution	ACS Appl. Energy Mater., DOI: 10.1021/acsaem.8b01143	曹元杰，姚涛
377	Single Pt Atoms Confined into a Metal–Organic Framework for Efficient Photocatalysis	Advanced Materials,2018, 30, 1705112	Xinzuo Fang, 江海龙
378	Single-crystal growth of the iron-based superconductor La0.34Na0.66Fe2As2	Superconductor Science and Technology,31, 125008 (2018)	Y Gu，李世亮
379	SiO2-protected shell mediated templating synthesis of Fe–N-doped carbon nanofibers and their enhanced oxygen reduction reaction performance	Energy & Environmental Science, 2018, 11, 2208-2215	胡必成,梁海伟 & 俞书宏
380	Site Occupancy and VUV−UV−Vis Photoluminescence of the Lanthanide Ions in BaY2Si3O10	J. Phys. Chem. C,2018, 122, 7421−7431	Rui Shi, Hongbin Liang
381	Site Occupation of Eu2+ in Ba2−xSrxSiO4 (x = 0−1.9) and Origin of Improved Luminescence Thermal Stability in the Intermediate Composition	Inorg. Chem,2018, 57, 7090−7096	Litian Lin, Hongbin Liang
382	Soft X-ray cryogenic radiometer	Nuclear Techniques,41 (4), 040101, 2018	Zhao xiaoliang, Zhao Yidong
383	Solvent Tunes the Selectivity of Hydrogenation Reaction over α-MoC Catalyst	J. Am. Chem. Soc.,2018, 140 (43), pp 14481–14489	Yuchen Deng, 王帅 & 马丁
384	Sonocrystallization of poly (3-hexylthiophene) in a marginal solvent	Soft matter,14(18): 3590-3600, 2018	Zhang Xuan
385	Sorption of Pb(II) by Nanosized Ferrihydrite Organo-Mineral Composites Formed by Adsorption versus Coprecipitation	ACS Earth Space Chem.,2018, 2 (6), pp 556–564	杜慧慧,黄巧云 & 铁柏清
386	Stability of flow-induced precursors in poly-1-butene and copolymer of 1-butene and ethylene	Journal of Rheology,62(3),725-737, 2018	Liu Chang, Chen Quan

387	Stable Carbon–Selenium Bonds for Enhanced Performance in Tremella-Like 2D Chalcogenide Battery Anode,	Adv. Energy Mater.,2018, 8, 1800927	Yu Li, Chuan Wu
388	Static strength of molybdenum to 92 GPa under radial X-ray diffraction	International Journal of Modern Physics B, 2018, 32, 1850177	熊伦
389	Strain-Enhanced Charge Transfer and Magnetism at a Manganite/Nickelate Interface	ACS Appl. Mater. Interfaces,10, 30803 (2018)	Zedong Xu, Zedong Xu
390	Strain-induced high-temperature perovskite ferromagnetic insulator	Proceedings of the National Academy of Sciences,115(12): 2873-2877, 2018	Meng, Dechao,
391	Strengthening effects of interstitial nitrogen on rhenium	JOURNAL OF APPLIED PHYSICS,2018,123,055901	Lei Qi, 雷力
392	Stretching-Induced Uniform Micropores Formation: An in Situ SAXS/WAXS Study	Macromolecules,51 (9), 3433–3442, 2018	Caihong Lei , Caihong Lei, Ruijie Xu
393	Structural and optical properties of semi-polar (11-22) InGaN/GaN green light-emitting diode structure	APPLIED PHYSICS LETTERS,112(5), 052105, 2018	Guijuan Zhao, Lianshan Wang
394	Structural phase transition, strength, and texture in vanadium at high pressure under nonhydrostatic compression	Chinese Physics B, 2018,27,036101	熊伦
395	Structural requirements of manganese oxides for methane oxidation: XAS spectroscopy and transition-state studies	Applied Catalysis B: Environmental, Volume 229, 5 2018, Pages 52-62	Xiuyun Wang, Lilong Jiang
396	Structural Signature of β-Relaxation in La-Based Metallic Glasses	J. Phys. Chem. Lett.,2018, 9 (15), pp 4308–4313	王晓东，蒋建中
397	Structure based function-annotation of hypothetical protein MGG_01005 from Magnaporthe oryzae reveals it is the dynein light chain orthologue of dynlt1/3	Scientific reports, 8, 1, 3952, 2018	G. Li, Junfeng Liu
398	Structure, bandgap, photoluminescence evolution and thermal stability improved of Sr replacement apatite phosphors Ca10-xSrx(PO4)6F2:Eu2+ (x =4, 6, 8)	Dyes and Pigments,152 (2018) 75–84	Xufeng Zhou, Yuhua Wang
399	Structure–function analyses reveal the molecular architecture and neutralization mechanism of a bacterial HEPN–MNT toxin–antitoxin system	J. Biol. Chem.,2018 293: 6812-6823	Xuanyan Jia,Heng Zhang

400	Structures of glycolate oxidase from Nicotiana benthamiana reveal a conserved pH sensor affecting the binding of FMN	Biochemical and biophysical research communications, 503,4,3050-3056, 2018	Y. Liu,陈忠周
401	Studies on Im-3-type KSbO3 using high pressure X-ray diffraction and Raman spectroscopy	High Pressure Research, 2018,38,232-242	Huifang Zhao, 谭大勇
402	Studies on the structural stability of Co2P2O7 under pressure	Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2018, 116, 113-117	W.P. Wang, 禹日成
403	Study of Structure and Magnetic Properties of SmCo10 Alloy Prepared by Different Methods	ADVANCES IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING, Volume 2018, Article ID 6457534, 10 pages, 2018	Chi Xiang, Sun Jibing
404	Study on catalytic mechanism of silver ions in bioleaching of chalcopyrite by SR-XRD and XANES	Hydrometallurgy,180 (2018) 26–35	Jin-lan Xia,Hong-chang Liu
405	Study on Structure and Property Relations of a-iPP During Uniaxial Deformation via In Situ Synchrotron SAXS/WAXS and POM Investigations	POLYMER ENGINEERING AND SCIENCE,58(2), 160-169, 2018	Shang, Yingrui,Shang, YR; Jiang, SC
406	Sub‐3 nm Ultrafine Monolayer Layered Double Hydroxide Nanosheets for Electrochemical Water Oxidation	Adv. Energy Mater.,2018, 8, 1703585	Yufei Zhao, 张铁锐
407	Subcellular Distribution and Chemical Forms of Pb in Corn: Strategies Underlying Tolerance in Pb Stress	J. Agr. Food Chem.,2018, 66 (26), pp 6675–6682	Jianling Sun,罗立强
408	Superconductivity in pressurized CeRhGe3 and related noncentrosymmetric compounds	PHYS REV B, 2018, 97, 064514	Honghong Wang, Jing Guo, J.D. Thompson, 孙力玲
409	Superficial Layer-enhanced Raman Scattering (SLERS) for Depth Detection of Non-Contact Molecules	Advanced Materials,2018.1804275	Qiao xuezhi,Wang tie
410	Surface Modulation of Hierarchical MoS2 Nanosheets by Ni Single Atoms for Enhanced Electrocatalytic Hydrogen Evolution	Adv. Funct. Mater.,2018, 1807086	张华斌，楼熊文
411	Surface step decoration of isolated atom as electron pumping: Atomic-level insights into visible-light hydrogen evolution	Nano Energy, Volume 45, 2018, Pages 109-117	Xin Wu, 张华斌 & 张建

412	Surface-adsorbed ions on TiO2 nanosheets for selective photocatalytic CO2 reduction	Nano Research,2018, 11(6), 3362-3370	Xiaogang Li,储旺盛 & 吴长征
413	Symbiosis mechanism of iron and manganese oxides in oxic aqueous systems	Chemical Geology,Volume 488, 5 June 2018, Pages 162-170	Yao Luo,邱国红
414	Synchrotron Radiation Based Study of the Catalytic Mechanism of Ag + to Chalcopyrite Bioleaching by Mesophilic and Thermophilic Cultures	Minerals,2018, 8, 382	Zhenyuan Nie, Zhenyuan Nie
415	Synchrotron Radiation Nanoscale X-ray Imaging Technology And Scientific Big Data Mining Assist Energy Materials Research	Microsc. Microanal.,24(suppl 2), p542, 2018	Kai zhang,Kai zhang
416	Synergistic effect of an atomically dual-metal doped catalyst for highly efficient oxygen evolution	J. Mater. Chem. A,2018, 6, 6840-6846	Daobin Liu,陈双明 & 宋礼
417	Syntheses and Properties of meso-Substituted PorphyrinMesogens with Triazole Linkages and Peripheral Alkyl Chains	Chem. Asian J. ,13, 536-544, 2018	Ruilin Zhang, Xiaohong Cheng
418	Synthesis and photoluminescence of host-sensitized MgNb2O6 based phosphors	Journal of Luminescence,198 (2018) 10–18	J.Y. Si,J.Y. Si
419	Synthesis of Biomass-derived Carbon Induced by Cellular Respiration in Yeast for Supercapacitor Applications	Chemistry - A European Journal, 10.1002/chem.201803836	Yi - Meng Lian,杨文
420	Synthesis of ultrathin Ni nanosheets for semihydrogenation of phenylacetylene to styrene under mild conditions	Nanoscale,2018, 10, 6936-6944	Jing-Wen Yu, 张亚文
421	Synthesis, self-assembly, metal binding properties of triazole azobenzene based polycatenar dyes through click chemistry	Dyes Pigm.,149,512-520, 2018	Huiru Chen, Xiaohong Cheng
422	Systematic design of superaerophobic nanotube-array electrode comprised of transition-metal sulfides for overall water splitting	Nature Communications, (2018) 9:2452	Haoyi Li, Xun Wang
423	Tailoring the Structure of Carbon Nanomaterials toward High‐End Energy Applications	Advanced Materials,2018, 1802104	Daobin Liu,朱彦武 & 宋礼
424	Temperature dependence of deformation behavior of poly(butylene terephthalate)	POLYMER,143, 309-315, 2018	Zhang, Wenyang,Li, HF; Jiang, SC ; Li, JQ

425	Ternary nonfullerene polymer solar cells with efficiency ＞13.7% by integrating the advantages of the materials and two binary cells	Energy Environ. Sci.,2018, 11, 2134--2141	马晓玲,张福俊
426	The adsorption behavior of thioarsenite on magnetite and ferrous sulfide	Chemical Geology,492 (2018) 1–11	Ying Wang, Shaofeng Wang
427	The chemical speciation, spatial distribution and toxicity of mercury from Tibetan medicine Zuotai，β-HgS and HgCl2 in mouse kidney	Journal of Trace Elements in Medicine and Biology,Volume 45, 2018, Pages 104-113	李岑，魏立新
428	The complexity of thermoelectric materials: why we need powerful and brilliant synchrotron radiation sources?	Materials Today Physics,6, 68-82, 2018	徐伟
429	The dependence of β-to-α phase transition behavior of Poly(1,4-butylene adipate) on phase separated morphology in its blends with Poly(vinylidene fluoride)	Phys. Chem. Chem. Phys,20, 15718, 2018	侯春曰，李慧慧,孙晓丽
430	The distinct effects of isomorphous substitution of various divalence trace metals on hematite structure	Materials Chemistry and Physics, Volume 217, 2018, Pages 40-47	Wei Li,刘凡
431	The Evidence of Decisive Effect of Both Surface Microstructure and Speciation of Chalcopyrite on Attachment Behaviors of Extreme Thermoacidophile Sulfolobus metallicus	Minerals,2018, 8, 159	Weibo Ling,Weibo Ling
432	The formation of (NiFe)S2 pyrite mesocrystals as efficient pre-catalysts for water oxidation	Chem. Sci. ,9, 2762 (2018)	Bing Ni,王训
433	The influence of pH on diffusion of 75 Se (IV) in Beishan granite	Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, https://doi.org/10.1007/s10967-018-6344-9	C. Wang,刘春丽
434	The interaction between particulate organic matter and Copper, Zinc in paddy soil	Environmental Pollution, Volume 243, Part B, 2018, Pages 1394-1402	施积炎
435	The interaction of paeonol with DPPC liposomes Differential scanning calorimetry and synchrotron X-ray diffraction studies	Journal of Thermal Analysis and Calorimetry,132:685–692	Wei Tian-tian,Wu Rui-guang
436	The lubrication effectiveness of dialkylpentasulfide in synthetic ester and its emulsion	Tribology International,122 (2018) 76–83	Ganlin Zheng,Tianhui Ren
437	The precipitation, growth and stability of mercury sulfide nanoparticles formed in the presence of marine dissolved organic matter	Environmental Science-Processes & Impacts,2018, 20, 642–656	Nashaat M. Mazrui,Nashaat M. Mazrui

438	The preferential retention of VIZn over IVZn on birnessite during dissolution/desorption	Applied Clay Science,Volume 161, 2018, Pages 169-175	Zhangjie Qin, 刘凡
439	The Residual Stress and Al Incorporation of AlGaN Epilayers by Metalorganic Chemical Vapor Deposition	Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 18(11), 7484-7488, 2018	Fangzheng Li, Lianshan Wang
440	The self-assembly and formation mechanism of a novel cellulose gel with chiral nematic structure	Cellulose, 25 卷 10 期, 5499-5510, 2018	Huafeng Peng, Anqi Ju
441	The smart surface modification of Fe2O3 by WOx for significantly promoting the selective catalytic reduction of NOx with NH3	Applied Catalysis B: Environmental, Volume 230, 15 2018, Pages 165-176	Fudong Liu, 贺泓
442	The synthesis and synergistic catalysis of iron phthalocyanine and its graphene-based axial complex for enhanced oxygen reduction	Nano Energy, Volume 46, 2018, Pages 347-355	Jia Guo,Longtian Kang & Zhanmin Cao
443	Theory-driven design of high-valence metal sites for water oxidation confirmed using in situ soft X-ray absorption	Nature Chemistry ,10, 149 (2018)	Xueli Zheng,Edward H. Sargent
444	Thermal behaviour of calcite-structure carbonates: a powder X-ray diffraction study between 83 and 618K	European Journal of Mineralogy, 30, 5, 2018, 939-949	Wang Meili, Shi Guanghai
445	Thermal Unfolding Process of Lysozyme on PEGylated Gold Nanoparticles Reveals Length-Dependent Effects of PEG Layer	Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Volume 18, Number 8, 2018, pp. 5542-5550(9)	Cai Chengxu, Chunying Chen
446	Thermodynamic Activation of Charge Transfer in Anionic Redox Process for Li‐Ion Batteries	Adv. Funct. Mater.,2018, 28, 1704864	Biao Li,夏定国
447	Thermodynamics of Hg(II) Bonding to Thiol Groups in Suwannee River Natural Organic Matter Resolved by Competitive Ligand Exchange, Hg LIII-Edge EXAFS and 1H NMR Spectroscopy	ENVIRONMENTAL SCIENCE & TECHNOLOGY, 2018, 52, 8292−8301	Yu Song,Ulf Skyllberg
448	Thermoelectric properties of metal-(Z)-1,2-dihydroselenoethene-1,2-dithiol coordination polymers	Science Bulletin, 卷：63, 页：814-816, 2018	Yutao Cui,Wei Xu ; Daoben Zhu
449	Thickness dependent structural evolution in Mg-Zn-Ca thin film metallic glasses	Journal of Alloys and Compounds,Volume 742, 2018, Pages 524-535	Jian Liu, 王晓东 & 蒋建中
450	Three-dimensional hollow spheres of the tetragonal-spinel MgMn2O4 cathode for high-performance magnesium ion batteries	J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 8210-8214	陶石， 宋礼

451	Tin(IV) Sulfide Greatly Improves the Catalytic Performance of UiO‐66 for Carbon Dioxide Cycloaddition	ChemCatChem, 2018, 10, 2945-2948	Xiuyan Cheng, 张建玲
452	TiO2-ZrO2 聚合溶胶形成过程的小角 X 射线散射研究	化工学报，2018, 69(4): 1731-1740	杜倩倩，谷景华
453	Towards understanding the correlation between UO22+ extraction and substitute groups in 2,9-diamide-1,10-phenanthroline	Science China-Chemistry, 2018, 61, 10, pp 1285–1292	Xinrui Zhang, 袁立永 & 石伟群
454	Transformation of Perovskite BaBiO3 into Layered BaBiO2. 5 Crystals Featuring Unusual Chemical Bonding and Luminescence	Chemistry–A European Journal, Volume24, Issue35, 2018, 8875-8882	H. Li, Hongtao Sun
455	Tunable single-mode lasing in a single semiconductor microrod	Optics Express, 26(23): 30021-30029, 2018	Yang Yue
456	Tuning Bifunctional Oxygen Electrocatalysts by Changing the A‐Site Rare‐Earth Element in Perovskite Nickelates	Adv. Funct. Mater.,28, 1803712 (2018)	Le Wang, Junlin Wang
457	Tuning Structures of Mesogen-Jacketed Liquid Crystalline Polymers and Their Rod–Coil Diblock Copolymers by Varying Chain Rigidity	Macromolecular Chemistry and Physics, 219, 1700593. 2018	潘洪兵，沈志豪
458	Ultra-high surface area graphitic Fe-NC nanospheres with single-atom iron sites as highly efficient non-precious metal bifunctional catalysts towards oxygen redox reactions	Journal of Catalysis, 368, 279-290, 2018	Dandan Lyu,Pei Kang Shen
459	Ultra-low temperature curable nano-silver conductive adhesive for piezoelectric composite material	PHYSICA B-CONDENSED MATTER,卷: 529 页: 9-15, 2018	Yan Chao,Liao Qingwei
460	Ultrathin and Vacancy-Rich CoAl-Layered Double Hydroxide/Graphite Oxide Catalysts: Promotional Effect of Cobalt Vacancies and Oxygen Vacancies in Alcohol Oxidation	ACS Catal.,2018, 8 (4), pp 3104–3115	Qian Wang, 冯俊婷 & 李殿卿
461	Undercoordinated Site-Abundant and Tensile-Strained Nickel for Low-Temperature COx Methanation	ACS Catal.,2018, 8 (2), pp 1207–1211	王浩，乔明华 & 宗保宁
462	Unexpected Semimetallic BiS2 at High Pressure and High Temperature	J. Phys. Chem. Lett., 2018, 9, 5785-5791	Guangtao Liu, 王霖，马琰铭
463	Uniaxial strain tuning of the Verwey transition in flexible Fe 3 O 4 /muscovite epitaxial heterostructures	APPLIED PHYSICS LETTERS, 113, 142403 (2018)	W. C. Zheng, baihaili

464	Uniaxial stretching induced pore nucleation and growth in row-nucleated crystalline hard-elastic polypropylene film: The effect of activation volume and stretching work	Polymer,158(5),10-17, 2018	Jiayi Xie,Caihong Lei, Ruijie Xu
465	Uniform, high crystalline,(100) crystal orientated perovskite films without PbI2 residue by controlling the nanostructure of PbI2	Organic Electronics,53: 26-34, 2018	Liang, Qiuju,
466	Unraveling Pr3þ 5d-4f emission in LiLa9(SiO4)6O2 crystals doped with Pr3þ ions	Optical Materials,79 (2018) 108-114	Konstantin V. Ivanovskikh
467	Unusual softening behavior of yield strength in niobium at high pressures	Chinese Physics B,2018,27,106201	敬秋民,敬秋民
468	Uranium speciation in coal bottom ash investigated via X-ray absorption fine structure and X-ray photoelectron spectra	Journal of Environmental Sciences, Volume 74, 2018, Pages 88-94	Yinglong Sun, Yi Wang
469	Uric acid-derived Fe3C-containing mesoporous Fe/N/C composite with high activity for oxygen reduction reaction in alkaline medium	Journal of Power Sources, Volume 378, 2018, Pages 491-498	Jun Ma,Xia Zuo
470	Vacuum Referred Binding Energy Scheme, Electron−Vibrational Interaction, and Energy Transfer Dynamics in BaMg2Si2O7:Ln (Ce3+,Eu2+) Phosphors	J. Phys. Chem. C,2018, 122, 2959−2967	Yiyi Ou,Hongbin Liang
471	Vacuum Ultraviolet Photodetection in Two-Dimensional Oxides	ACS Appl. Mater. Interfaces,2018, 10, 20696−20702	Wei Zheng,Feng Huang
472	Vacuum-Ultraviolet Photodetection in Few-Layered h-BN	ACS Appl. Mater. Interfaces,2018, 10, 27116−27123	Wei Zheng,Feng Huang
473	Valence Band Engineering via PtII Single-Atom Confinement Realizing Photocatalytic Water Splitting	J. Phys. Chem. C,2018, 122 (37), pp 21108–21114	Hui Su,刘庆华
474	Vertically co-oriented two dimensional metal-organic frameworks for packaging enhanced supercapacitive performance	Communications Chemistry, volume 1, Article number: 6 (2018)	Ting Deng,Wei Zhang & 郑伟涛
475	Vinylene spacer effects of benzothiadiazole–quarterthiophene based conjugated polymers on transistor mobilities	New Journal of Chemistry,42(18): 15372-15378, 2018	Sun, Wandong
476	VUV/Vis Photoluminescence, Site Occupancy, and Thermal‐Resistance Properties of K4SrSi3O9: Ce3+	Chemistry–A European Journal,24,6,1287-1294. 2018	J. He,Zhao, Qing Liu

477	Well-Balanced Ambipolar Conjugated Polymers Featuring Mild Glass Transition Temperatures towards High-Performance Flexible Field-Effect Transistors	Adv. Mater., 2018, 30, 1705286.	张卫锋,于贵
478	Well‐Defined Cobalt Catalyst with N‐Doped Carbon Layers Enwrapping: The Correlation between Surface Atomic Structure and Electrocatalytic Property	Small,2018, 14, 1702074	Youkui Zhang, 江海龙 & 宋礼
479	Zero Linear Compressibility in Nondense Borates with a “Lu‐Ban Stool”‐Like Structure	Advanced Materials,2018, 30, 1801313	姜兴兴,林哲帅
480	Zinc Isotope Fractionation during Sorption onto Al Oxides: Atomic Level Understanding from EXAFS	Environ. Sci. Technol.,2018, 52 (16), pp 9087–9096	Wenxian Gou,Wei Li & Weiqiang Li
481	α-MoO3-x by plasma etching with improved capacity and stabilized structure for lithium storage	Nano Energy, 49, 2018, 555-563	Guobin Zhang, Liqiang Mai
482	北京同步辐射装置 4W1A 光束线能谱测量	核电子学与探测技术,38(2),p151,2018	王继,王培玮
483	基于磁流变技术的微孔内壁抛光装置研制及性能研究	表面技术,47 (6),252-257, 2018	周悦,张天冲
484	基于小波变换的拼接重叠区域融合方法	强激光与粒子束,2018, 30(8).	刘丁枭,盛伟繁
485	激光复合焊接７０２０铝合金的疲劳性能及损伤行为	中国激光,45(3),0302003,2018	胡雅楠,吴圣川
486	利用 X 射线衍射增强成像技术诊断肝纤维化	北京大学学报(医学版),50(5), p899, 2018	王明,李辉
487	煤储层纳米孔隙结构机器瓦斯扩散特征	地球科学,43(5)：1755-1762, 2018	聂百胜,聂百胜
488	石榴子石族矿物状态方程研究进展	高压物理学报,2018,32,010101	范大伟,周文戈
489	同步辐射衍射增强成像技术检测人离体乳腺癌的实验研究	中国癌症杂志,28, p342, 2018	李瑞敏,彭卫军
490	微生物铁硫还原耦合水体中 As_V_吸附行为研究	水处理技术, 44 (8), 2018	周雨行,聂珍媛

491	一款小角 X 射线散射测量专用样品旋转装置	光散射学报,2018,30(01):51-55	Zhenzhong Li, Zhihong Li

2018 年度学术活动

高能同步辐射光源软 X 射线及中能谱学技术研讨会召开

2018 年 4 月 16 日，高能同步辐射光源（High Energy Photon Source, HEPS）软 X 射线及中能谱学技术研讨会在中国科学院高能物理研究所召开。来自北京大学、南京大学、人民大学、武汉大学、中国农业科学院、中国科学院生态环境研究中心、中国科学院物理研究所、加拿大光源等国内外单位的 29 名同步辐射专家与高水平用户代表参加了本次会议。

高能同步辐射光源验证装置项目副经理董宇辉研究员对与会专家表示感谢。他表示 HEPS 是国家发改委在“十三五”期间优先启动建设的十个重大科技基础设施项目之一，项目建议书已经获得国家发改委的批复，目前已正处于可行性研究阶段，高分辨纳米电子结构线站、吸收谱学线站是 HEPS 一期 14 条光束线站中关于软 X 射线及中能谱学应用方面的线站，为了更好地满足国内用户的需求并保证设计方案的先进性、合理性，组织召开本次研讨会，希望各位专家能够分别从束线建设和用户需求的角度提出宝贵的意见和建议。

会议期间，陶冶研究员介绍了 HEPS 项目的进展情况，王嘉鸥副研究员和郑雷副研究员分别介绍了高分辨纳米电子结构线站和吸收谱学线站的设计进展。邀请参会的束线专家介绍了软 X 射线 RIXS 及中能 X 射线目前在国际上的发展现状及相关的热点科学问题。随后，各位专家

结合自己的研究领域对上述两条光束线站提出了功能和指标上的需求以及可行的方案建议，并围绕 HEPS 的建设规划对未来软 X 射线及中能谱学技术在国内的发展进行了讨论。

本次会议为高分辨纳米电子结构线站和吸收谱学线站的设计方案提出了宝贵的意见和建议，对制定具有前瞻性和可行性的同步辐射线站发展规划、同时保证 HEPS 一期建设的线站能够对我国科学前沿研究有重大推动起到了重要作用。

快速非可逆过程超快 X 射线探测国际研讨会在高能所召开

2017 年 4 月 25-27 日，快速非可逆过程超快 X 射线研究国际研讨会（Workshop on Ultrafast X-ray Studies on Dynamic Irreversible Processes）在高能所召开。来自美国先进光子源（APS）、欧洲同步辐射装置（ESRF）、德国电子同步加速器（DESY）、俄罗斯新西伯利亚核物理研究所（VEPP）、美国普渡大学、英国曼彻斯特大学、日本立命馆大学、顶峰多尺度研究所、中国工程物理研究院流体物理研究所、清华大学、国防科技大学、大连理工大学、北京工业大学、中国科学院上海应用物理研究所等国内外 14 个单位的在相关领域的专家参加了本次会议。

结构动力学线站（Structural Dynamic Beamline, SDB）是高能同步辐射光源（HEPS）首批建设的 14 条光束线站之一，主要面向材料非平衡态下快速非可逆过程中的超快 X 射线结构探测，以材料动态压缩过程为主要应用方向，并开展先进材料设计及过程研究。高能 X 射线、高亮度、高相干性、高稳定性、高重复频率的 HEPS 光源，为不可逆过程探测提供极好 X 射

线光源，为国内相关研究领域发展带来难得机遇。本次会议主要是为了深化 SDB 线站设计，交流非可逆过程超快 X 射线应用进展。

高能所副所长、HEPS 项目经理秦庆研究员致开幕词。他表示 HEPS 的目标是要建成具有世界上最高光谱亮度的光源，为众多科学研究领域提供更灵敏、更精细、更快、更复杂和更接近实际工作环境的实验平台，提升同步辐射装置对我国科学研究的整体支撑能力，希望各位专家能够为 SDB 线站的建设方案提出更多宝贵的意见和建议。

4 月 26 日，会议安排了 11 个邀请报告。APS、ESRF、俄罗斯 VEPP 的专家介绍了超快成像、衍射和小角散射在非可逆过程探测进展，及光源升级后的改进方案。DESY 专家报告了利用纳米成像研究冲击波过程，普渡大学专家介绍了超快 X 射线在动态加载应用，曼彻斯特大学报告了利用超快 X 射线成像对激光增材制造过程机理的研究，立命馆大学专家介绍了 GHz 超快相机的发展趋势。顶峰多尺度研究所报告了超快 X 射线应用需求，及对 HEPS 相干性利用的模拟计算。清华大学专家报告了电子束增材制造方法发展及需要超快 X 射线探测解决的问题。4 月 27 日，会议主要就 SDB 线站设计进行了广泛深入的讨论。

这次会议为 SDB 线站设计深入提供了宝贵的意见和建议，这些意见和建议将在 SDB 初步设计报告工作中得到体现。

2018 年北京同步辐射装置用户学术年会暨专家会召开

2018 年北京同步辐射装置（BSRF）用户学术年会暨专家会于 8 月 14 日至 15 日在延吉市召开。来自全国相关研究院所、大专院校、企业等 80 个单位的 267 位专家和用户代表参加了会议。

高能所党委副书记、副所长罗小安致开幕词。他指出，过去的一年里，在广大用户的支持下，BSRF 开放运行取得了很好的科学成果，希望在今后的工作中装置和用户能够继续紧密合作，进一步提高 BSRF 的运行质量，推动高水平研究成果的产出。协办单位延边大学党委副书记陈铁致欢迎词。

会上，国内三个同步辐射装置分别报告了一年来各自开放运行工作，陈和生院士介绍了中国散裂中子源（CSNS）的进展情况。本次年会共有 11 个大会邀请报告、10 个重点课题申请报告、31 个分组报告以及 50 份展贴报告。这些报告涉及到能源、环境、材料、纳米、物理、化学、生物和线站技术等众多领域，展示了 BSRF 对于前沿基础科学和应用科学研究的重要支撑作用。通过专家评议投票，评选出 9 篇优秀展贴报告。

会议期间，举行了 BSRF 专业委员会和用户委员会会议，与会专家们对 10 个重点课题申请报告进行了评审，认真评议和讨论了 BSRF 的开放运行工作和 HEPS 的设计工作。专家们建

议：第一，处理好 BSRF 运行和新光源建设的关系，要考虑 BSRF 与 HEPS 的衔接及用户需求等因素；第二，加强运行管理和 HEPS 线站队伍的建设；第三，要加强与工业界的联系，加强重点领域用户的培养，使 HEPS 在支撑国家重大项目和提高工业创新能力等方面发挥重要作用。此外，用户委员会还组织全体用户代表对 BSRF 运行开放和 HEPS 建设等方面进行了专题讨论，广泛听取了用户的意见和建议。

高能同步辐射光源光束线站系列国际评审会在高能所召开

2018 年 8 月 27 日至 31 日，高能同步辐射光源（HEPS）光束线站系列国际评审会在高能所召开。来自加拿大光源、瑞士同步辐射光源、俄罗斯波罗的海联邦大学、瑞典 MAX IV 光源、日本 SPring-8 光源、美国加州大学圣巴巴拉分校、英国钻石光源、欧洲同步辐射装置、韩国浦项光源、日本大阪大学、顶峰多尺度研究所、台湾中央研究院、台湾同步辐射研究中心、中国科学院上海应用物理研究所、国家蛋白质科学中心（上海）、南方科技大学、上海科技大学、同济大学等国内外 18 个单位相关领域的专家受邀参加了本次会议。

HEPS 的目标是要建成具有世界上最高光谱亮度的光源，拥有国际先进的光束线站，为众多科学研究领域提供更灵敏、更精细、更快、更复杂和更接近实际工作环境的实验平台，提升同步辐射装置对我国科学研究的整体支撑能力。HEPS 首批拟建设 15 条光束线站，为了保障各光束线站能够更好地满足用户的需求并达到国际先进水平，本次系列评审会邀请国际上相关领域的专家对成像类线站、生物大分子线站与粉光小角散射线站、纳米相干类线站等三组光束线站的初步设计进行了评审，具体包括硬 X 射线成像线站、X 射线显微成像线站、生物大分子微晶衍射线站、粉光小角散射线站、硬 X 射线纳米探针线站、硬 X 射线相干散射线站、结

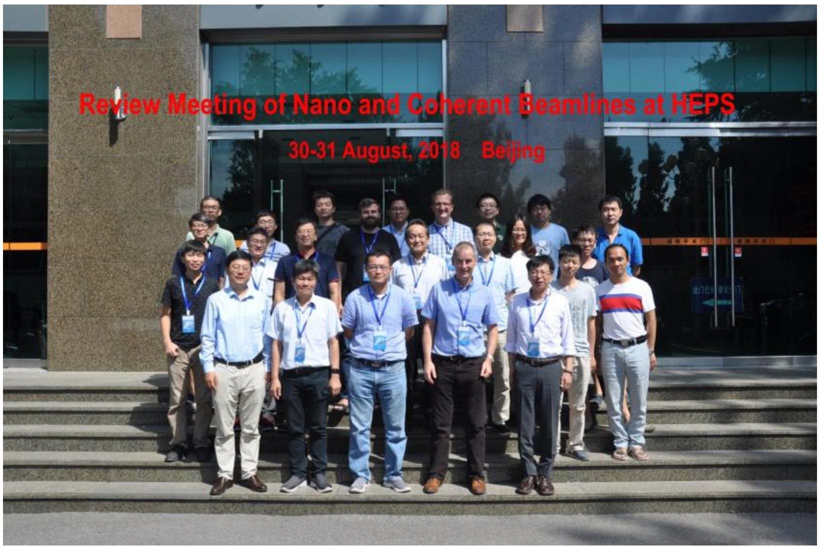
构动力学线站等 7 条光束线站。

各评审专家组分别提前审阅和现场听取了对应光束线站的设计报告，并在提问和讨论环节进行了充分交流，现场形成了初步评审意见，并将在一周内给出最终的评审意见报告。专家组对上述 7 条光束线站的初步设计工作给予了肯定，并在插入件、光学布局、实验站设计、线站控制、数据处理以及科学目标等各方面都提出了宝贵的意见和建议，为后续的线站设计深化提供了重要的指导。

项目组将组织相关人员集中讨论、答复专家组的评审意见，并将合理的建议落实在后续的设计中。

HEPS 成像类线站国际评审会合影

HEPS 生物大分子线站和粉光小角散射线站国际评审会合影



HEPS 纳米相干类线站国际评审会合影

第九届同步辐射生物医学应用会议在京召开

由中国科学院高能物理研究所主办的第九届同步辐射生物医学应用会议（The 9th bio-Medical Application of Synchrotron Radiation，bMASR）2018 年 10 月 23 日至 27 日在北京怀柔宽沟会议中心成功举办。来自中国、法国、意大利、澳大利亚、日本、韩国、德国、加拿大、瑞士、英国、瑞典、比利时等 12 个国家的 36 个研究单位（同步辐射光源、知名大学、研究所和医院）的 80 余位代表参加了本次会议。bMASR 会议 1992 年首次在日本举办，每三年召开一次，旨在推动全球同步辐射生物医学成像和放射治疗领域的进展交流与研究合作。

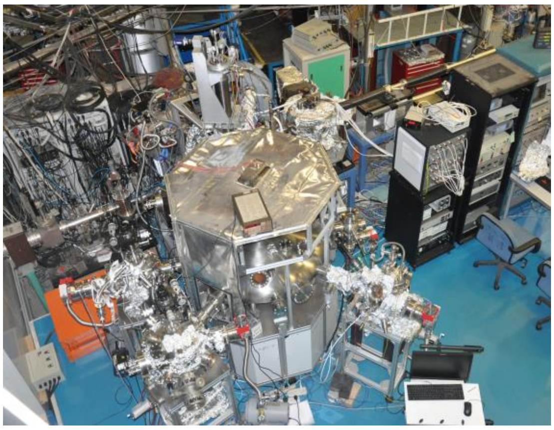
本次会议共安排了 4 个邀请报告、8 个装置报告、26 个口头报告以及 37 个展贴报告等。会议期间还举办了 IAC 和专辑编委会的联合工作会议。各国与会者充分而高效地交流了最近三年来世界各国在同步辐射生物医学成像和放射治疗领域的进展，主要包括应用研究、新方法、新设备等方面。不仅会上报告精彩讨论热烈，而且会下多种形式的交流也非常活跃。会议增进了世界各国本领域学者的相互了解，凝练了研究方向，加深了彼此友谊，为进一步深化合作研究奠定了基础。

与会者饶有兴致地参观了怀柔科学城规划展览馆和高能同步辐射光源(HEPS)的建设工地。各国科学家对怀柔科学城的宏伟规划和巨大发展潜力印象深刻，对高能同步辐射光源的建设充满期待。

本次会议的组委会主席是中科院高能所的国际访问学者安藤正海教授、中国科学院北京综合研究中心主任、中国科学院高能物理研究所研究员姜晓明教授和韩国基督教大学金中基教授。执行委员会主席是中国科学院高能物理研究所黎刚研究员。与会各国代表纷纷通过口头和

书面方式对高能所会务组的出色组织和精心安排表达了赞赏和感谢。

BSRF 各实验站光源参数



4B9B-光电子能谱实验站

【样品处的光源参数】

能量范围：15 - 1000 eV
能量分辨率（E/△E）： ~1500
光通量（photons/s）：> 1×10^{10}
光斑尺寸（H×V）：< $2\times0.8\ mm^2$

4B9A-衍射实验站

【样品处的光源参数】

能量范围：4 -15 keV

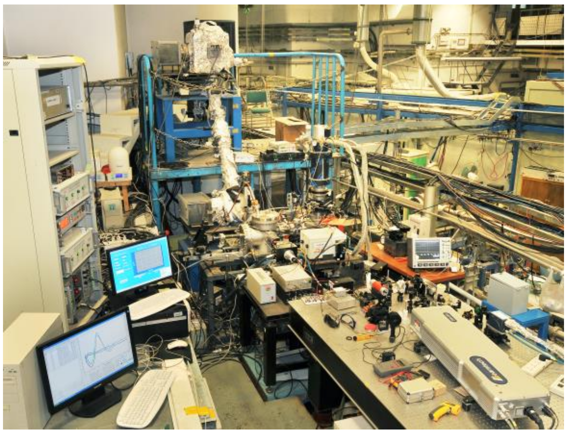
能量分辨率（△E/E）：3×10^{-4} @ 9 keV

光通量(photons/s)：1×10^{10} @ 8 keV

光斑尺寸（H×V）：$2\times1\ mm^2$

角分辨率：0.9 角秒

SAXS 可测粒度：5 - 100 nm



4B8-真空紫外实验站

【样品处的光源参数】

能量范围：125-360 nm
带宽：0.8 nm
光通量（photons/s）：2.0×10^{10}@180 nm
光斑尺寸（H×V）：$2\times1\ mm^2$

4B7B-软 X 射线实验站

【样品处的光源参数】

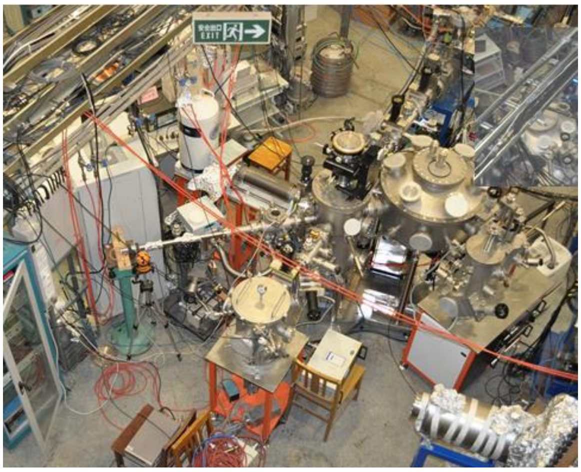
能量范围：50 eV-1700 eV

能量分辨率（E/△E）： ~1000

光通量（photons/s）：~1×10 @ Fe L edge

光斑尺寸（H×V）：导电样品：1×0.1mm^2

不导电样品：4×2 mm^2



4B7A-中能实验站

【样品处的光源参数】

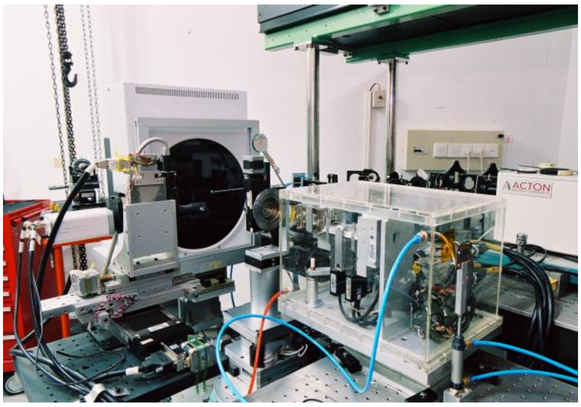
能量范围：Si(111)：2050 eV-5700 eV

InSb（111）：1750 eV-3400 eV

光通量（photons/s）：~10^{10} @ S K edge

能量分辨率（E/△E）：~7000 @ S K edge

光斑尺寸（H×V）： 3×1mm^2



4W2-高压实验站

【样品处的光源参数】

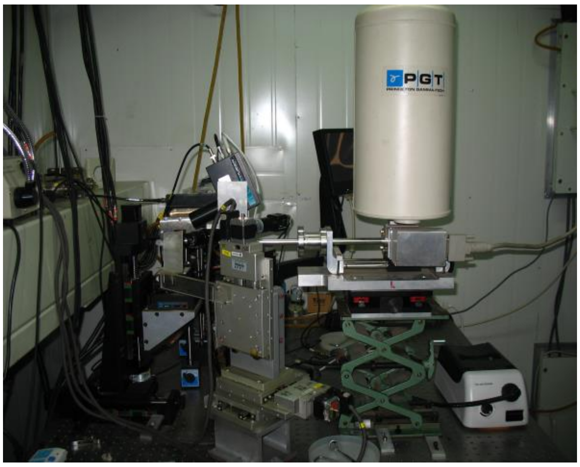
能量范围：10-25 keV（单色光）

5-35 keV（白光）

能量分辨率(△E/E)：7×10^{-4} @20 keV

光通量（photons/s）：1.2×10^9@20 keV

光斑尺寸（H×V）：26×8 μm^2



4W1B-X 射线荧光微分析实验站

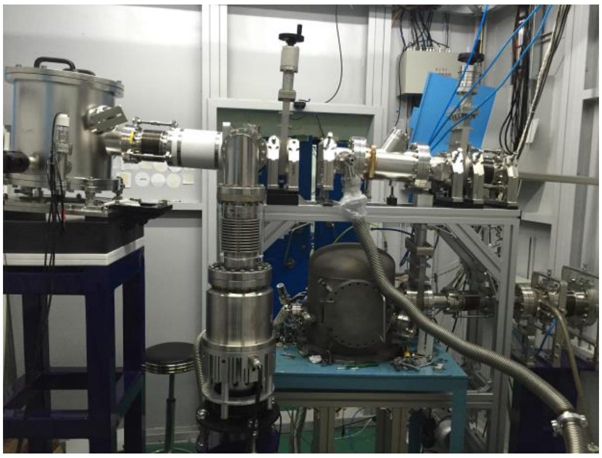
【样品处的光源参数】

实验模式	准单色光聚焦模式	单色光聚焦模式
能量范围	8 - 15 keV	5 - 18.5 keV
能量分辨率（ΔE/E）	$< 7\times 10^{-2}$	$< 5.5\mathrm{x}10^{-4}$
光通量（photons/s）	$>1\times 10^{8}$ @ 15keV	$>1\mathrm{x}10^{10}$ @ 15keV
光斑尺寸（H×V）	10 μm	30、50、100 μm
XRF 检测限	几十 ppm	1ppm

4W1A-X 射线成像实验站

【样品处的光源参数】

<table>
<tr><th>成像模式</th><th>能量范围</th><th>光通量(photons/s)</th><th>空间分辨率</th><th>光斑尺寸（H×V）</th></tr>
<tr><td>相位衬度成像</td><td>6~22 keV</td><td>$\sim10^{10}$ @ 8 keV</td><td>~10 μm</td><td>20×10 mm^2</td></tr>
<tr><td rowspan="3">纳米成像</td><td rowspan="3">5~12 keV</td><td rowspan="3">$\sim10^{8}$ @ 8 keV</td><td>30 nm</td><td>10×10 μm^2</td></tr>
<tr><td>50 nm</td><td>15×15 μm^2</td></tr>
<tr><td>100 nm</td><td>60×60 μm^2</td></tr>
</table>



1B3- LIGA、光刻实验站

【样品处的光源参数】

BM 引出的 1-2keV 波段的白光

3W1A-X 射线光学测试实验站

【样品处的光源参数】

能量范围：6 - 50 keV

光通量（photons/s/0.1）：6×10^{15}@10keV

光斑尺寸（H×V）：60×6 mm^2

1W2B-散射、衍射、谱学综合实验站

【样品处的光源参数】

能量范围：5 - 18 keV

能量分辨率（△E/E）：优于 4×10^{-4}

光通量（photons/s）：10^{12}

光斑尺寸（H×V）：1×0.6 mm^2

1W2A-小角散射实验站

【样品处的光源参数】

SAXS可测粒度：3 - 200 nm

角分辨率：0.5 mrad

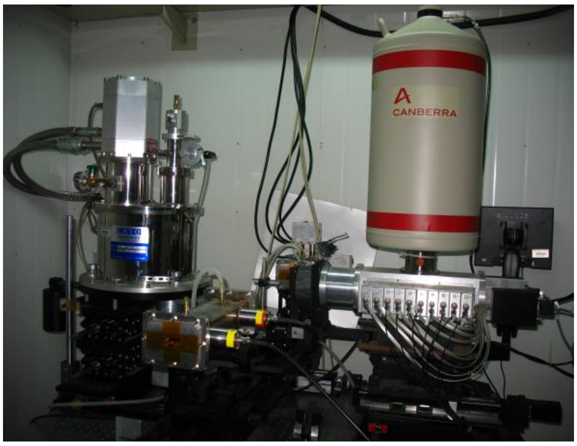
入射X射线波长：0.154 nm

能量分辨率（△E/E）：$\sim 10^{-3}$

光通量（photons/s）：$\geq 1\times10^{11}$

光斑尺寸(H×V)：1.2×0.3 mm^2

SAXS相机长度：5 m 以内可调



1W1B-XAFS 实验站

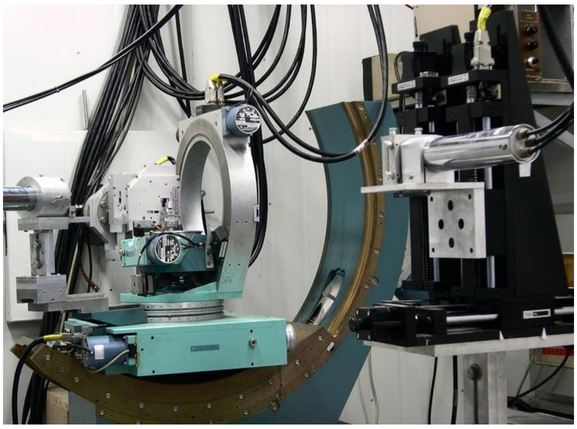
【样品处的光源参数】

能量范围: 4 - 25 keV

能量分辨率（△E/E）：$< 3 \times 10^{-4}$ @ 9 keV

光通量（photons/s）：$> 3\times10^{11}$ @ 10 keV

光斑尺寸（H×V）：0.9×0.3 mm^2



1W1A-漫散射实验站

【样品处的光源参数】

能量范围：8.05 keV，13.9 keV

能量分辨率（△E/E）：4.4×10^{-4} @ 8.05 keV

光通量（photons/s）：$>1\times10^{11}$ @ 8.05 keV

光斑尺寸（H×V）：0.7×0.4 mm^2

BSRF 各实验站/组联系方式

实验站/组名称	联系人	电话	Email
1W1A-漫散射实验站	王焕华	010-88235994	wanghh@ihep.ac.cn
1W1B-XAFS 实验站	张　静	010-88235980	jzhang@ihep.ac.cn
1W2A-小角散射实验站	吴忠华	010-88235982	wuzh@ihep.ac.cn
1W2B-衍射谱学综合实验站	刘　鹏	010-88235998	liup@ihep.ac.cn
3W1A-X 射线光学测试实验站			
1B3-X 射线光刻实验站	伊福廷	010-88235983	yift@ihep.ac.cn
4W1A-X 射线成像实验站	袁清习	010-88235990	yuanqx@ihep.ac.cn
4W1B-X 射线荧光微分析实验站	陈栋梁	010-88235156	chendl@ihep.ac.cn
4W2-高压实验站	李晓东	010-88235981	lixd@ihep.ac.cn
4B7A-中能实验站	赵屹东	010-88235979	zhaoyd@ihep.ac.cn
4B7B-软 X 射线实验站			
4B8-真空紫外实验站	陶　冶	010-88235978	taoy@ihep.ac.cn
4B9A-衍射实验站	吴忠华	010-88235982	wuzh@ihep.ac.cn
4B9B-光电子能谱实验站	王嘉鸥	010-88235992	wangjo@ihep.ac.cn
工程技术部	盛伟繁	010-88235414	shengwf@ihep.ac.cn
	李　明	010-88236710	lim@ihep.ac.cn
用户办公室	何　伟	010-88235027	bsrfhew@ihep.ac.cn
	于梅娟	010-88236229	yumj@ihep.ac.cn

BSRF 地理位置与交通

一、火车

（1） 北京站：乘地铁 2 号线至复兴门站，换乘地铁 1 号线至玉泉路站下车，由西北口（A 口）出。

（2） 北京西站：乘坐 76 路公共汽车至玉泉路口东站下车。

二、飞机（首都机场）

（1）乘机场大巴至公主坟站，乘出租车或 370、76、1、337 等公共汽车至玉泉路口东站或玉泉路口西站下车；

（2）乘地铁机场专线至东直门站换乘地铁 2 号线，至复兴门站换乘地铁 1 号线，至玉泉路站下车，由西北口（A 口）出。