

2012 年度高分子物理与化学国家重点实验室

青年骨干学术交流报告会

2013.01.08 · 长春

中国科学院长春应用化学研究所
高分子物理与化学国家重点实验室

2012 年度实验室青年骨干学术交流报告会报告时间表

(2013.01.08 长春应化所主楼四楼 410 学术报告厅)

	时 间	报告人	职 称	报告题目
主持人：韩艳春				
1.	08:30-09:00	谢志刚	研究员	生物可降解两亲性高分子药物载体
2.	09:00-09:30	张效洁	副研究员	碳氢活化直接芳基化反应合成给-受体型共轭高分子
3.	09:30-10:00	乔文强	副研究员	近红外活性功能有机材料的合成与性能
	10:00-10:20	休 息		
4.	10:20-10:45	李 慧	助 研	有机金属铂(II)配合物的设计合成及性能研究
5.	10:45-11:10	战宏梅	助 研	BHJ 有机太阳能电池给体材料的设计和研究
午 休				
主持人：李悦生				
6.	14:00-14:25	吴晓甫	助 研	共轭聚合物荧光传感材料的设计与性能研究
7.	14:25-14:50	邵世洋	助 研	高分子主体材料与磷光材料的合成与性能
8.	14:50-15:15	史新翠	助 研	卡宾类镍、钯催化剂在金属偶联聚合反应中的应用
9.	15:15-15:40	王永霞	助 研	过渡金属催化烯烃聚合反应的密度泛函研究
	15:40-16:00	休 息		
10.	16:00-16:25	刘东涛	助 研	喹啉胺稀土配合物的合成及催化聚合性质的研究
11.	16:25-16:50	李占伟	助 研	软两面神粒子聚集结构调控的计算机模拟研究

目 录

1 生物可降解两亲性高分子药物载体 谢志刚.....	1
2 碳氢活化直接芳基化反应合成给-受体型共轭高分子 张效洁.....	3
3 近红外活性功能有机材料的合成与性能 乔文强.....	5
4 有机金属铂(II)配合物的设计合成及性能研究 李 慧.....	7
5 BHJ 有机太阳能电池给体材料的设计和研究 战宏梅.....	9
6 共轭聚合物荧光传感材料的设计与性能研究 吴晓甫.....	11
7 高分子主体材料与磷光材料的合成与性能 邵世洋.....	13
8 卡宾类镍、钯催化剂在金属偶联聚合反应中的应用 史新翠.....	15
9 过渡金属催化烯烃聚合反应的密度泛函研究 王永霞.....	17
10 喹啉胺稀土配合物的合成及催化聚合性质的研究 刘东涛.....	19
11 软两面神粒子聚集结构调控的计算机模拟研究 李占伟.....	21
附具有博士学位的副研、助研人员名单(按课题组顺序, 2012 年)	23

生物可降解两亲性高分子药物载体

谢志刚，景遐斌

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室，长春市人民大街 5625 号，邮编 130022

两亲性高分子是指分子中同时具有亲水链段和疏水链段的聚合物，其能够在水溶液中通过自组装过程形成聚合物胶束或囊泡。胶束是指内核疏水、外壳亲水的核壳型纳米聚集体。而聚合物囊泡是由密闭双分子层所形成的球形或椭球形中空结构的聚集体，它们的结构如图 1 所示。聚合物胶束或囊泡由于其高的稳定性和独特的结构使得其在药物输送领域具有特殊的优势。聚合物胶束或囊泡可以分别包裹脂溶性和水溶性的药物，囊泡还能同时包裹脂溶和水溶性的药物。本文将重点介绍我们近期在生物可降解两亲性高分子药物载体方面的最新进展。

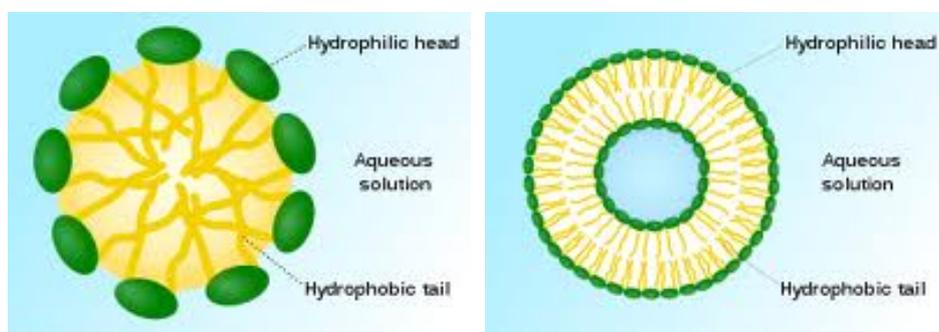


图 1，聚合物胶束（左）和聚合物（右）囊泡的结果示意图。

聚合物胶束纳米药物的发展已由体外研究逐渐转入体内研究阶段，通过荧光标记等方法，我们重点研究了聚合物纳米药物在患病小鼠体内的治疗效果，血液清除和生物学组织分布等问题。和单纯的小分子药物相比较，聚合物纳米药物大大降低了药物的毒副作用，表现出了明显地治疗效果，有效地延长了患病小鼠的生存时间。进一步研究发现，聚合物纳米药物在血液中的循环时间显著增加。另一方面，研究发现聚合物纳米药物通过静脉注射的方法进入小鼠血液循环系统后，尽管肿瘤组织药物的含量要显著高于相应的小分子药物，但仍然有大量的聚合物纳米药物在代谢器官中富集，特别是在肝、肾和脾组织。进一步研究表明，通过改变纳米药物的大小，可以降低药物在代谢器官的富集，从而增加药物在肿瘤组织的富集，最终提高疗效。

人造红血球可以解决目前临床输血上存在的诸多弊端。聚合物囊泡的亲水性空腔可以用来包裹水溶性的药物，比如多肽、蛋白质和核酸类药物。利用聚合物囊泡包裹血红蛋白，进而有望获得血液替代物。改变两亲性共聚物上聚酯链段的长度，可获得不同大小的聚合物囊泡，通过膜水合的方法，可以将血红蛋白包裹在聚合物囊泡中，结果发现包裹的血红蛋白依然具有结合氧的能力，表明血红蛋白的活性没有丧失。目前，正改进方法，期望活得高血红蛋白含量的聚合物囊泡，同时保证体系的粘度，渗透压等基本参数接近人血标准。

个人简历



姓名: 谢志刚

职称: 研究员

单位: 中国科学院长春应用化学研究所

办公电话: 0431-85262779

E-mail: xiez@ciac.jl.cn

主要研究领域: 生物医用高分子; 聚合物的组装; 多孔聚合物。

学术经历: 2002-2007, 中国科学院长春应用化学研究所, 博士; 2007-2008, 美国纽约理工大学, 博士后; 2008-2011, 美国北卡大学, 博士后; 2012年, 中国科学院长春应用化学研究所, 研究员

奖励: 2007年, 获得中国科学院宝洁优秀博士生奖学金

主要成果: 1. **Zhigang Xie**, Cheng Wang, Kathryn E. deKrafft, Wenbin Lin. Highly stable and porous cross-linked polymers for efficient photocatalysis. *Journal of the American Chemical Society* 2011, 133(7), 2056-205; 2. **Zhigang Xie**, Liqing Ma, Kathryn E. deKrafft, Athena Jin, Wenbin Lin. Porous phosphorescent coordination polymers for oxygen sensing. *Journal of the American Chemical Society* 2010, 132(3), 922-923.

碳氢活化直接芳基化反应合成给-受体型共轭高分子

张效洁, 耿延候, 高焱, 李斯达

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

给-受体型共轭聚合物是指由富电子芳香单元(电子给体)与缺电子芳香单元(电子受体)通过共价键交替连接形成的共轭聚合物。由于电子给体与受体单元间可以发生分子内电荷转移, 导致聚合物带隙变窄, 因此, 选择适当电子给体单元和受体单元构造共轭聚合物是目前制备窄带隙共轭高分子的最主要方法。过去几年来, 正是由于大量具有窄带隙特征的给-受体型共轭聚合物的设计与合成, 使得聚合物太阳能电池的性能大幅提高, 实现了能量转换效率由~4%到~8%的突破性进展。另一方面, 由于给-受体型共轭聚合物重复单元具有大的偶极矩, 有助于提高分子之间相互作用力, 近三年来, 给-受概念成功应用于高迁移率共轭高分子的设计与合成, 实现了场效应迁移率由 $10^{-1} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 到 $3\text{-}5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 的巨大跨越。目前给-受体型共轭高分子通常采用传统的金属催化交叉偶联聚合反应合成, 不仅合成过程复杂、成本高、原子经济性差, 而且通常采用的 Stille 聚合过程会生成大量有毒废弃物。这种现状将会对这类共轭高分子的规模化制备和应用产生影响。

近年来, 随着过渡金属催化理论的发展, 碳氢键活化直接芳基化偶联反应取得了巨大突破, 已经成为现代有机合成化学的重要研究领域之一。基于碳氢键活化的偶联方法不但可以简化和缩短合成路线、提高反应的原子经济性、减少有毒废弃物的产生, 还能够合成一些传统方法无法实现的新化合物。2010 年, Takita 和 Ozawa 采用这类碳氢活化偶联方法成功合成了区域规整聚(3-烷基噻吩)^[1], 2011 年, Mario Leclerc 等人又将这类碳氢活化偶联反应成功应用于给-受体型共轭聚合物的合成, 他们发现, 采用碳氢活化偶联聚合方法比经典 Stille 聚合更易获得高分子量产物^[2]。这些先驱性工作证明了这类碳氢活化偶联反应在合成共轭聚合物方面的巨大潜力。同样, 以碳氢活化偶联反应作为聚合方法合成给-受体型共轭高分子也是具有高度挑战性的新领域。碳氢键的键能高、极性小、反应活性低, 但通过对文献的分析和研究, 我们注意到在碳氢活化偶联反应中碳氢键的活性主要取决于其所在单体推拉电子能力的强弱, 即推拉电子能力越强的单体中的碳氢键活性越高。给-受体型共轭高分子正是由两类具有相反推拉电子能力的单体组成的, 因此我们认为合成给-受体型共轭高分子是展示碳氢活化偶联聚合反应的最佳平台。本文以 5, 6-二氟代苯并噻二唑和 2, 7-二溴-9, 9'-二辛基芴为聚合单体, 通过金属钯催化碳氢活化缩聚反应, 实现了聚(5, 6-二氟代苯并噻二唑-*alt*-9, 9'-二辛基芴)的合成, 其数均分子量大于 20000 Da。此外, 本文还对含噻吩端基缺电子聚合单体的碳氢活化直接芳基化缩聚反应进行了初步的考察, 确定了其可行性以及目前存在的问题。

参考文献:

1. Q. Wang, R. Takita, Y. Kikuzaki, F. Ozawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 11420-11421.
2. P. Berrouard, A. Najari, A. Pron, D. Gendron, P. Morin, J. Pouliot, J. Veilleux, M. Leclerc, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 2068-2071.

个人简历



姓名: 张效洁

职称: 副研究员

单位: 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春应化所

办公电话: 86-431-85262647

E-mail: xjzhang@ciac.jl.cn

主要研究领域: 碳氢活化直接官能团化、聚合反应及其在有机共轭材料领域的应用; 高性能有机半导体材料的设计与合成。

张效洁, 博士, 副研究员。2002年本科毕业于上海复旦大学化学系, 2008年在中国科学院长春应用化学研究所获得理学博士学位, 主要从事单分散共轭齐聚物合成方法学及其半导体性质的研究。此后分别在新加坡国立大学化学系、德国马普学会高分子研究所从事博士后研究工作, 主要从事二维有机共轭分子合成方法以及有机场效应晶体管材料领域的研究工作。2011年回到长春应用化学研究所, 目前主要从事碳氢活化偶联反应及有机小分子电池材料方面的工作。近五年来已发表SCI收录论文17篇, 其中, 两篇被Synfacts评述, 发表论文被国内外同行引用100余次。在单分散共轭齐聚物的设计与合成方面, 发展了发散/收敛合成路线, 成功合成了分子量超过7000 g/mol的单分散齐聚(芴-alt-联噻吩), 建立了链长与光电性质的关系。利用分子内氧化环化、光氧化环化、碳氢活化环化, 以及Michael加成等反应, 发展了三类二维有机共轭分子的合成方法。

近红外活性功能有机材料的合成与性能

王植源, 乔文强, 郑秀萍, 张健

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

近红外活性材料主要是指在近红外的波长(750~2000 nm)范围内具有变色、发光或光伏性质的材料。该类材料由于在光通信、生物传感器、荧光免疫分析、太阳能电池、伪装与隐身以及数据信息存储等领域具有非常广阔的应用前景,使这类材料越来越受到世界各国的重视,吸引着众多科研人员从事该领域的研究工作。葱醌酰亚胺是一类近红外电致变色化合物,但受制于其制备产率低,使该类材料的研究及应用都受到较大的限制。我们建立了一种高产率的制备葱醌酰亚胺的方法,并详细研究了其电致变色行为,发现葱醌酰亚胺可以在电场的调控下实现从中性态到自由基阴离子、二价阴离子的可逆转变,同时,其阴离子在近红外区有较宽波长范围的变色效应,并且变色的波长范围可通过取代基的电子效应进行调节。在此基础上,通过 *N*-丁基-6-溴-葱醌-2,3-二羧酸酰亚胺与不同的刚-柔结构相连,获得了一类多功能性材料。该类材料既具有近红外波长范围内的电致变色性、可见光区的压致变色性,还具有热致液晶性。

利用近红外的电致变色材料可以制备成可变发射率的器件,应用于航天器的热控系统中,以其体积小、质量轻、智能控制等优点,可望代替传统的体积大、质量重、结构复杂、成本昂贵的热控制系统。满足该性能要求的变色材料,除了要求材料具备稳定、可逆的电化学性质、较快的响应速度等性能外,还要求材料具备耐空间环境的能力,即耐高真空、热循环以及带电粒子的辐照等。聚酰亚胺是一种综合性能优异的高分子材料,它具有较高的耐辐照性能,在空间领域得到了广泛的应用。因此,我们设计了一种含葱醌酰亚胺结构的二胺类单体,希望通过该单体与不同结构的二酐进行缩聚,合成出侧链上带有葱醌酰亚胺结构的聚酰亚胺,希望该材料既具有葱醌酰亚胺的近红外电致变色性,又具有聚酰亚胺优异的综合性能及耐空间环境的能力,以满足航天器热控制系统的要求。目前,该部分研究仍在进行中。

个人简历



姓名: 乔文强

职称: 副研究员

单位: 长春应化所高分子物理与化学国家重点实验室

办公电话: 0431-85262530

E-mail: wqqiao@ciac.jl.cn

主要研究领域

有机/聚合物近红外光电功能材料及器件; 液晶材料。

乔文强, 男, 1975 年出生。博士, 中国科学院长春应用化学研究所, 副研究员。2005 年 12 月于西北工业大学理学院获得材料物理与化学博士学位。2005 年 10 月至 2007 年 12 月, 在北京大学化学博士后科研流动站从事研究工作。2008 年 1 月至 2008 年 12 月, 在加拿大卡尔顿大学化学系从事研究工作。2009 年 1 月-2012 年 5 月, 任教于哈尔滨工业大学材料学院。长期从事有机近红外材料及液晶高分子的研究工作, 重点研究材料的合成法、电致变色、电致发光、功能化及在红外光电器件中的应用。先后承担博士后基金、国家青年科学基金等项目, 累计发表 SCI 论文 19 篇, 获中国授权发明专利 2 项。曾获陕西省科学技术奖三等奖一项。

有机金属铂(II)配合物的设计合成及性能研究

李慧, 李静, 袁伟, 张子龙, 王兴东, 丁军桥, 程延祥

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

有机金属铂(II)配合物作为有效的磷光发射材料应用于有机发光器件(OLED)已取得了显著的研究成果。特别是近年来, 在高发光效率、刚性及有立体位阻的铂(II)配合物设计上, 研究人员已掌握了一定规律。然而, 由于铂(II)配合物的平面四方配位构型要求及共轭刚性配体间的 π - π 堆积作用, 导致分子间相互作用很强, 带来诸如效率降低、光谱红移、变宽、寿命变长等问题, 使铂(II)配合物作为发光材料始终没有得到根本的改善。

树枝状分子是一类三维结构确定的超支化大分子化合物。近年来, 国内外一些研究小组利用树枝状分子结构(金属配合物作为发光核, 数层重复树枝单元赋予功能化, 表面基团改善溶解性), 合成磷光金属配合物, 简化了器件结构, 实现了溶液加工, 并提高了发光性能。除了上述优点外, 大体积的树枝还具有分子隔离和包封作用, 能够避免浓度依赖性的发光分子自淬灭效应, 因此, 利用树枝状分子结构来抑制铂(II)配合物分子间相互作用、提高器件发光效率是可行的。

研究工作主要围绕“如何设计满足铂(II)离子平面配位构型的具有明确功能作用的配体、恰当利用或阻止分子间相互作用以及确定发光铂(II)配合物结构与性能间的对应关系”展开。具体采用刚性、大体积的咪唑树枝作为外围取代基, 合成树枝状铂(II)配合物, 利用树枝的分子隔离和包封作用, 来抑制分子间相互作用。结果异配绿光铂(II)配合物(*t*-BuCzPBI)Pt(acac)的最大流明效率为 17.5 cd/A, 是非树枝状铂(II)配合物(PBI)Pt(acac) (10.7 cd/A)的 1.64 倍; 增加第二配体的空间位阻, 能够进一步抑制分子间的相互作用, 配合物(*t*-BuCzPBI)Pt(dpm)的最大流明效率提高到 24.76 cd/A; 采用均配配位构型, 立体包裹更利于发挥树枝的功能, 蓝光联咪唑基均配铂(II)配合物的粉末态发光效率随着树枝体积的增加而增加: CC-2: 18.3% > Cz-2: 14.7% > B-2: 8.5% > M-2: 6.5%。

通过对铂(II)配合物的研究我们发现: 辅助配体体积较小, 异配配位构型易于保持理想的平面构型, 但单边树枝包裹作用不完全, 铂(II)配合物仍以 Dimer 方式堆积; 采用均配配位结构可以实现双边立体包封, 解决了包裹作用不完全的问题, 但围绕金属 Pt 的两个六元芳环构成的基本配体配位拥挤, 使平面构型发生严重的扭曲, 发光核的效率显著降低, 甚至不发光; 因此, 采用异配配位结构有利于保证铂(II)配合物的平面配位构型, 通过增加辅助配体端基位阻, 同时改变外围树枝的取向排布, 将有可能既满足平面配位构型要求, 又可以完全抑制分子间相互作用。于是提出一种改善树枝状铂(II)配合物抑制分子间相互作用的方法, 即柔性连接发光核和外围树枝的方法。柔性连接的树枝状铂(II)配合物, 改变了其传统的 Dimer 堆积方式, 大大地减少了发光核之间的相互作用。再通过改变取代基的位置、引入杂原子和去留 4-苯基的方式, 细节上调控分子间相互作用, 合成出一系列高效的基于 2-苯基咪唑/异咪唑的红、橙光异配铂(II)配合物, 实现了目前红光铂(II)配合物溶液旋涂型最高流明效率 21.93 cd/A, 和橙光的最高流明效率 27.39 cd/A。

个人简历



姓名：李慧

职称：助理研究员

单位：合成楼 302 室

办公电话：0431-85262168

E-mail: lihui@ciac.jl.cn

主要研究领域：有机金属配合物光电转换材料。

2012-今，中国科学院长春应用化学研究所，高分子物理与化学国家重点实验室程，助理研究员。2006-2011，中国科学院长春应用化学研究所，高分子物理与化学专业，理学博士学位。2002-2006，东北师范大学，化学教育专业，理学学士学位。

研究成果：有机金属铂(II)配合物被认为是显示领域中具有实际应用前景的一类发光材料。鉴于铂(II)配合物的发展趋势及其研究中存在的问题，设计并合成出既具有理想的平面配位构型，又能有效控制分子间相互作用的高效铂(II)配合物发光材料，并得出铂(II)配合物的配体设计-结构特性-高效性能三者之间的关系，为铂(II)配合物发光材料的进一步发展提供基础。

目前主持国家自然科学基金委青年科学基金 1 项。

已发表与待发表论文有：

[1] Synthesis, Characterization and Electrophosphorescent Properties of Mononuclear Platinum(II) Complexes Based on 2-Phenylbenzimidazole Derivatives. **Hui Li**, Junqiao Ding, Zhiyuan Xie, Yanxiang Cheng, Lixiang Wang. *J. Organomet. Chem.* **2009**, 694, 2777.

[2] 2-苯基异喹啉及其衍生物铂(II)配合物的合成和光谱性质. **李慧**, 袁伟, 王兴东, 陈博, 程延祥, 谢志元, 王利祥. *应用化学*. **2012**, 29, 1148.

[3] Homoleptic Blue Phosphorescent 2,2'-Biimidazole-Based Platinum(II) Complexes: Ideal Square-Planar Structure, Why not Emissive in Solution. **Hui Li**, Wei Yuan, Jing Li, Luyi Zou, Xingdong Wang, Xiao Li, Yanxiang Cheng. *Chem. Mater.* In Preparation.

[4] Synthesis, Structure, Optoelectronic Properties of Dendrimeric Pt(II) Complexes and its Ability to Inhibit Intermolecular Interaction. **Hui Li**, Jing Li, Junqiao Ding, Wei Yuan, Zilong Zhang, Luyi Zou, Xingdong Wang, Hongmei Zhan, Zhiyuan Xie, Yanxiang Cheng, Lixiang Wang. *Chem. Mater.* In Preparation.

[5] Enhancement of Luminescent Performance of Pt(II) Dendrimers by Synthetic Controlling the Stacking Fashion of Molecules. **Hui Li**, Wei Yuan, Xingdong Wang, Zhiyuan Xie, Yanxiang Cheng, Lixiang Wang. In Preparation.

[6] Efficient Electrophosphors of 2-Phenylquinoline-Based Pt(II) Complexes for the Fabrication OLEDs. **Hui Li**, Wei Yuan, Xingdong Wang, Zhiyuan Xie, Yanxiang Cheng. In Preparation.

BHJ 有机太阳能电池给体材料的设计和研发

程延祥, 战宏梅

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室 长春市人民大街 5625 号 邮编 130022

近十几年来, 有机半导体材料作为一类极具前景的光伏材料, 引起了科研人员的高度重视。经过在设计新材料以及优化器件方面的不断努力, 目前有机太阳能电池的光电转换效率 (PCE) 已突破 8%^[1], 但是这个效率仍不能满足实用化的要求。有机太阳能电池主要存在着载流子迁移率低、结构无序和器件稳定性差等问题。理想的给体材料应该具备: (1) 宽广的吸收谱带 (带隙约为 1.5 eV) 和强的吸收系数; (2) 理想的 HOMO 和 LUMO 能级, 如以典型的 PCBM 为电子受体材料, 给体材料的 HOMO 能级应低于 -5.2 eV, LUMO 能级应在 -3.9 eV 左右; (3) 强的载流子传输能力; (4) 和富勒烯类电子受体共混后易形成有利于光电转化的微结构, 双连续的 D 和 A 相互渗透的网络结构。基于以上几点, 通过 D-A 交替方法设计了窄带隙的聚合物和小分子材料并进行了性能研究。主要包含以下三类给体材料:

1. 含有金属 Pt 的聚合物材料: 光敏层材料在吸收太阳光后会产生激子, 激子的有效分离和迁移是影响有机太阳能电池光电转化效率的主要因素之一。基于重金属 Pt 具有较高的单线态和三线态之间的系间窜越效率, 且三线态具有较长的寿命, 将重金属元素引入至共轭主链, 有望提高共轭主链激发态的寿命, 增强电子空穴有效分离的可能性, 从而有利于提高光电转化效率。设计了一系列含有金属 Pt 的窄带隙聚合物 (E_g : 1.69-1.88 eV), Pt 通过三键与 π -共轭的芳香基团相连接, 通过引入不同的给电子和吸电子构建单元, 改变中心的 π -共轭芳香体系来调节聚合物的吸收能力; 通过引入不同的烷基链改善聚合物的溶解性。该类聚合物在常温下的荧光寿命很短 (ns 量级), 而且在低温下也未能检测到类似其它 Pt 炔烃衍生物的磷光现象, 这些现象说明其激发态主要是单线态, 而非三线态, 如何更有效地利用三线态在太阳能电池中的应用还需要进一步探索。

2. 立构规整的有机聚合物: 电荷的传输是通过载流子相邻分子态之间进行跳跃实现的。立构规整度高的聚合物, 分子间的相互作用较强, 容易形成规整的凝聚态结构, 从而提高载流子的传输能力。此外, 由链和链间强相互作用引起的吸收谱带增强, 也增强了材料的吸收能力, 两者的共同作用有利于提高光电转化效率。设计了由 cyclopentadithiophene (CDT) 和 pyridalithiadiazole (PT) 交替组成的立构规整的共轭聚合物。该类聚合物在近红外区域 (800-1000 nm) 具有较强的吸收; 相对非规整的聚合物, 最高规整度的 rr-PCDTPT1 的电荷迁移率高两个数量级, 分别高达 $0.022 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (空穴迁移率) 和 $0.12 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (电子迁移率)。

3. 小分子材料: 相对高分子太阳能电池, 溶液法制备的小分子太阳能电池具有很多优点, 如具有特定的分子结构、分子设计的多样性、单分散度以及较好的重复性等, 可以更深入地探索和研究分子结构与性能的关系。三苯胺是一种特殊的螺旋桨式的分子结构, 具有各向同性的光学性质、强的给电子能力以及较高的空穴传输能力。设计了一系列三苯胺为端基的线型有机

小分子，其中引入强吸电子的苯并噻二唑为电子受体构建单元，以增强分子内的电荷传输能力，进而增强材料的吸收能力。该类材料的开路电压 V_{oc} 较高，大多高于 0.90 eV，其中以 CDT 为中心的小分子光电转化效率高达 3.28%。

参考文献：

1. R. F. Service, *Science (Washington, DC, U. S.)* **2011**, 332 (6027), 293.

个人简历



姓名: 战宏梅

职称: 助理研究员

单位: 高分子物理与化学国家重点实验室

办公电话: 8526-2572

E-mail: hmzhan@ciac.jl.cn

主要研究领域: 有机太阳能电池材料

2004: 兰州大学, 化学学士学位

2007: 中国科学院成都有机化学研究所, 有机化学硕士学位

2008.3-2011.6: 香港浸会大学, 理学博士学位

2010.6-2010.11: 美国加州大学圣芭芭拉分校 (UCSB), 交换生

2012.5-至今: 中国科学院长春应用化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室

发表论文:

1. **Hongmei Zhan**, Simon Lamare, Annie Ng, Tommy Kenny, Hannah Guernon, Wai-Kin Chan, Aleksandra B. Djurišić, Pierre D. Harvey, and Wai-Yeung Wong, "Synthesis and Photovoltaic Properties of New Metalloporphyrin-Containing Polyplatinyne Polymers", *Macromolecules* **2011**, 44, 5155-5167.
2. **Hongmei Zhan**, Wai-Yeung Wong, Annie Ng, Aleksandra B. Djurišić, Wai-Kin Chan, "Synthesis, Characterization and Photovoltaic Properties of Platinum-Containing Poly(aryleneethynylene) Polymers with Phenanthrenyl-Imidazole Moiety", *J. Organomet. Chem.* **2011**, 696, 4112-4120.
3. Lei Ying, Ben B. Y. Hsu, **Hongmei Zhan**, Gregory C. Welch, Peter Zalar, Louis A. Perez, Edward J. Kramer, Thuc-Quyen Nguyen, Alan J. Heeger, Wai-Yeung Wong, and Guillermo C. Bazan, "Regioregular Pyridal[2,1,3]thiadiazole π -Conjugated Copolymers", *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 18538-18541.

共轭聚合物荧光传感材料的设计与性能研究

吴晓甫, 童辉, 王利祥

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

荧光共轭聚合物具有分子导线的放大效应, 可以提高检测的灵敏度。同时, 共轭聚合物在结构上灵活多样的设计, 可用于阴离子、阳离子以及中性分子等各种分析物的检测中, 使其成为目前备受关注的荧光化学传感材料。尽管如此, 具有高灵敏度和高选择性的共轭聚合物荧光传感器分子的设计, 以及实现稳定的薄膜检测仍具有很大的挑战性^[1-4]。本文将重点介绍我们近期在共轭聚合物荧光传感材料的分子设计与传感性能及薄膜检测方面的研究进展。

在阳离子检测方面, 考虑到聚合物主链的灵活性和构象自由度可能调节氨基酸受体对 Hg^{2+} 的亲合性, 我们在共轭聚合物荧光传感器分子设计中引入间位连接的主链结构, 分别合成了侧链带有天冬氨酸, 主链为间位连接的水溶性含苄聚芳炔体系, 详细研究了聚合物主链连接方式的改变对汞离子检测性能的影响。结果表明在缓冲溶液中, Hg^{2+} 对两种连接方式的聚合物及其相应的模型化合物均表现出显著的荧光淬灭响应, 淬灭程度远高于其他离子, 具有良好的选择性。但不同的连接方式显著影响了聚合物对 Hg^{2+} 的灵敏度。间位连接的主链结构可能具有更高的灵活性, 使相邻单元上的氨基酸受体可以更有效的与 Hg^{2+} 结合能力, 提高了对 Hg^{2+} 检测性能, 淬灭常数为 $1.04 \times 10^7 \text{ M}^{-1}$, 比主链为对位连接方式的聚合物的淬灭常数 ($3.42 \times 10^6 \text{ M}^{-1}$) 高三倍; 检测限低至 10 nM , 低于对位连接的聚合物的检测限 (40 nM)。间位和对位连接模型化合物也表现出类似的结果, 进一步验证结构对检测性能的影响。

在阴离子检测方面, 针对共轭聚合物传感器检测灵敏度高, 选择性较低, 而小分子化学计量传感器选择性高, 但灵敏度较低的特点, 我们将共轭聚合物的主链引入能与 CN^- 发生高效选择性反应的受体单元 (二氰基乙烯单元), 提出将 CN^- 亲核加成反应的高效特异性与共轭聚合物荧光传感器的信号放大效应相结合来设计共轭聚合物荧光传感器的思路, 制备出高选择性和高灵敏度检测 CN^- 的共轭聚合物传感材料。聚合物表现出优异的 CN^- 选择性和竞争选择性, 检测过程产生从黄绿色到无色的颜色变化以及橙红光到蓝光的荧光变化, 可直接与其他离子通过肉眼分辨。 CN^- 对聚合物荧光淬灭的线性响应范围为 $0.5 - 30 \mu\text{M}$, 检测限达到 14 ppb , 是目前共轭聚合物荧光传感器检测 CN^- 的最好结果。与相应的小分子模型化合物的对比研究表明, 聚合物表现出放大的荧光响应和更宽的线性范围, 更好的选择性, 以及更快的响应时间。

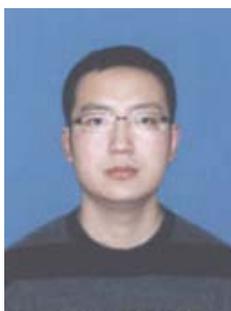
针对目前薄膜荧光传感器因物理吸附导致荧光团泄露, 污染分析系统, 同时在溶液中灵敏度和选择性较低, 很少用于溶液中离子检测的缺陷, 我们将共轭聚合物共价固定于基底表面, 利用磷酸酯受体对 Fe^{3+} 的选择性, 以及共轭聚合物薄膜的高灵敏度, 设计并制备了溶液中稳定

的磷酸酯聚芴薄膜，检测有机溶液及水溶液中的 Fe³⁺。接触角，XPS 及稳态荧光和吸收光谱证实其在玻璃表面的稳定结构。在有机溶液及水溶液中，磷酸酯聚芴薄膜的荧光能够选择性的被 Fe³⁺淬灭，具有良好的选择性，淬灭常数分别为 $1.33 \times 10^6 \text{ M}^{-1}$ 和 $6.02 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$ ，检测限分别达到 8.4 ppb 和 0.14ppm，是目前荧光薄膜传感器检测 Fe³⁺的最好结果。检测性能超过聚合物溶液及旋涂膜，体现出这种共价固定膜的优势，实现了有机溶液及水溶液中对 Fe³⁺稳定高效的薄膜检测。

参考文献：

1. Thomas, S. W., III.; Joly, G. D.; Swager, T. M., *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 1339-1386.
2. Qin, C.; Wu, X.; Gao, B.; Tong, H.; Wang, L. *Macromolecules* **2009**, *42*, 5427-5429.
3. Kim, T.-H.; Swager, T. M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 4803 - 4806.
4. He, G.; Zhang, G.; Lu, F.; Fang, Y. *Chem. Mater.* **2009**, *21*, 1494-1499.

个人简历



姓名: 吴晓甫

职称: 助理研究员

单位: 高分子化学与物理国家重点实验室

办公电话: 85262379

E-mail: wxp@ciac.jl.cn

主要研究领域: 共轭聚合物荧光传感器。

吴晓甫，2004年7月本科毕业于黑龙江大学化学化工与材料学院，2007年7月硕士毕业于黑龙江大学化学化工与材料学院。硕士在读期间，研究方向为生物可降解材料，从事聚丙烯酯类可降解材料的设计、合成与性能研究。2007年考入中科院长春应化所博士研究生，并于2011年1月获博士学位；同年，项目聘用于长春应化所；2012年2月至今，受聘于中科院长春应化所，助理研究员。博士在读期间及目前的主要研究方向为共轭聚合物荧光传感器，从事有机/高分子荧光化学传感材料的设计、合成与性能研究。

高分子主体材料与磷光材料的合成与性能

邵世洋, 丁军桥*, 王利祥*, 景遐斌, 王佛松

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

高分子磷光材料因同时具备优异的发光特性和良好的加工性能而成为有机电致发光领域的研究重点之一。目前, 蓝光和白光磷光高分子器件性能较低, 已经成为制约高分子磷光材料整体发展的瓶颈问题。^[1-3] 解决这一问题的关键在于开发高效的高分子主体材料。^[4] 本文以高三线态双极高分子主体的结构设计为突破口, 通过化学链引入蓝光和橙光铱配合物, 发展一系列高效率的蓝光和白光磷光高分子。

1. 以三芳基氧磷作为高分子骨架的构建单元, 同时在高分子侧链引入咔唑/三苯胺单元, 利用亲核缩聚反应和 Yamamoto 聚合反应, 合成了一系列具有不同能级结构和载流子传输能力的高分子主体。结果表明, 氧原子和 P=O 键的引入能打断高分子主链的共轭程度, 使得高分子保持高三线态能级 (2.72~2.96 eV)。另一方面, 三芳基氧磷和咔唑/三苯胺单元的同时引入赋予了高分子主体良好的双极特性。以此类高分子作主体的蓝光双层器件的发光效率最高达到 24.8 cd/A, 而以之作主体的蓝、绿、红光单层器件的效率则分别达到 9.8 cd/A, 32.3 cd/A 和 4.9 cd/A。

2. 在上述高分子主体的基础上, 通过在其侧链引入蓝光或橙光铱配合物, 同时, 为提高铱配合物对聚合条件的耐受性, 利用 F 原子对其主链进行活化, 分别合成了系列蓝光和橙光磷光高分子。结果表明, 在蓝光高分子中, 从主体到掺杂剂的能量传递在电致发光过程中起主导作用; 而在橙光高分子中, 除能量传递外, 电荷俘获效应也是磷光染料形成激子的重要过程。当掺杂含量为 5 mol% 时, 蓝磷光高分子的器件效率最高达到 19.4 cd/A; 当掺杂含量为 3 mol% 时, 橙磷光高分子的效率达到 10.4 cd/A。

3. 通过在高分子主体的侧链同时引入蓝光和橙光铱配合物, 并通过控制二者的投料比调节 EL 光谱中蓝光和橙光的相对强度, 得到了系列全磷光单一白光高分子。其电致发光过程存在有主体到掺杂剂的直接能量传递, 主体经蓝光至橙光染料的阶梯式能量传递以及电荷俘获过程。相比于荧光白光高分子, 全磷光白光高分子具有更高的掺杂含量以及更宽的掺杂剂调节窗口。器件结果表明, 当蓝光和橙光染料的掺杂含量分别为 7.5 mol% 和 0.7 mol% 时, 高分子的发光性能最优, 达到 18.4 cd/A, 色坐标为 (0.31, 0.43)。

个人简历



姓名: 邵世洋

职称: 助理研究员

单位: 中科院长春应化所高分子物理与化学国家重点实验室

办公电话: 0431-85262105

E-mail: ssyang@ciac.jl.cn

主要研究领域: 有机/高分子电致发光材料与器件

邵世洋, 博士, 助理研究员。2006年6月毕业于武汉大学化学与分子科学学院, 获学士学位。2012年1月毕业于中国科学院长春应用化学研究所, 获博士学位并留所工作至今。自攻读博士学位至今, 从事有机/高分子电致发光材料与器件方面的研究工作。主要研究成果: 1. 开发出系列适用于蓝色磷光器件的高三线态双极高分子主体材料; 2. 发展了系列具有高发光效率的蓝光以及全磷光白光高分子材料; 3. 提出“螺环连接的超支化结构”的分子设计思路, 有效解决了低三线态高分子主体下能量回传这一影响材料性能的关键问题。研究成果发表于 *J. Am. Chem. Soc.*, *Adv. Mater.*, *J. Mater. Chem.* 等期刊。

卡宾类镍、钯催化剂在金属偶联聚合反应中的应用

史新翠, 耿延候

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

近 20 年来, 共轭聚合物由于其独特的光电性能, 可以应用于有机发光二极管、聚合物太阳能电池等领域, 受到越来越多的关注。Kumada、Negishi、Suzuki、Stille 及 Yamamoto 等过渡金属催化的碳-碳(C-C)偶联反应是合成共轭聚合物的主要方法^[1]。这几种方法通常需要较长反应时间(2-3 天), 而且由于其过程遵循逐步缩聚反应的机理, 所得聚合物分子量、分子量分布等结构参数难以控制, 聚合结果重现性较差。众所周知, 材料的结构是决定材料性质的关键因素。因此, 通过新方法实现共轭聚合物可控聚合, 得到分子量可控、窄分子量分布及端基明确的共轭聚合物, 从基础和应用角度来讲都有重要意义。

Kumada 催化剂转移链式缩聚反应其核心是催化剂分子内转移, 该方法是实现共轭聚合物可控聚合的重要突破^[2]。其催化循环过程, 主要经过氧化加成, 过渡金属化和还原消去三个基本反应步骤。McCullough 等提出经过还原消去后形成的 Ni(0)可以与最近的芳香环络合, 经过分子内的迁移, 移动到聚合物链端对 C-X 进行氧化加成。催化剂分子的分子内转移是实现可控聚合的核心。然而, 利用 KCTP 聚合方法, 得到高分子量、窄分子量分布的共轭聚合物, 仍然是该领域的一大难题。主要可以通过抑制链转移和链终止反应以及抑制催化剂配体的分解实现。催化剂是实现可控聚合的核心, 其催化活性和催化剂的稳定性, 受配体的立体和电子效应影响。传统的含 P 配合物, 在反应过程中容易发生配体转移反应, 很难实现真正的活性聚合, 得到超高分子量的共轭聚合物。卡宾类配体作为一种重要的无磷配体, 由于其可以与金属形成稳定的配合物结构, 从而有效地降低配体用量。主要以咪唑为基本卡宾结构, 通过调节取代基可以有效地调控金属中心的电子性质和空间位阻, 实现对催化剂催化活性的调节。研究和开发一类无磷的卡宾配合物, 调节其立体和电子结构稳定催化活性种, 从而实现对聚合过程的有效调节, 是具有重要研究意义的新领域。本工作合成了一系列含有卡宾配体的镍催化剂, 初步探索了不同结构卡宾镍配合物在催化聚合过程中的行为, 结果显示 12e 的 IPrNi(0)配合物, 能够很好地稳定催化循环中的络合过渡态, 抑制配体转移反应, 得到高分子量的共轭聚合物, 其数均分子量可以达到 10 万以上。此外, 我们还通过分析聚合物的端基, 确定了 IPrNi(ally)Cl 催化反应的可能机理。利用结构明确的催化剂实现有效地分子内链式转移聚合, 降低配体用量。我们成功合成了一类含有卡宾的外加引发剂, 利用单晶 X-射线表征了催化剂的结构, 拟利用这类催化剂分析不同辅助配体在整个催化循环中的行为以及其对聚合反应的影响。

参考文献:

1. (a) Y. J.Cheng, S. H. Yang, C.S. Hsu, *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 5868-5923. (b) B. Carsten, F. He, H. J. Son, T. Xu, L. Yu, *Chem. Rev.* **2011**, *111*, 1493-1528.
2. A. Kiriy, V. Senkovskyy1, M. Sommer, *Macromol. Rapid. Commun.* **2011**, *32*, 1503-1517.

个人简历



姓名: 史新翠

职称: 助理研究员

单位: 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春应化所

办公电话: 86-431-85262647

E-mail: xcsh@ciac.jl.cn

主要研究领域: 烯烃配位聚合、聚烯烃化学改性、镍、钯催化共轭聚合物的合成方法研究

史新翠, 博士, 助理研究员。2006年本科毕业于泰山学院化学系, 2011年在中国科学院长春应用化学研究所获得理学博士学位, 主要从事烯烃配位聚合以及聚烯烃化学改性研究, 及镍、钯催化共轭聚合物的合成方法研究。已发表SCI收录论文6篇。

过渡金属催化烯烃聚合反应的密度泛函研究

王永霞

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

聚烯烃是高分子材料中非常重要的一类, 应用最为广泛, 其制备技术代表一个国家的石化工业发展水平。聚烯烃材料的发展核心是新型烯烃聚合催化剂的开发, 因此, 新型烯烃聚合催化剂的设计与合成始终是高分子学科的研究重点之一。量子化学方法是对烯烃聚合反应进行理论研究的重要手段之一。量子化学计算方法与实验研究的结合可提供对烯烃聚合过程: 如催化剂结构、共聚行为、立体定向性、催化剂活性和结构关系等的进一步认识, 这点对于实验难以观测表征的体系尤为重要。我们采用密度泛函方法对过渡金属催化烯烃聚合机理、共聚机理、催化剂结构对活性与聚合产物影响等多方面进行了理论模拟研究。

针对 2-4 价钒催化剂、活性种结构及催化反应机理难以用实验手段进行研究, 重点研究了水杨醛亚胺钒(III)催化乙烯聚合反应的详细机理。理论研究结果明确了此体系中催化活性种结构为中性钒(III)活性种, 而助催化剂 AlEt_2Cl 与钒配合物形成含两个氯桥结构双金属配合物最有利于催化乙烯聚合。我们还对含酚-膦配体的半茂钛化合物催化乙烯和降冰片烯共聚反应的详细机理进行了研究, 比较了乙烯与降冰片烯单体在共聚反应各阶段的差异之处。在此基础上, 对共聚反应自由能变化进行计算, 合理地解释了此系列催化剂引发乙烯与降冰片烯共聚反应活性远大于催化单体均聚反应活性的原因。

参考文献:

1. S. Q. Niu, M. B. Hall, *Chem. Rev.* **2000**, *100*, 353–405.
2. C. J. Cramer, D. G. Truhlar, *Physical Chemistry Chemical Physics* **2009**, *11*, 10757-10816.

个人简历



姓名: 王永霞

职称: 助理研究员

单位: 长春应化所

办公电话: 0431-85262881

E-mail: yxwang@ciac.jl.cn

主要研究: 领域过渡金属催化烯烃聚合反应机理的理论计算研究; 小分子自由基反应机理及动力学性质的研究。

王永霞, 博士, 助理研究员。1977.10, 生于山西长治。1997.09-2001.06, 吉林大学化学系, 学士学位; 2004.09-2009.12, 吉林大学理论化学研究所, 博士学位; 2010.05-2012.10, 中科院长春应化所, 博士后; 2010.10-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。

喹啉胺稀土配合物的合成及催化聚合性质的研究

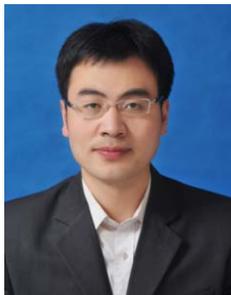
刘东涛, 崔冬梅

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

通过催化剂的设计来调控聚合产物的微观结构, 进而实现对聚合物性能的调控, 已经成为高分子合成领域最重要的目标之一。非茂类配体具有种类多, 电子效应和空间效应易于调节等优点, 引起人们越来越广泛的研究兴趣。本文从新型非茂稀土配合物合成角度出发, 研究了苯乙烯、丁二烯以及异戊二烯高活性高选择性聚合反应。选题具有重要的理论意义和潜在的实际应用价值。

该论文合成了一系列具有不同空间效应的喹啉胺稀土配合物, 其中喹啉胺基钪配合物在助催化剂的活化下可以高活性催化苯乙烯间规聚合。通过配合物与有机硼盐的克分子反应分离得到该聚合反应活性种中间体, 经核磁共振和 X-射线衍射单晶分析表明其结构为喹啉胺基钪的单烷基阳离子, 这是首例非茂基稀土配合物实现对苯乙烯的间规聚合。喹啉胺基钪配合物不但可以催化丁二烯的高反-1,4 聚合, 而且还能实现对丁二烯和异戊二烯的反-1,4 共聚合。通过 Fineman-Ross 方法得到了该共聚反应丁二烯的竞聚率 $r_1 = 1.11$, 异戊二烯单体的竞聚率 $r_2 = 0.44$ 。采用核磁跟踪的方法分别将钪的配合物与三甲基铝和有机硼盐反应对该聚合反应活性种进行了研究。这是首例实现对丁二烯和异戊二烯反-1,4 共聚合的稀土配位聚合催化体系。研究工作丰富了稀土金属有机化学, 对催化剂设计和聚合机理研究具有指导意义。

个人简历



姓名: 刘东涛

职称: 助理研究员

单位: 中国科学院长春应用化学研究所

办公电话: 0431-85262774

E-mail: liudt@ciac.jl.cn

主要研究领域:

刘东涛,男,1981年出生于河北省河间市。2006年毕业于河北大学化学与环境科学学院,同年考取中国科学院长春应化所高分子化学与物理专业研究生,并取得硕博连读资格,主修高分子合成化学,导师是崔冬梅研究员。在攻读博士学位期间一直从事稀土金属有机配合物的合成及催化苯乙烯和共轭双烯烃高选择性聚合的研究,其中开发的新型稀土催化剂实现了共轭双烯烃在工业介质(己烷等)中的高活性高顺-1,4选择性聚合,目前该成果已进入到中试阶段。由于表现优异,多次获得“中科院优秀学生干部”,“中科院三好学生”,“优秀共产党员”等称号。2011年毕业并获得理学博士学位,之后留在高分子物理与化学国家重点实验室崔冬梅研究员课题组工作,目前主要从事共轭双烯烃高选择性聚合稀土催化剂的开发等研究工作。

软两面神粒子聚集结构调控的计算机模拟研究

李占伟, 孙昭艳, 安立佳

中科院长春应化所 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春市人民大街 5625 号, 邮编 130022

非中心对称胶体粒子的实现为人们获得具有特殊应用功能的纳米结构提供了一类非常重要的构筑单元^[1,2]。由于具有非常独特的非中心对称性和结构聚集行为, 两面神胶体粒子在材料科学领域已经得到了人们的广泛关注^[3-7]。两面神粒子可以简单地分为硬两面神粒子和软两面神粒子。与硬两面神粒子不同, 软两面神粒子能够发生部分形变和重叠。软两面神粒子主要包括: 两面神胶束 (Janus micelles)^[3,8]、两面神凝胶微粒 (Janus microgels)^[9]以及两面神树枝状聚合物 (Janus dendrimers)^[10]等。由于具有更加独特的化学和物理性质, 软两面神粒子能够聚集形成一些利用硬两面神粒子无法获得的新颖纳米结构。软两面神粒子及其聚集结构在纳米及生物技术领域都具有很大的潜在应用价值。然而, 目前关于软两面神粒子结构聚集行为的研究较少, 人们对软两面神粒子结构聚集行为的本质以及聚集过程的动力学控制机制仍不是十分清楚。同时, 由于软两面神粒子结构及物理性质的复杂性, 发展合适的计算机模拟方法, 研究其结构聚集行为及本质是一项非常具有挑战性的工作。

我们首先建立了一种能够反映软两面神粒子软形变及非中心对称特性的介观模拟模型及合适的模拟方法。在我们的模型中, 模拟参数可以通过实验测量来确定, 所以该模型能够直接对应具有不同环境条件的实验体系。利用该模拟模型, 我们研究了软两面神粒子在稀溶液中的自组装行为。软两面神粒子的吸引强度和吸引区域比例共同作用形成了双螺旋、单螺旋以及四方双层膜等新颖的自组装结构。我们进一步给出了描述软两面神粒子吸引强度和吸引区域比例之间关系的相图。

此外, 我们对软两面神粒子模拟模型进行了扩展, 建立了能够反映软三嵌段两面神粒子之间相互作用本质的介观模拟模型, 研究了软三嵌段两面神粒子在本体中的有序堆砌行为。通过合理调控软三嵌段两面神粒子吸引区域比例和两面神粒子聚集体的弹性, 我们模拟得到了有序的六方柱状及体心四方结构。因此, 我们的研究表明具有软形变和非中心对称特性的软两面神粒子为人们获得各种新颖的功能纳米结构提供了更丰富的构筑单元。我们提出的介观模拟策略可以有效地模拟研究软的非中心对称粒子体系的结构聚集行为, 同时为设计和制备各种新颖而复杂的纳米结构提供可靠的理论帮助。

参考文献:

1. S. C. Glotzer, *Science* **2004**, *306*, 419.
2. S. C. Glotzer, M. J. Solomon, *Nature Mater.* **2007**, *6*, 557.
3. A. Walther, A. H. E. Müller, *Soft Matter* **2008**, *4*, 663.
4. J. Du, R. K. O'Reilly, *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 2402.

5. Q. Chen, J. K. Whitmer, S. Jiang, S. C. Bae, E. Luijten, S. Granick, *Science* **2011**, *331*, 199.
6. Q. Chen, S. C. Bae, S. Granick, *Nature* **2011**, *469*, 381.
7. F. Romano, F. Sciortino, *Nature Mater.* **2011**, *10*, 171.
8. R. Erhardt et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 3260.
9. M. Bradley, J. Rowe, *Soft Matter* **2009**, *5*, 3114.
10. V. Percec et al., *Science* **2010**, *328*, 1009.

个人简历



姓名: 李占伟

职称: 助理研究员

单位: 中科院长春应用化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室

办公电话: 0431-85262896

E-mail: zwli@ciac.jl.cn

主要研究领域: 高分子物理; 计算机模拟。

李占伟, 男, 1982年9月生, 2010年6月于吉林大学理论化学计算国家重点实验室获得博士学位, 导师吕中元教授, 主要从事软物质体系复杂相行为的多尺度模拟研究。2010年7月至2012年7月于中国科学院长春应用化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室从事博士后研究, 合作导师安立佳研究员和孙昭艳研究员, 主要从事非中心对称胶体粒子聚集结构调控的计算机模拟研究。2012年7月留所工作, 任助理研究员。迄今为止, 在 *Soft Matter*、*J. Phys. Chem. B* 等国际国内著名期刊上发表多篇学术论文, 获得国家自然科学基金、中国博士后科学基金以及中国科学院王宽诚博士后工作奖励基金资助。2012年9月获得“吉林省优秀博士后研究人员”称号。

附：

具有博士学位的副研、助研人员名单(按课题组顺序)

	姓名	职务	所属组	人员介绍
1.	陈继忠	副研	安立佳组	2001.06, 吉林师范大学物理专业, 理学学士学位; 2006.06, 吉林大学物理学院凝聚态物理专业, 理学博士学位; 2006.07-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员、副研究员。
2.	李宏飞	副研	安立佳组	1998.07, 吉林大学化学系, 学士学位; 2007.06, 中科院长春应化所, 博士学位; 其中 2005.10-2005.12, 德国 Freiburg 大学物理系访问研究。1998.07-2004.06, 中科院长春应化所, 研究实习员; 2004.07-2009.11, 中科院长春应化所, 助理研究员; 2009.12-至今, 中科院长春应化所, 副研究员; 。
3.	李世辉	副研	崔冬梅组	1998.9-2002.7, 吉林大学材料学院, 学士学位; 2002.9-2005.7, 吉林大学材料学院, 工学硕士; 2005.9-2009.1, 中科院长春应用化学研究所, 理学博士; 2009.3-2009.7 中科院长春应化所, 助理研究员; 2009.8-2011.7, 日本理化学研究所, 博士后; 2011.8-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
4.	许东华	副研	石彤非组	2001.07, 湖北大学化学学院, 学士学位; 2004.07, 武汉大学化学学院, 硕士学位; 2007.07, 中科院化学研究所, 博士学位; 2007.11-2008.8, 德国高分子研究所, 博士后; 2008.10-2011.4, 美国杜克大学化学系, 博士后; 2011.07-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
5.	田洪坤	副研	耿延候组	1999.7, 黑龙江化学系, 学士学位; 2005.12, 中科院长春应化所, 博士学位; 2006.3, 中科院长春应化所, 助理研究员; 2008.9-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
6.	张效洁	副研	耿延候组	2002.07, 上海复旦大学化学系, 学士学位; 2007.12, 中科院长春应化所, 博士学位; 2010.07-2010.08, 新加坡国立大学化学系, 博士后; 2010.09-2011.12, 德国马普高分子研究所, 博士后; 2011.12-至今, 中科院长春应化所, 副研究员 研究兴趣: C-H 活化交叉偶联反应及其在共轭高分子合成中的应用; 有机小分子受体材料的设计、合成及其在有机太阳能电池器件中的应用
7.	王汉夫	副研	韩艳春组	1998.07, 四川大学材料化学专业, 学士学位; 2003.12, 吉林大学化学学院, 博士学位; 2004.04-2006.05, 长春应化所高分子物理与化学国家重点实验室, 博士后; 2007.09-2008.10, 法国国家科学研究院(CNRS)波尔多第一大学化学与有机聚合物实验室(LCPO), 博士后; 2006.09-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。2004 年获中科院王宽诚博士后工作奖励基金。

	姓名	职务	所属组	人员介绍
8.	于新红	副研	韩艳春组	1998.09-2002.07, 湖南大学化学系, 学士学位; 2008.07, 中科院长春应化所, 理学博士学位; 2008.07-2011.11, 中科院长春应化所, 助理研究员; 2011.12-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
9.	黄海瑛	副研	何天白组	1999.07, 吉林大学化学系基地班, 学士学位; 2005.01, 中科院长春应化所, 博士学位; 2005.03-2006.03, 比利时鲁汶大学化学系, 博士后; 2006.04-2006.12, 中科院长春应化所, 项目助理研究员; 2007.01-2010.05, 韩国浦项科技大学化学系, 博士后; 2010.05-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
10.	刘勇刚	副研	姬相玲组	1998.07, 武汉大学化学学院, 学士学位; 2003.12, 中科院长春应化所, 博士学位; 2004.01-2004.08, 中科院长春应化所, 研究助理; 2004.09-2005.08, 德国高分子研究所, 博士后; 2005.09-2009.04, 以色列魏茨曼科学研究所, 博士后; 2009.06-2011.08, 德国马普胶体与界面研究所, 博士后; 2011.09-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
11.	朱雨田	副研	姜伟组	1997.09-2001.07, 南昌大学化学系, 理学学士学位; 2001.09-2006.07, 中科院长春应化所, 理学博士学位; 2006.10-2008.09, 比利时天主教鲁汶大学化工系, 博士后; 2008.11-2010.10, 美国孟菲斯大学化学系, 博士后; 2010.10-今, 中科院长春应化所, 副研究员。
12.	刘靖宇	副研	李悦生组	2005, 中科院长春应化所, 理学博士学位。2005, 获得日本学术振兴会 JSPS 博士后研究奖学金; 2008.7-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
13.	陈江山	副研	马东阁组	1997.09-2001.07, 湖南大学化学化工学院, 学士学位; 2001.09-2006.07, 中科院长春应化所, 博士学位; 2006.08-2008.12, 德国马普所胶体和界面研究所, 博士后; 2008.12-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。2006 年获中科院宝洁优秀博士研究生奖, 2006 年获德国洪堡奖学金。
14.	马晓晶	副研	苏朝晖组	2001.07, 吉林化工学院精细化工系, 学士学位; 2004.04, 哈尔滨工程大学化学工程系, 硕士学位; 2008.07, 国家纳米科学中心物理化学专业, 博士学位。随后在丹麦奥尔胡斯大学多学科交叉纳米中心做博士后研究工作。2010.09, 中国科学院长春应化所, 副研究员。2008 年获中科院宝洁奖学金, 中科院优秀博士毕业生。
15.	丁军桥	副研	王利祥组	1995.9-1999.6, 武汉理工大学, 学士学位; 2001.9-2007.6, 中科院长春应化所, 博士学位; 2007.7-2009.11, 中科院长春应化所, 助理研究员; 2010.3-2011.5, 美国新墨西哥大学, 博士后; 2009.12-至今, 中科院长春应化所, 副研究员
16.	童辉	副研	王利祥组	1997, 北京大学化学系, 学士学位; 2003, 中科院长春应用化学研究所, 博士学位; 2003-2006, 香港科技大学化学系; 2006-2008, 瑞典 Uppsala 大学, 博士后; 2008.0, 回国。2008.08, 中科院长春应化所, 副研究员。

	姓名	职务	所属组	人员介绍
17.	林园	副研	王倩组	1999.09-2003.07, 吉林大学材料科学与工程学院, 学士学位; 2003.09-2008.07, 吉林大学材料科学与工程学院, 博士学位; 2006.11-2007.09, 美国雷格斯大学, 国际交换学生; 2008.09-2010.9, 美国南卡罗莱纳大学化学与生物化学系, 博士后; 2010.9-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
18.	乔文强	副研	王植源组	1995.08-1999.07, 西北工业大学化学工程系, 学士学位; 1999.09-2002.04, 西北工业大学理学院, 硕士学位; 2001.09-2005.09, 西北工业大学理学院, 博士学位; 2005.10-2007.11, 北京大学化学与分子工程学院, 博士后; 2008.01-2008.12, 加拿大卡尔顿大学化学系, 博士后; 2007.12-2010.11, 哈尔滨工业大学材料学院, 讲师; 2010.12-2012.05, 哈尔滨工业大学材料学院, 副教授; 2012.06-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
19.	王海波	副研	闫东航组	2001年毕业于吉林大学物理系, 2006年在长春应用化学研究所获得博士学位, 专业是高分子化学与物理。
20.	栾世方	副研	殷敬华组	1996.09-2000.07, 四川大学, 学士学位; 2000.09-2003.07, 四川大学, 硕士学位; 2003.09-2007.03, 中科院应化所, 博士学位; 2007.04-2009.04, 威海海外学人创业园, 博士后; 2009.05-2009.12, 中科院长春应化所, 助理研究员; 2010.01-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
21.	石强	副研	殷敬华组	1995,08 -1999,08,吉林大学材料科学与工程系,学士学位; 1999,09-2002,07,吉林大学材料科学与工程系,硕士学位; 2002,09-2006,07,中国科学院长春应用化学研究所,博士学位, 2005,10 -2006,04,意大利 CNR 热那亚天然和合成大分子化学与物理研究所,合作研究; 2008,08-至今, 中科院长春应化所,副研究员; 2009,04-2010,04 美国阿克隆(Akron)大学,访问学者, 2009年获国家科技进步二等奖。
22.	高瑛	副研	仪器平台	1995.09-1999.07, 长春工业大学化学工程系, 学士学位; 1999.09-2004.07, 中科院长春应化所, 博士学位; 2004.08-2006.12, 华东理工大学, 博士后; 2006.12-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。
23.	赖宇晴	副研	仪器平台	1995年,东南大学物理系应用物理专业,学士学位; 1995-1997, 中国工程物理研究院电子工程研究所工作; 1997-2000.0, 电子科技大学高能电子学研究所物理电子学工学, 硕士学位; 同年年底, 开始在德国 Freiburg 大学微系统技术研究所工作; 2001.03-2005.03, 微系统技术专业工学, 博士学位(Dr. Ing.); 2005.9, 中科院长春应化所, 技术副研究员。
24.	张吉东	副研	仪器平台	1994.09-1998.07, 吉林大学化学系, 学士学位; 1998.09-2003.12, 中科院长春应化所, 博士学位; 2004.03-2005.12, 加拿大 Carleton 大学化学系, 博士后; 2005.12-至今, 中科院长春应化所, 副研究员。

	姓名	职务	所属组	人员介绍
25.	付翠柳	助研	安立佳组	2000.09-2004.07, 吉林大学化学学院, 学士学位; 2004.09-2010.03, 中科院长春应化所, 博士学位; 2010.04-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
26.	李占伟	助研	安立佳组	2001.09-2005.07, 辽宁师范大学化学化工学院, 学士学位; 2005.09-2010.07, 吉林大学理论化学研究所, 博士学位; 2010.07-2012.07, 长春应化所, 博士后; 2012.07-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。2007年获中国石油奖学金, 2011年获中国科学院王宽诚博士后工作奖励基金。
27.	李 晓	助研	程延祥组	2001.09-2005.07, 吉林大学化学学院, 学士学位; 2005.09-2010.07, 吉林大学化学学院, 博士学位; 2010.07-至今, 中科院长春应化所, , 助理研究员。
28.	李 慧	助研	程延祥组	2006.07, 东北师范大学化学学院, 理学学士; 2011.12, 中科院长春应化所, 理学博士; 2012.02-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
29.	战宏梅	助研	程延祥组	2000.09-2004.06, 兰州大学化学化工学院, 学士学位; 2004.09-2007.06, 中科院成都有机所, 硕士学位; 2008.03-2011.05, 香港浸会大学化学系, 博士学位, 期间在美国加州大学圣芭芭拉分校, 交换生; 2012.5 -至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
30.	刘 波	助研	崔冬梅组	2000.09-2004.07 东北林业大学理学院, , 学士学位; 2004.09-2010.01 中国科学院长春应用化学研究所, , 博士学位; 2010.05 至今 中科院长春应化所, 助理研究员
31.	吴春姬	助研	崔冬梅组	2003, 延边大学, 有机化学硕士; 2008, 韩国亚洲大学材料化学博士; 2009-2010, 韩国庆北大学, 博士后; 2011.01-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
32.	刘东涛	助研	崔冬梅组	2006.06, 河北大学化学与环境科学学院, 学士学位; 2011.11, 中科院长春应化所, 博士学位; 2012.02-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
33.	史新翠	助研	耿延候组	2002.09-2006.07, 泰山学院化学学院, 理学学士; 2006.09-2012.01, 中科院长春应化所, 理学博士; 2012.02-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
34.	刘剑刚	助研	韩艳春组	2002.09-2006.06, 吉林大学化学学院, 学士学位; 2006.09-2011.07, 中科院长春应化所, 博士学位; 2011.07-至今, 中科院长春应化所, , 助理研究员。
35.	邢汝博	助研	韩艳春组	1997-2001, 石油大学(华东)化学化工学院, 学士学位; 2001-2004年, 中科院长春应化所, 研究实习员; 2004-2009, 中科院长春应化所, 理学博士学位; 2009-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
36.	毛 骏	助研	姬相玲组	2004, 武汉大学化学与分子科学学院, 理学学士学位; 2011.07, 中科院长春应化所, 理学博士学位; 2011.08-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。

	姓 名	职 务	所属组	人员介绍
37.	崔 杰	助研	姜伟组	2001.07, 东北师范大学物理学院, 理学学士学位; 2001.07, 东北师范大学物理学院, 理学硕士学位; 2004.08-2007.08, 中科院长春应化所, 研究实习员; 2011.01, 中科院长春应化所, 理学博士学位; 2011.02-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
38.	韩媛媛	助研	姜伟组	1999.9-2003.7, 东北师范大学物理学院, 学士学位; 2003.9-2006.7, 东北师范大学物理学院, 硕士学位; 2006.9-2010.1, 中科院长春应化所, 博士学位; 2010.1至今, 中科院长春应化所, 助理研究员
39.	赵桂艳	助研	姜伟组	1998-2002.07, 辽宁大学化学科学与工程学院应用化学专业, 理学学士学位; 2002.09-2008.01, 中科院长春应化所, 高分子化学与物理专业, 硕博连读, 理学博士学位; 2008.01-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
40.	胡秀丽	助研	景遐斌组	2000.09-2004.07 吉林大学材料学院, , 学士学位; 2004.09-2009.07 中科院长春应化所, , 博士学位; 2009.07-至今, 中科院长春应化所, , 助理研究员。
41.	王永霞	助研	李悦生组	1997.09-2001.06, 吉林大学化学系, 学士学位; 2004.09-2009.12, 吉林大学理论化学研究所, 博士学位; 2010.05-2012.10, 中科院长春应化所, 博士后; 2012.10-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
42.	黄金英	助研	马东阁组	1994-1998, 内蒙古师范大学物理系, 理学学士学位; 1998-2000, 内蒙古赤峰市乌丹三中执教。2000-2006, 长春光学精密机械与物理研究所, 凝聚态物理专业, 博士学位; 2006, 中科院长春应化所, 博士后; 2009.3-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
43.	姜志勇	助研	门永锋组	2000.09-2004.06 湘潭大学; 2004.09-2009.06, 中科院长春应化所; 2009.07-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
44.	刘凌志	助研	门永锋组	2004.07, 毕业于吉林大学化学学院; 2009.07, 吉林大学化学学院, 理学博士学位; 2009.07-2011.07, 中科院长春应化所, 博士后; 2011.07-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
45.	张志杰	助研	门永锋组	2001, 毕业于吉林大学化学系。2008 年于吉林大学理论化学研究所获博士学位。2005-2008 年作为联合培养博士研究生在中科院长春应化所高分子物理与化学国家重点实验室学习。2008.07, 中科院长春应化所, 任助理研究员。
46.	刘 杰	助研	唐涛组	1998.09-2002.07, 内蒙古民族大学化学系, 理学学士学位; 2002.09-2007.07, 吉林大学化学学院物理化学专业, 理学博士学位; 2007.07-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
47.	马 丽	助研	唐涛组	1995-1999 年, 天津大学化工学院精细化工专业, 学士学位(同时获天津大学管理学院技术经济专业双学士学位); 1999—2002, 在中科院长春应化所高分子工程实验室任研习员; 2002—2007, 中科院长春应化所, 有机化学博士学位; 2008 年-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。

	姓名	职务	所属组	人员介绍
48.	闻新	助研	唐涛组	2001.09-2005.07, 吉林大学化学学院, 学士学位; 2005.09-2010.06, 中科院长春应化所, 博士学位; 2010.7-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
49.	吴晓甫	助研	王利祥组	2000.09-2004.07, 黑龙江大学化学化工与材料学院, 学士学位; 2004.09-2007.07, 黑龙江大学化学化工与材料学院, 硕士学位; 2007.08-2011.1, 中科院长春应化所, 博士学位; 2011.1-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
50.	邵世洋	助研	王利祥组	2002.09-2006.06, 武汉大学化学与分子科学学院, 学士学位; 2006.09-2011.11, 中科院长春应用化学研究所, 博士学位; 2011.12-至今, 中科院长春应用化学研究所, 助理研究员。2012年获中科院院长优秀奖。
51.	张保华	助研	谢志元组	1982.05 生于湖北宜昌。2001.09-2005.07, 武汉理工大学材料学院, 学士学位; 2005.09-2010.07, 中科院长春应化所, 博士学位; 2010.07-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
52.	王彤	助研	闫东航组	1998.09-2002.07, 湖南大学材料科学与工程学院, 学士学位; 2002.07-2005.08, 中科院长春应化所, 研究实习员; 2005.09-2010.6, 中科院长春应化所, 博士学位; 2010.7-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
53.	于波	助研	闫东航组	2001.09-2005.07, 哈尔滨工业大学理学院应用化学系, 学士学位; 2005.09-2010.07, 中科院长春应化所, 博士学位; 2010.08-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
54.	石恒冲	助研	殷敬华组	2004.07, 东北林业大学理学院化学系, 理学学士学位; 2007.07, 东北林业大学理学院, 理学硕士学位; 2011.01, 中科院长春应化所, 理学博士学位; 2011.03-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
55.	龙映云	助研	仪器平台	2005, 海南师范大学化学与化工学院; 2010, 中科院长春应化所, 博士学位; 2011.06-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。
56.	彭波	助研	仪器平台	2002, 华中理工大学汉口分校; 2002-2005, 中科院长春应化所, 研究实习员; 2010, 中科院长春应化所, 博士学位; 2011.06-至今, 中科院长春应化所, 助理研究员。

记录页

记录页

记录页

记录页
