

中国化学会第九届 全国热分析动力学与热动力学 学术会议摘要集

主办：中国化学会化学热力学与热分析专业委员会

山东化学化工学会

承办：烟台大学

2025年 8月 18日-20日 山东·烟台

目录

研究纳米银立方体表面热力学性质的新方法.....	1
生物可降解热固性树脂：从塑料到弹性体的调控.....	2
镧系芳香杂环配合物的构筑、晶体结构、热分解反应动力学及荧光性能研究.....	3
基于离子液体协同效应的木质素模型化合物催化转化制备苯甲醛的选择性调控与反应机理研究.....	4
基于对甲氧基苯甲酸构成的新型镧系配合物：晶体结构、热行为和发光性质.....	5
基于 4-甲基苯甲酸和 5,5'-二甲基-2,2'-联吡啶配体的六种新型镧系配合物的合成与表征.....	6
双硼酸型与季铵盐型表面活性剂共组装的胶束型糖识别传感器.....	7
氢气在循环溶剂中的溶解和在催化剂上的迁移行为.....	8
食品胶体的热力学和动力学研究.....	9
疏水改性葡聚糖基单分子胶束的糖苷键原位酶促水解.....	10
Contact electrification and therapy.....	11
DFDNTN/TNAZ 低共熔物的制备及其热分析测试.....	12
矿物药赭石热解特性分析及物相成分鉴定.....	13
离子多糖与蛋清蛋白的相互作用差异影响其热凝胶行为的机制研究.....	14
Study on the interaction mechanism between HBT and HSA.....	15
Study on the interaction mechanism between metal-organic frameworks and HSA.....	16
FeCuCoMnPt Nanozyme with POD activity for synergistic photothermal antibacterial therapy...17	
Inhalable nanoaerosols treat bacterial pneumonia by activating HSP70 to reprogram macrophages.....	18
碳基纳米氧化铁对含能材料的热分解研究.....	19
水热合成钛酸钠过程的微量热研究.....	20
Microcalorimetric investigation of the concentration-induced phase transition behaviors of P123/water system.....	21
高效锂吸附材料的精准构建及其锂吸/脱附性能量热学研究.....	22
废离子交换树脂定温热分解实验及 ReaxFF 模拟研究.....	23
Dynamic properties of methanol confinement in OMC and Ph-PMO pores investigated by QENS.....	24
基于晶格-表面分级氢键策略提升 HNIW 的热稳定性研究.....	25

生物基复合纳米纤维的热分析动力学研究与 Ai 运用设想	26
离子液体对天然丝蛋白的溶解性研究	27
基于去卷积的多步反应动力学求解方法	28
含锂钠沉锂母液体系热力学性质研究	29
钴镍双金属配合物的构建及其催化高氯酸铵热分解性能	30
Isothermal thermal decomposition and mechanism of CL-20/TNT cocrystal energetic materials	31
Phase equilibria and phase diagrams for the aqueous salt system of calcium-containing Fly Ash water washing	32
Epitaxy-mediated transformation to ice VI and XII from unreported ices	33
Thermodynamic insights into the synergistic inhibition of theaflavin and caffeic acid on the formation of AGEs	34
新型季铵盐双硼酸作为 pH 响应性糖类受体的热力学研究	35
多官能度端羟基三氟烷氧基聚合物的合成及其固化性能研究	36
Investigation of volumetric properties and ion-interaction parameters in the ternary system (NaNO ₃ + CsNO ₃ + H ₂ O) and its sub-systems at different temperatures	37
五元体系 Li ⁺ , Na ⁺ //Cl ⁻ , SO ₄ ²⁻ , HCO ₃ ⁻ —CO ₂ —H ₂ O 相平衡研究	38
含能材料熔体结晶动力学	39
含碳酸铯卤水体系热力学性质的等压法研究	40
碳酸铯溶液多温体积性质研究	41
含铯碳酸盐卤水体系热力学性质的量热法研究	42
硼酸结晶动力学研究	43
纳米燃烧催化剂对 CL-20 热分解性能影响	44
rGO as a photosensitizer to enhance the laser initiation performance of energetic complexes	45
双金属配合物的制备及其催化高氯酸铵热分解性能研究	46
不同粒度六硝基六氮杂异伍兹烷热解规律和热解机理	47
聚对苯二胺安定剂的合成以及对硝化棉的热安定性能研究	48
金属基微波点火药剂的开发及其微波点火燃烧性能研究	49
恒温环境滴定量热仪的研制	50
胆碱基氯化钙/镁水合盐 DES 的结构与传输性质	51
基于电子结构调控的镍锰氧化物电催化剂用于高效 HMF 氧化: 电化学热力学机制研究	52
自组装体相变机理研究与结构表征新方法	53
正温度系数对液体合体表面张力的影响	54

晶格缺陷诱导深共晶溶剂渗透与溶解纤维素晶体：分子热力学-动力学耦合框架研究.....	55
Crystallization of Ice Ic from Ice XVII.....	56
纳米载体跨生物膜输运界面热力学及动力学多尺度分子模拟研究.....	57
蒽烯基碳氢燃料的燃烧性能与燃烧初期路径研究.....	58
水/碳氢燃料乳液凝胶的形成机制与性能研究.....	59
Effect of fluorinated polyether grafting ratio on dual curing of GAP.....	60
BODIPY 荧光探针检测次氯酸的动力学研究.....	61
木质素还原酸解制备芳烃化合物及产物的核磁表征.....	62
离子液体参与构筑的微乳液体系相行为调控及其对 CO ₂ 的可逆捕集.....	63
植物活性物共晶的氢键作用及溶液性质研究.....	64
Effects of (M ⁺ = Li ⁺ , Na ⁺ , K ⁺ , NH ₄ ⁺) on the Ti ₃ C ₂ -MXene as counter electrode for triiodide reduction in dye-sensitized solar cells.....	65
咪唑离子液体对电化学 CO ₂ 还原为合成气的调控作用.....	66
含氮小分子高值转化与低能耗电化学制备技术.....	67
分布式流动热量计用于测量燃料临界参数、等压比热容.....	68
六价碲增强氧化物电极表面电解液稳定性的研究.....	69
基于膨胀石墨表面及层间调控活化过硫酸盐降解有机污染物机制研究.....	70
Mechanisms of Li/Mg selective separation and membrane interface effects in electric field-assisted nanofiltration.....	71
基于石墨纳米片构建三维多孔碳材料及其储热应用研究.....	72
熔盐辅助改性烟煤基衍生碳材料的储钠性能.....	73
智能手机辅助多酸基类过氧化物酶比色检测食品中的过氧化氢和抗坏血酸.....	74
面向主动热防护的高分散吸热型燃料新体系研究.....	75
嵌段共聚物作为碳氢燃料清净分散剂的研究.....	76
Study of antibacterial activity of high-entropy oxides containing Fe, Mn, Al, Ce, and La.....	77
The antioxidant mechanism of Prussian blue nanoenzymes: A new strategy for treating kidney damage.....	78
在层状双氢氧化物中构建高熵和异质结工程用于提高电解水反应性能.....	79
低熔混剂.....	80
基于热可逆粘结剂的 RDX/Al 基复合含能材料制备与性能调控研究.....	81
多孔框架对 NH ₃ 的高效捕集与分离.....	82
基于静电喷雾技术的 F2603/DNTF/Al 复合材料：热稳定性与燃烧性能研究.....	83

二维材料在离子液体中的液相剥离.....	84
离子液体分离共沸物的相平衡和机理研究.....	85
A flexible hydrated salts phase change film for efficient thermal dissipation of electronic devices	86
Breaking stereotypes: Continuous direct lithium extraction from seawater via an unconventional selective solid electrolyte	87
单分子石墨烯量子点光动力抗肿瘤应用	88
盐湖铷铯资源辨识吸附分离.....	89
Selective and efficient adsorption of H_3BO_3 from Salt Lake brine solution by ZIF-67-derived hollow cobalt sulfide.....	90
NiCoFe-BLDH/ Ni_3S_2 - $Fe_5Ni_4S_8$ /NFF 复合材料的制备及其电催化分解水性能	91
手性大环膜的构筑及其用于高效对映体选择性分离研究.....	92
有机聚苯胺网状包覆氧化铟实现高效制氢性能的研究.....	93
Fe/Zn dual-sites modulated $MoS_2@NC$: Unlocking efficient bifunctional oxygen electrocatalysis	94
离子液体膜分离气体的作用机理及分子设计.....	95
离子水合层演化及相互作用机制.....	96
本征柔性固-固相变材料用于人体智能热管理.....	97
绝热量热法研究相变建筑材料热力学性质.....	98
新型二茂铁基三元配合物的合成与固体推进剂燃速催化性能研究	99
镁基储氢材料对 CL-20 热分解催化性能的影响	100
构筑纳米钼钨多相界面碳化物电催化剂及其析氢性能.....	101
绿色溶剂中功能化离子液体催化醇的转化研究.....	102
柔性固-固相变膜用于人体止血热损伤	103
新型膨胀石墨基三维互联多孔网络结构用于构建多功能相变复合材料, 增强热导率和能量转 换性能	104
大语言模型辅助科学研究: 催化剂预测分析案例.....	105
基于双模态对比学习实现精准且可解释分析性质预测: 从分子热力学到药物 pK_a 性质研究	106
新型膨胀石墨基三维互联多孔网络结构用于构建多功能相变复合材料, 增强热导率和能量转 换性能	107
含氟聚醚接枝率对 GAP 双固化的影响.....	108
相变材料的热分析动力学研究.....	109

Single-atom Ru-doped nickel sulfide nanostructures achieve superior water splitting performance via reconstruction and adsorption optimization	110
凝胶推进剂蒸发与燃烧特性实验研究.....	111
离子液体 HMIMOAC 消除异丙醇-乙酸异丙酯二元体系共沸的相互作用机理研究	112
牛奶蛋白复合物分子设计及应用研究.....	113
双(间苄基铵)硼酸作为单糖识别溶至酸性受体的研究	114

研究纳米银立方体表面热力学性质的新方法

付青山^{1,*}, 高红旭¹, 肖立柏¹, 张洋¹, 薛永强^{2,*}, 赵凤起¹

¹ 西安近代化学研究所 含能材料全国重点实验室, 陕西西安, 710065

² 太原理工大学 化学学院, 山西太原, 030024

*Email: hnxyfqs@163.com, xyqlw@126.com

纳米材料的表面热力学性质对其在催化燃烧等不同物理化学过程中的热力学行为具有重大影响。针对银纳米立方体因其高比表面积和特殊的表面活性位点等特点而在固体推进剂燃烧性能调控中的重要作用, 本文提出了通过电化学方法得到银纳米材料的表面热力学性质, 即首先通过电极反应计算得到电化学(表面)热力学参数, 然后结合偏摩尔表面热力学性质与相应摩尔表面热力学性质的数值关系, 得到纳米材料的表面热力学性质^[1,2]。通过测定由不同粒径银纳米立方体组成的纳米电极在不同温度下的电极电势, 通过上述方法获得银纳米立方体的表面热力学性质(见图1)并与理论预测结果进行了对比^[3]。结果表明: 随着粒度的减小, 银纳米立方体的表面热力学性质增大, 并与粒径的倒数呈线性关系, 且粒度越小, 粒度的影响越显著。通过本文的研究能够为深入理解纳米材料表面热力学的粒度效应以及调控相关固体推进剂的燃烧性能提供重要支撑。

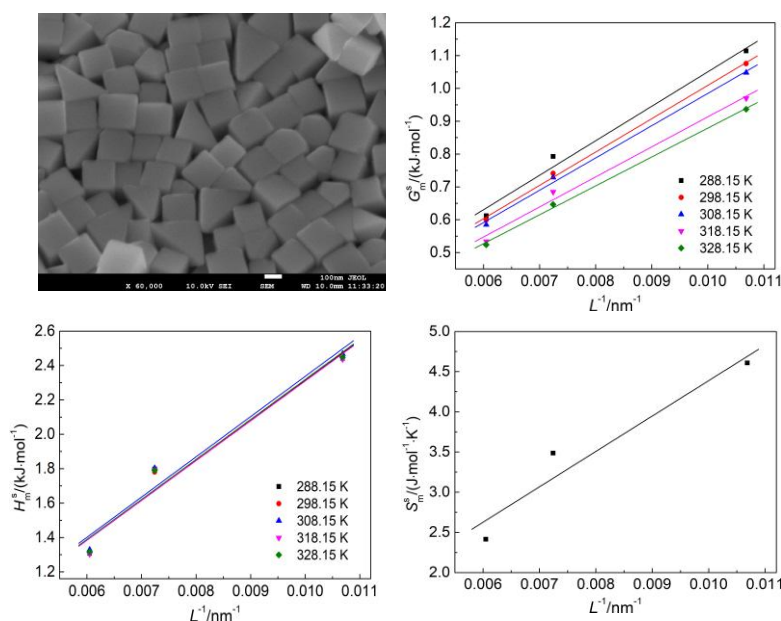


图1 银纳米立方体的表面热力学性质与粒径倒数的关系

关键词: 纳米材料; 粒度; 立方体; 表面热力学; 固体推进剂

参考文献

- [1] Zhang J.; Li Z.; Fu Q.; Xue Y. *J. Electrochem Soc.*, 2017, **164**: H828.
- [2] Fu Q.; Gao H.; Xue Y.; Zhao F. *J. Phys. Chem. Solids*, 2020, **146**: 109617.
- [3] Chen Z.; Duan H.; Zhao J.; Xue Y. *New. J. Chem.*, 2025, **49**: 3688-3695.

生物可降解热固性树脂：从塑料到弹性体的调控

宋璟¹，完颜倩茹¹，仇亚昕²，吴德峰^{1,*}

¹扬州大学化学化工学院，扬州市四望亭路 180 号，225002

²扬州大学环境科学与工程学院，扬州市华扬西路 196 号，225003

*Email: dfwu@yzu.edu.cn

交联为天然多酸开辟了作为功能材料的可能性。网络结构设计则是决定天然多酸材料力学状态和最终应用的关键。以二醇交联的聚苹果酸材料为例，通过改变脂肪二醇的链长或改变多臂多元醇的臂数，可以设计聚苹果酸中的交联网络结构，从而控制材料最终的转变温度和力学性能^[1-3]。随着脂肪二醇的分子量的增加，材料可从高强度塑料向低损耗橡胶转变，直至成为软弹性体。在相同分子量下，随多元醇臂数增加，趋势相反^[4-5]。交联材料的弹塑性和粘塑性以及介电松弛可以很好的揭示网络结构与力学状态的关系，从而为材料的脆-韧性转变提供更加明确的信息。由此制备的交联天然多酸材料不仅具备可调控的热、力学性能，还可应用在包括驱动、抗菌、信息材料等在内的功能材料领域。

关键词：可生物降解聚酯；交联网络；脆-韧性转变；智能器件

参考文献

- [1] Qiu Y.; Wanyan Q.; Xie W.; Wang Z.; Chen M.; Wu D. *Polymer*, 2019, **180**: 121733.
- [2] Qiu Y.; Wanyan Q.; Zhang W.; Yin S.; Wu D. *J. Mater. Chem. A*, 2020, **8**: 17193-17201.
- [3] Wanyan Q.; Qiu Y.; Xi J.; Yin S.; Zhang W.; Wu D. *ACS Appl. Polym. Mater.*, 2020, **2**: 5889-5897.
- [4] Wanyan Q.; Qiu Y.; Zhang W.; Yu H.; Wu D. *Polymer*, 2021, **221**: 123628.
- [5] Qiu Y.; Munna D.; Wang F.; Xi J.; Wang Z.; Wu D. *Macromolecules*, 2021, **54**: 5694-5704.

铜系芳香杂环配合物的构筑、晶体结构、热分解反应动力学及荧光性能研究

宋子贺¹, 屈孜毅¹, 周若冰¹, 赵金金^{1,*}, 任宁^{2,*}, 张建军^{1,*}

¹河北师范大学分析测试中心, 化学与材料科学学院, 石家庄 050024

²邯郸学院化学工程与材料学院, 河北省杂环化合物重点实验室, 河北省新型无机光电纳米材料研究中心, 邯郸 056005

*E-mail: jjzhang6@126.com

本文采用 2-氯-6-氟苯甲酸、4-氟苯甲酸为酸性配体, 5,5'-二甲基-2,2'-联吡啶为中性配体。通过超声合成和常温溶液挥发两种方法成功合成了 13 种结构新颖的铜系配合物。采用元素分析、红外光谱、拉曼光谱以及 X 射线粉末衍射等手段对配合物进行表征。除此之外, 还测试了热分解过程及部分配合物的荧光性能。

通过单晶 X 射线衍射技术得到配合物 1-13 的晶体结构。研究发现, 配合物 1-8 均是结晶于单斜晶系 $P2_1/n$ 空间群, 根据每个结构单元中所含有的分子种类与数目不同, 从而分成两类结构: 1-6 金属中心具有 8 配位特征, 呈现扭曲四方反棱柱几何构型; 而 7 和 8 金属中心则为 9 配位, 其形成带帽四方反棱柱构型。配合物 9-13 也可基于结构差异分为两类, 13 与 9-12 相比没有水分子进行配位, 而出现游离的小分子, 但都是 8 配位, 呈现扭曲四方反棱柱构型。所有配合物都为双核分子, 且每个的相邻结构单元之间都通过弱氢键连接成链状结构。

采用 TG-DTG/FTIR/MS 联用技术研究了 13 个配合物的热分解过程。结果表明, 配合物在加热过程中首先失去游离的小分子, 随着温度继续升高, 中性配体优先于酸性配体发生解离。通过分析加热过程中逸出气体的三维红外光谱图, 检测到有机小分子碎片的特征峰, 同时, 质谱分析检测到芳香环和含氮配体的特征离子片段, 进一步证实了配体的裂解过程。采用 DSC 技术对配合物 1 和 2 的热容特性进行了系统表征, 并得到热力学函数数值。

采用热重技术对配合物 1 和 6 进行升温。运用 NL-INT 方法和 M.J.Starink 方法, 分别计算了第三步热分解过程中各转化率 (α) 对应的活化能 (E), 判断为简单反应。基于此, 进一步采用本课题组提出的双等双步法确定了反应机理函数, 并成功获得了相关动力学参数和热力学参数。

在常温条件下, 对部分配合物的发光特性进行了系统研究。实验观察到各配合物均展现出铜系离子的特征荧光峰, 通过 CIE 色度图确定了其发光区域分布。进一步测定了配合物的荧光衰减时间。同时, 采用 DFT 计算出部分配体能级。理论分析证实, 某些配体与稀土离子间存在能量传递机制, 这种能量转移过程显著提升了配合物的发光效率。

关键词: 铜系配合物; 晶体结构; 热分解机理; 荧光性质

参考文献

[1] Song Z.; Zhao J.; Ren N.; Zhang J. *J. Mol. Struct.*, 2025, **1321**: 140181

基于离子液体协同效应的木质素模型化合物催化转化制备 苯甲醛的选择性调控与反应机理研究

张庆国*, 张鑫源, 汤欣瑶, 张志旭

渤海大学, 辽宁省锦州市高新区科技路 19 号, 121013

*Email: zhangqingguo@bhu.edu.cn

木质素是一种储量丰富且经济高效的芳香族聚合物, 因此以其为原料制备高附加值芳香醛类化合物具有重要价值。然而, 这些醛类化合物在有氧氧化过程中极易发生过度氧化生成芳香酸, 这一问题是当前面临的主要挑战。因此, 抑制过度氧化反应是实现高效转化的关键。本研究创新性地报道了一种用于选择性断裂木质素 C_{α} - C_{β} 键的二元离子液体体系 ([Emim][Ac]与[Bmim][FeCl₄]) 通过协同催化解决该问题。工作主要阐述了在 60 °C 离子液体介质中 2-苯氧基-1-苯乙酮 (PP) 选择性解聚生成苯甲醛和苯酚的过程。首先通过实验验证了二元离子液体的协同效应, 其中[Bmim][FeCl₄]与[Emim][Ac]组合对 PP 解聚表现出最优催化效率。随后系统优化了反应时间、温度和催化剂负载量等参数对 PP 转化的影响。密度泛函理论分析表明, [Ac]⁻和[FeCl₄]⁻可与木质素 β -O-4 键形成氢键和范德华相互作用, 这些相互作用能有效降低 C_{β} -H 键的键能, 促进其均裂产生自由基。在温和条件下, 这些自由基可高效断裂 C-C 键生成芳香醛类化合物, 同时显著抑制过度氧化现象。在该体系中, 木质素模型化合物 2-苯氧基-1-苯乙酮 (PP) 的裂解产物苯甲醛 (46.4 %) 和苯酚 (73.4 %), 以及酶解木质素降解产生的香草醛等芳香产物均未发生过度氧化。该策略充分发挥协同催化效应, 仅需在温和条件下将离子液体与木质素简单混合即可实现转化, 无需复杂工艺流程, 所用离子液体易于回收再利用。因此, 本方法具有环境友好、能耗低、操作简便等突出优势, 在工业应用方面展现出良好前景, 同时兼具显著的经济效益和生态效益。

关键词: 木质素; 降解; 离子液体; 协同效应; 苯甲醛

基于对甲氧基苯甲酸构成的新型镧系配合物：晶体结构、热行为和发光性质

屈孜毅，张建军*

河北师范大学化学与材料科学学院，河北石家庄，050024

*Email: jjzhang6@163.com

合成了四种配合物： $[\text{Ln}(\text{4-MOBA})_3(\text{4,4'-DM-2,2'-bipy})]_2 \cdot (\text{H}_2\text{O}) \cdot (\text{C}_2\text{H}_6\text{O})$ ($\text{Ln}=\text{Dy}(1)$, $\text{Gd}(2)$); $[\text{Ln}(\text{4-MOBA})_3(\text{4,4'-DM-2,2'-bipy})]_2 \cdot (\text{C}_2\text{H}_6\text{O})$ ($\text{Ln}=\text{Tb}(3)$, $\text{Ho}(4)$) (4-MOBA = 4-Methoxybenzoate, 4,4'-DM-2,2'-bipy = 4,4'-Dimethyl-2,2'-bipyridyl)。通过单晶X射线衍射法对其组成和结构进行了表征，配合物1-4均是结晶于单斜晶系 $\text{P}2_1$ 空间群，其中配合物1-4金属中心具有8配位特征^[1]。并采用元素分析、红外光谱、拉曼光谱以及X射线粉末衍射等手段对配合物进行表征，除此之外，采用TG-DSC/FTIR/MS联用技术研究了4个配合物的热分解过程。结果表明，配合物在分解过程中，先失去中性配体，再失去酸性配体^[2]。并测量了配合物1和配合物3的荧光光谱，结果表明配合物3有较强的荧光寿命。DFT计算表明，配体可以有效地将能量转移到镧系元素离子。

关键词：镧系配合物；晶体结构；热分解机理；荧光性质

参考文献

- [1] Sarıoğlu, A.O.; Sogukomerogullari, H.G.; Köse, A.; Morcalı, M.H. *J. Iran. Chem. Soc.*, 2024, **21**: 2923-2931.
- [2] He, S.M.; Sun, S.J.; Zheng, J.R.; Zhang, J.J. *Spectrochim. Acta, Part A*. 2014, **123**: 211-21.

基于 4-甲基苯甲酸和 5,5'-二甲基-2,2'-联吡啶配体的六种新型镧系配合物的合成与表征

周若冰, 张占辉*, 张建军*

河北师范大学化学与材料科学学院, 河北石家庄, 050024

Email: jjzhang@hebtu.edu.cn

本文报道了由4-甲基苯甲酸和5,5'-二甲基-2,2'-联吡啶与六种镧系金属离子(Er、Ho、Dy、La、Nd、Ce)配位形成的六种新型镧系配合物。单晶X射线衍射分析表明这些配合物呈现两种不同的结构类型: Er、Ho和Dy配合物表现为单核结构, 而La、Nd和Ce配合物则形成双核结构。通过红外光谱和拉曼光谱对配合物的化学键及振动模式进行了详细解析, 证实了配体与金属离子间的配位作用。X射线衍射(XRD)进一步验证了配合物的晶体结构, 并提供了晶胞参数和空间群信息。采用TG-DTG-DSC/FTIR/MS联用技术系统研究了六种配合物的热分解行为及热解产物。结合密度泛函理论(DFT)计算, 阐明了从配体到镧系离子的能量转移过程, 并重点研究了Dy³⁺配合物的发光特性。

关键词: 镧系配合物; 晶体结构; 热分解; 荧光性质

参考文献

- [1] Panetti G. B.; Robinson J. R.; Carroll P. J., *Dalton Trans.*, 2019, **48**: 16460.
- [2] Wang H.; Feng Q. M.; Tang X. K.; Liu K. *Sep. Sci. Technol.*, 2016, **51**: 2465-2472.

双硼酸型与季铵盐型表面活性剂共组装的胶束型糖识别传感器

杜亭如¹, 安倩倩¹, 姚美焕¹, 任福磬¹, 过治军¹, 白光月^{1,*}, 王玉洁^{2,*}

¹ 河南师范大学化学化工学院, 新乡, 453007

² 河南科技学院化学化工学院, 新乡, 453003

*E-mail: baiguangyue@htu.cn, **E-mail: yujiewang2001@163.com

苯硼酸能够与多元醇发生可逆的共价结合, 这促进了将其大量用于识别碳水化合物、儿茶酚胺等物质的化学传感器的开发^[1-2]。我们设计并合成了一种两亲性二硼酸荧光探针 (*p*-BMDAB), 其具有苯硼酸作为糖类识别位点以及烷基链作为疏水部分的结构特点。采用 UV-vis 光谱测定了 *p*-BMDAB 在传统表面活性剂 (阳离子, 阴离子和两性离子) 中的表观酸解离常数 pK_a 。研究了 DTAB/*p*-BMDAB 共组装体系的荧光性质, 发现体系的荧光强度变化与 pH 及 *p*-BMDAB 的浓度有关。在 DTAB/*p*-BMDAB 体系识别糖的研究中, 通过荧光光谱法考察了体系对果糖 (Fru) 以及唾液酸 (SA) 的识别, 并通过 Stern-Volmer 方程计算得到了不同 pH (pH 7.4 和 pH 6.5) 下的结合常数 K_b , 表明体系对于多元醇的识别具有 pH 响应性, 当 pH 值从 7.4 降低为 6.5 时, 果糖 $K_{b, \text{Fru}}$ 从 57.0 降至 4.3 M^{-1} , 而在这两个 pH 下, 体系与唾液酸的结合常数 $K_{b, \text{SA}}$ 随 pH 变化不大。通过 ^{11}B NMR 波谱表征了硼酯键的形成, 通过比较 DTAB/*p*-BMDAB 体系分别随果糖和唾液酸浓度变化的 ^1H NMR 谱图, 得到了唾液酸可能与果糖一样, 与 DTAB/*p*-BMDAB 体系中的苯硼酸头基形成 1:1 结合的酯键。

关键词: 双硼酸两亲分子; DTAB; 共组装; 糖; 传感器

参考文献

- [1] Fan P.; Cao Z.; Zhang S.; Wang Y.; Xiao Y.; Jia W.; Zhang P.; Huang S. *Nat. Commun.*, 2024, **15**: 1969.
[2] Bian Z.; Liu A.; Li Y.; Fang G.; Yao Q.; Zhang G.; Wu Z. *Anal.*, 2020, **145**: 719.

致谢: 感谢国家自然科学基金 (编号: 22173027; 21773059) 的经费支持。感谢河南师范大学绿色化学介质与反应教育部重点实验室和河南省精细化学品绿色制造协同创新中心的支持。

氢气在循环溶剂中的溶解和在催化剂上的迁移行为

吴卫泽^{*1}, 晏博¹, 贾玉博¹, 侯玉翠², 任树行¹

¹北京化工大学化学工程学院化工资源有效利用国家重点实验室, 北京, 100029;

²太原师范学院化学与材料学院, 山西晋中, 030619;

* E-mail: wzwu@mail.buct.edu.cn

含碳物质如煤炭、生物质及废塑料可通过直接加氢液化技术转化为燃料油与化学品, 而循环溶剂和催化剂是该技术的核心组成部分, 其中氢气在循环溶剂中的溶解行为及迁移规律是关键研究课题。本文首先系统探究了氢气在循环溶剂中的物理溶解规律与化学溶解规律(化学平衡), 并结合这两类规律定量解析了氢气在循环溶剂中的溶解迁移特性; 其次是阐明了氢气在常用加氢催化剂 Fe_{1-x}S 上的吸附与迁移机制。

以四氢萘和萘作为模拟循环溶剂, 研究发现氢气在其中的物理溶解度符合亨利定律, 且随温度与氢压升高而增大, 同时催化剂对物理溶解度无显著影响。通过亨利方程关联溶解度数据, 计算得到溶解过程的溶解热与溶解焓, 结果表明氢气溶解为吸热过程, 升温可促进溶解。在催化剂作用下, 考察了萘加氢生成四氢萘反应体系的化学平衡, 获取了不同温度、压力及组成条件下的平衡常数。低温环境下平衡常数较大, 更有利于加氢反应的进行; 通过热力学计算, 得到了不同温度对应的平衡常数与吉布斯自由能。结合亨利定律与平衡常数, 分别定量物理溶解氢量与化学溶解氢量后发现: 加氢反应中化学溶解氢占主导地位, 随温度升高, 化学溶解氢量减少、物理溶解氢量增加, 总溶解氢量呈下降趋势, 且存在化学溶解氢向物理溶解氢的迁移; 随氢压升高, 化学溶解氢量、物理溶解氢量及总溶解氢量均逐步增大。

催化剂 Fe_{1-x}S 可通过化学吸附或储存方式结合氢, 即在反应条件下与氢气或供氢溶剂反应生成 $\text{Fe}_{1-x}\text{S-H}$ 配合物, 360°C时其吸附氢量达 8.20 mmol H/g ($\text{H/S}=0.83$)。在萘与二氢萘体系中, 该催化剂可实现可逆的脱氢与吸氢过程, 由此获得 $\text{Fe}_{1-x}\text{S-H} + \text{萘} = \text{二氢萘} + \text{H}_2$ 反应的平衡常数。在催化剂作用的萘加氢生成二氢萘体系中, 脱氢反应的 $\Delta H = 117.6 \text{ kJ/mol}$, 且非供氢溶剂十二烷的加入可显著提升脱氢效率。

本文揭示了温度、压力对氢气在循环溶剂中的氢传递路径的调控机制, 以及发现 $\text{Fe}_{1-x}\text{S-H}$ 配合物的可逆储氢特性, 为催化剂的设计和优化直接加氢液化工艺参数提供了理论依据。

关键词: 循环溶剂; Fe_{1-x}S 催化剂; 氢迁移; 物理溶解; 化学溶解

本项目得到国家重点研发计划的经费支持(2017YFB0602401)。

食品胶体的热力学和动力学研究

焦清波¹, 王天荣¹, 李皓¹, 雷群芳², 方文军², 谢湖均^{1,*}

¹浙江工商大学食品与生物工程学院, 浙江杭州, 310028

²浙江大学化学系, 浙江杭州, 310058

*Email: hjxie@zjgsu.edu.cn

蛋白质在食品加工中有着良好的稳定性、乳化性等功能性作用, 蛋白与其他组分之间的相互作用对食品质地和口感有重要影响。以食品胶体与界面热力学为基础, 我们构建了一系列蛋白-多糖、蛋白-脂类、蛋白-蛋白等蛋白复合物体系, 用来包埋和递送生物活性物质, 以提高其稳态性和生物利用率; 采用实验与理论计算相结合的办法, 提出了蛋白之间的相互作用强弱调控蛋白复合物相行为的分子机制, 并探讨了 pH 值、小分子、金属离子、压强、温度等因素对蛋白复合物的调控机制; 基于甜味剂数据库构建、甜味受体虚拟筛选甜味剂、以及生成式 AI 模型设计甜味剂等工作, 揭示甜味感知机制。目前的研究为基于蛋白食品的创新研发提供理论基础。

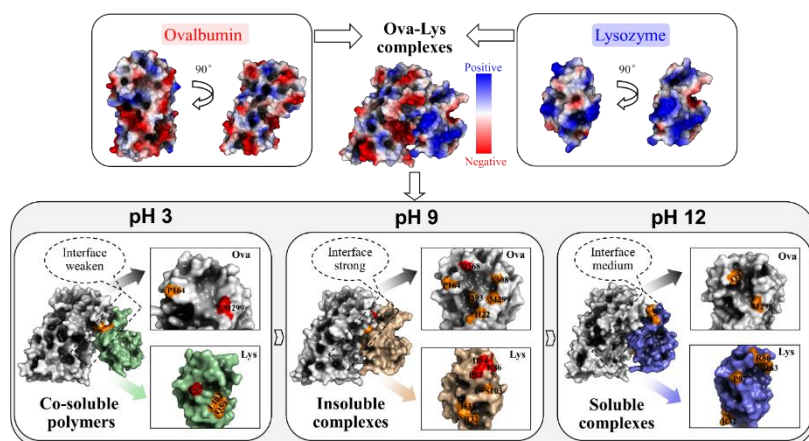


图 1 蛋白质相互作用的强度如何影响蛋白质复合物的相行为

关键词: 蛋白; 包埋; 人工智能; 分子动力学模拟; 蛋白聚集

疏水改性葡聚糖基单分子胶束的糖苷键原位酶促水解

杜鑫淼¹, 赵文琦¹, 张梦迪¹, 姚美焕¹, 白光月^{1,*}, 王玉洁^{2,*}

¹河南师范大学化学化工学院, 新乡, 453007

²河南科技学院化学化工学院, 新乡, 453003

*E-mail: baiguangyue@htu.cn, **E-mail: yujiewang2001@163.com

葡聚糖是稳定性高、生物相容性好、免疫原性低的高分子材料, 而且糖环上的多羟基位点能够经过疏水和功能性改性用作抗肿瘤药物等的输送载体^[1,2]。我们采用平均分子量分别为 2000 至 10000 的葡聚糖 (Dn) 在还原端通过 C18 烷基链进行疏水改性, 合成了 Dn-C18 两亲分子, 研究了 Dn-C18 和 SDS 混合胶束化行为, 再加入双芳香基硼酸 (BTEAB、PyBBA、P3BA) 连接分子制备三元 D8-C18/SDS/PyBBA 混合胶束, 建立了类胶束结构纳米载体。本项工作主要涉及用葡聚糖酶水解单分子胶束的葡聚糖链, 在保持单分子胶束疏水核结构的前提下逐渐剥离葡聚糖极性壳, 研究在极性壳内包埋和功能性释放客体分子的可能性。在研究了不同浓度的 SDS 和芳香基硼酸对葡聚糖酶催化葡聚糖 Dn 水解活性影响的前提下, 对酶浓度、溶液 pH 和温度影响酶促水解速率的因素进行了表征, 可以在 60 min 左右将葡聚糖降解为寡聚糖, 而混合胶束形态保持不变。

关键词: 葡聚糖两亲分子; 混合胶束; 单分子胶束; 葡聚糖酶

参考文献

- [1] Guo Y.; Yang X.; Zhang Y.; Luo F.; Yang J.; Zhang X.; Mi J.; Xie Y. *Carbohydr. Polym.*, 2024, **332**: 121897.
- [2] Jin R.; Guo X.; Dong L.; Xie E.; Cao A. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2017, **158**: 47-56.

致谢: 感谢国家自然科学基金 (编号: 22173027; 21773059) 的经费支持。感谢河南师范大学绿色化学介质与反应教育部重点实验室和河南省精细化学品绿色制造协同创新中心的支持。

Contact electrification and therapy

Haimei Li, Peng Jiang*

School of Pharmaceutical Sciences, Wuhan University, Wuhan 430071, P. R. China

Email: jiangpeng@whu.edu.cn

Conventional drug-based therapies for malignant tumors and drug-resistant infections are limited by high side effects and drug resistance. To address this challenge, we integrated triboelectric theory with immunotherapy, developing a wearable, self-driven, and drug-free therapeutic strategy—Triboelectric Immunotherapy (TIT). Key advancements include:

(1) Development of TIT: We utilized flexible fabric-based triboelectric nanogenerators (TENGs) to generate electrostatic breakdown pulse currents, which induce immunogenic cell death in tumor cells, activate T cell-mediated antitumor immune responses, and achieve drug-free ablation of solid tumors.^[1]

(2) Construction of TIT/CAR-T Synergistic Therapy: We applied pulsed electric stimulation from a direct-current (DC) TENG to reprogram the tumor immunosuppressive microenvironment, disrupt the tumor stromal barrier, and enhance chimeric antigen receptor (CAR)-T cell infiltration into tumor tissues, thereby improving the efficacy of CAR-T therapy for solid tumors.^[2]

(3) Establishment of TIT for Osteomyelitis: We developed a novel electrostatic breakdown DC-TENG capable of generating over 30 current pulses (peak current: 29 μ A) per friction cycle. Through synergistic effects of antibacterial activity, immune activation, and bone repair induced by pulsed electric stimulation, this therapy improves osteomyelitis treatment outcomes, prevents recurrence, and shortens disease duration. Notable features include: ① Pulsed direct current causes biofilm perforation, disrupts the bacteria's hypoxic metabolic environment, and enhances antibiotic sensitivity. ② It induces pro-inflammatory polarization, activates immune defense and memory, thereby boosting antibacterial/killing ability and reducing the risk of recurrence. ③ It promotes the repair of bone defects through electrostimulation. ④ It is drug-free, thus avoiding drug-related side effects.^[3]

Keywords: Triboelectric Immunotherapy; Drug-free; Triboelectric Nanogenerators

References

- [1] Li H.; Chen C.; Wang Z.; Huang Y.; He G.; Liu Y.; Jiang P.; Wang Z. L. *Mater. Today*, 2023, **64**: 40-51.
- [2] Li H.; Wang Z.; Hu Y.; He G.; Huang L.; Liu Y.; Wang Z. L.; Jiang P. *Biomaterials*, 2025, **314**: 122871.
- [3] Yuan Y.; Li H.; Song Y.; Zhang D.; Wang Z.; Yi X.; Qi B.; Zhang X.; Jiang P.; Yu A. *Adv. Mater.*, 2024, **36**: 2408473.

DFDNTN/TNAZ 低共熔物的制备及其热分析测试

颜雨洁*, 金波**

西南科技大学, 四川省绵阳市涪城区西南科技大学, 621000

*Email: 2362412499@qq.com, **Email: jinbo0428@163.com

为寻找 TNT 液相载体炸药的替代物, 本文使用新型的含氟类的熔铸载体炸药 DFDNTN(5-氟-3-甲基-2,4-二硝基苯胺)以及典型的熔铸载体炸药 TNAZ 形成了低共熔物, 当 TNAZ: DFDNTN=6: 4, 能够形成熔点 88 °C的低共熔物, 熔点符合理想的熔铸载体炸药的范畴, 且具有较高的分解温度, 与高能炸药 RDX、HMX 具有较好的相容性、100°C-360min 的恒温实验失重率相较于单组分 TNAZ 能够得到明显改善, 感度适中, 能量适中, 有望能够替代 TNT。并且进行了微热量热测试, 探究了与高能组分的热分析行为。

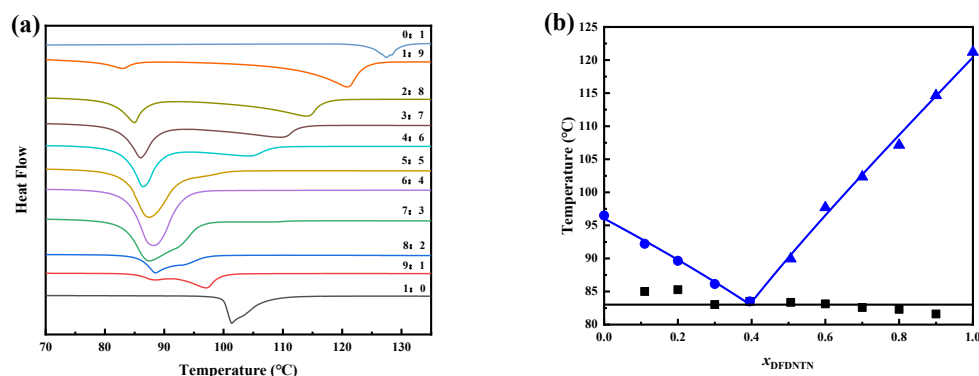


图 1 (a) 不同质量比的 DSC 曲线 (b) TNAZ/DFDNTN 二元混合体系的 T-X 相图

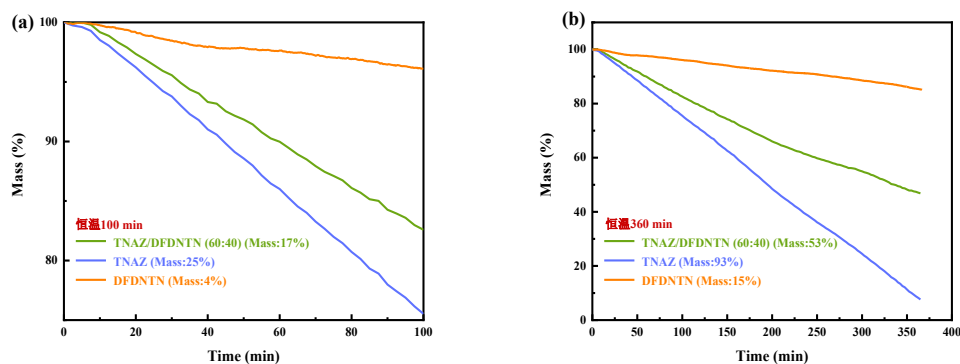


图 2 (a) 恒温 100 min (b) 恒温 360 min

关键词: 熔铸炸药; 热分析; 微热量热

矿物药赭石热解特性分析及物相成分鉴定

雒荣荣¹, 冯国梁¹, 谢磊磊^{2,*}, 王颖莉^{2,**}

¹ 山西中医药大学中药与食品工程学院, 山西晋中, 030619

² 山西中医药大学实验管理中心, 山西晋中, 030619

*Email: xiell@sxtcm.edu.cn, **Email: wyltyut@163.com

赭石是一种常用的矿物类中药, 临床应用广泛。生品偏重于降逆, 煅制后偏重于止血。然而由于炮制不规范造成临床用药不规范, 从而制约了煅赭石的临床使用。为探究赭石热解过程, 规范炮制机理, 本研究选取山西、河北产地的三个批次赭石, 采用同步热分析(STA)确定赭石的热解失重区间, 并模拟热解环境, 通过恒温回转炉获得系列煅制品, 借助傅里叶变换红外光谱(IR)、X射线衍射(XRD)、电镜-能谱(SEM-EDS)、X射线光电子能谱(XPS)确定物相变化。TG和DSC显示山西产赭石失重率最高, 为4.5836%, 其中170-370°C为活化温度, 364-551°C以熔融状态为主, 545-712°C以氧化态为主。IR显示主要是Si-O-Si非对称伸缩振动和Fe-O对称伸缩振动的变化。XRD显示主要是SiO₂和Fe₂O₃两种物相不同构象的改变。SEM-EDS显示热解过程中外貌形态变化较小, C元素含量显著降低, Fe、O、Si含量显著上升。XPS灵敏度更高, 证实赭石主要以Fe²⁺和Fe³⁺混合为主, 且在高温煅制过程中, Fe²⁺/Fe³⁺比例显著降低。综上所述, 赭石热解过程主要是通过调节铁元素的形态和含量变化从而影响药效的发挥, 为完善赭石煅制工艺提供了可靠的理论基础。

关键词: 赭石; 热解分析; 物相鉴定

参考文献

- [1] 孙淼杰, 王淑彤, 赵宇翾等. 药学研究, 2023, **42**: 176-179.
- [2] 刘圣金, 吴思澄, 马瑜璐等. 中草药, 2023, **54**: 6555-6568.

离子多糖与蛋清蛋白的相互作用差异影响其热凝胶行为的机制研究

陈思含，周媛婷，任格瑞，黄敏*，谢湖均*

浙江工商大学食品与生物工程学院，浙江杭州，310018

*Email: huangmin@zjgsu.edu.cn; hjxie@zjgsu.edu.cn

蛋清蛋白（Egg white protein, EWP）优良的生物相容性、生物降解性和低细胞毒性使其成为动物蛋白功能化领域的研究热点。EWP 与多糖之间的相互作用会影响其凝胶性能。本研究比较了魔芋葡甘露聚糖（KGM，中性多糖）、黄原胶（XG，阴离子多糖）和壳聚糖（CS，阳离子多糖）与 EWP 相互作用差异对 EWP 凝胶化性能的影响。利用 zeta 电位、流变特性和多光谱分析等方法系统地探讨了 EWP 与这些多糖的相互作用机制。通过质构分析、持水力、水分状态分布和温度斜坡测试等进一步评价蛋白质-多糖复合物的凝胶性能。本研究深入分析了相互作用差异对凝胶性质上的影响，为新型 EWP 凝胶的开发提供了理论基础。

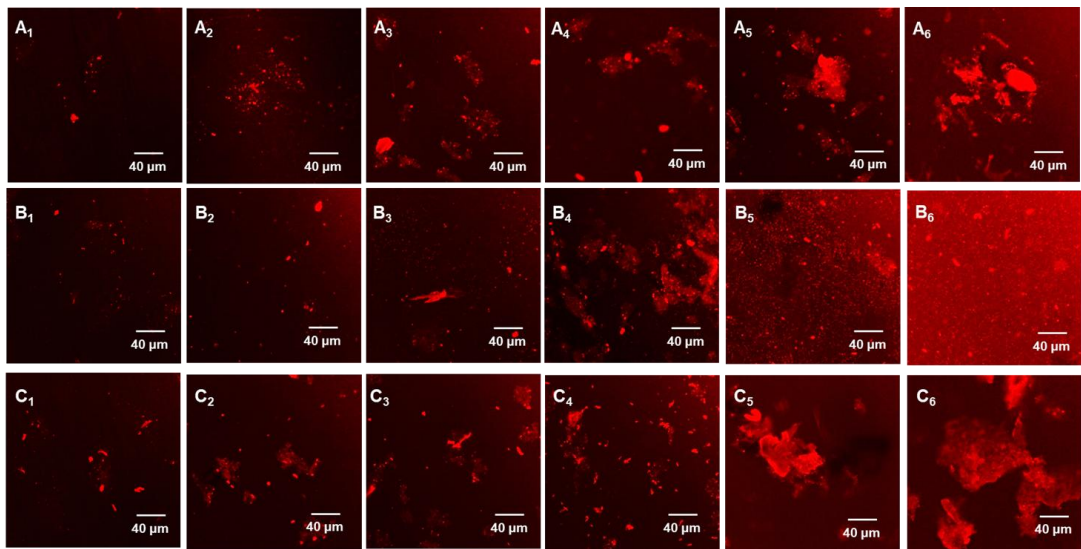


图 1 EWP-KGM(A₁-A₆)、EWP-XG(B₁-B₆)和EWP-CS(C₁-C₆)复合物的CLSM图像。从左至右，多糖的添加浓度分别为0.0%、0.01%、0.05%、0.10%、0.40%和0.80%。

关键词：蛋清蛋白；离子多糖；相互作用；凝胶

Study on the interaction mechanism between HBT and HSA

Meng-Kang Jiang^{*}, Zhi-Yu Zuo, Miao-Miao Yin^{**}, Yan-Jun Hu^{**}

Hubei Key Laboratory of Pollutant Analysis & Reuse Technology, College of Chemistry and Chemical Engineering, Hubei Normal University, Huangshi, 435002 PR China

^{**}Email: yinmm@hbnu.edu.cn, ^{**}Email: huyj@hbnu.edu.cn

Human serum albumin (HSA) is the most abundant protein in human blood, functioning to regulate plasma pH, maintain osmotic pressure stability, and transport drugs. Excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) is a process in which the -OH or -NH₂ proton of a fluorophore rapidly transfers to an adjacent carbonyl or imino group under excited-state conditions, forming a tautomer. HBT fluorescent dye exhibits the ESIPT effect and can produce enol (E*) or keto (K*) emissions under different conditions. Therefore, by introducing recognition groups to modulate the ESIPT effect, it can be utilized for designing ratiometric fluorescent probes. Currently, ESIPT fluorophores can be employed to detect various cations, anions, small neutral molecules, and biomolecules. However, the interaction mechanism between HBT fluorescent dye and HSA during transport in biological systems remains unclear. In this study, we investigate the binding of 2-(2-Hydroxyphenyl)benzothiazole (HBT) to HSA at the molecular level. The results indicate that HBT binds in the hydrophobic cavity of Site I on HSA. The experimental findings were validated through molecular modeling.

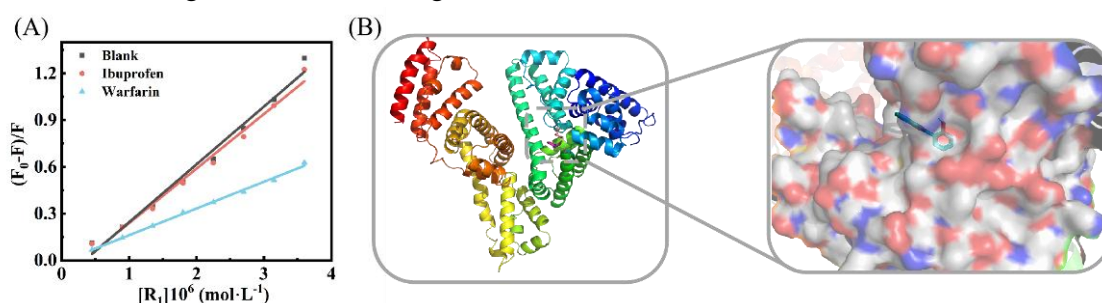


Fig. 1 (A) Stern-Volmer equation fitting plots for HBT in the presence and absence of site-specific probes.; (B) Molecular docking of the interaction between the HBT and HSA.

Keywords: HSA; ESIPT; HBT; Interaction mechanism

References

- [1] Hu S. Y.; Lin W.; Li W. J.; Ding X.; Zhao R. F.; Hu Y. J. *Anal. Bioanal. Chem.*, 2024, **417**: 251.
- [2] Chen Y.; Lu S.; Abbas Abedi S. A.; Jeong M.; Li H.; Hwa Kim M.; Park S.; Liu X.; Yoon J.; Chen X. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, **62**: e202311543.

Study on the interaction mechanism between metal-organic frameworks and HSA

Yi-Bo Yuan, Na Zhang, He-Chang Huang, Miao-Miao Yin*, Yan-Jun Hu*

Hubei Key Laboratory of Pollutant Analysis & Reuse Technology, College of Chemistry and Chemical Engineering, Hubei Normal University, Huangshi 435002 PR China

**Email: yinmm@hbnu.edu.cn; huyj@hbnu.edu.cn

Metal-organic frameworks (MOFs) have attracted considerable attention in the biomedical field due to their low toxicity, degradability, high drug loading capacity, structural designability, and multimodal functionality. Human serum albumin (HSA), a key protein that maintains plasma osmotic pressure and participates in substance transport and metabolism, interacts with MOFs, and the interaction mechanism affects the biocompatibility of the materials. In this study, the interaction between MOFs and HSA was investigated through impedance spectroscopy experiments. The results showed that the radius of the curve increased with the increase in drug concentration, indicating that non-electrical substances were formed between the molecules and HSA, and a mutual interaction occurred between them. Through molecular docking experiments, it was found that the MOFs molecules were bound to the HSA site I, suggesting that MOFs could interact with proteins and verifying the above results. This work provides experimental evidence for understanding the interaction mechanism between MOFs and proteins, and has important guiding significance for optimizing the in vivo delivery efficiency and safety of MOF-based drugs.

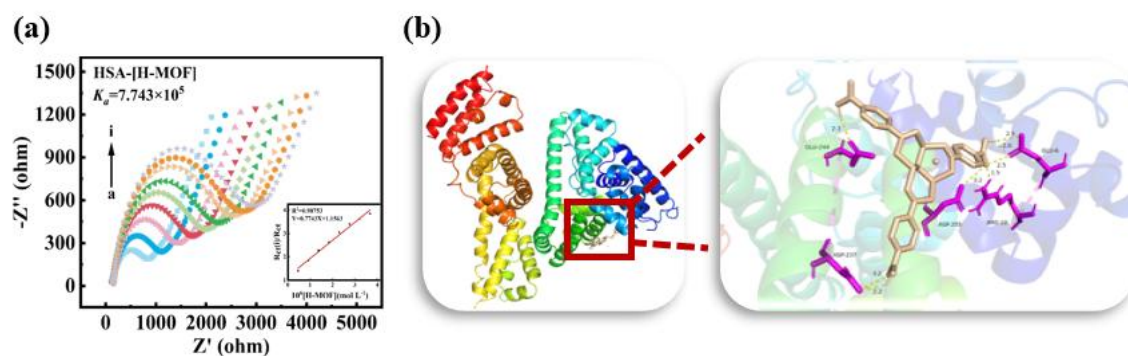


Fig.1 (a) The impedance spectroscopy graph of the interaction between H-MOF and HSA at different concentrations. (b) The molecular docking results of H-MOF and HSA.

Keywords: Metal-organic frameworks; HSA; Interaction

References

- [1] Yu L.; Xu Q.; Huang L.; Feng L.; Feng Y.; Wu G.; Xiao Y. *Anal. Chem.*, 2025, **97**: 1426-1436.
- [2] Ding T.; Wang G.; Tang L.; Xia Y.; Song X.; Yang Y.; Ai L. *J. Sci. Food Agric.*, 2024, **104**: 8852-8857.
- [3] Jia Q.; Wu Z.; Wang L.; Zhang W.; Li Y.; Li S.; Qin Y. *Lwt-Food Sci. Technol.*, 2025, **219**: 117556.

FeCuCoMnPt Nanozyme with POD activity for synergistic photothermal antibacterial therapy

Xiang Wang^{*}, Lin-Xi Song, Yan-Jun Hu^{**}, Xin Ding^{**}

Hubei Key Laboratory of Pollutant Analysis & Reuse Technology, College of Chemistry and Chemical Engineering, Hubei Normal University, Huangshi, 435002 PR China

^{**}Email: huyj@hbnu.edu.cn, ^{**}Email: dingx@hbnu.edu.cn

In the face of the increasingly severe challenges of drug-resistant bacteria infection in clinical treatment, this study pioneered the development of FeCuCoMnPt high-entropy alloy nanozymes (HEAs NPs), which have both peroxidase (POD) catalytic activity and photothermal conversion function, providing a new strategy for synergistic antibacterial therapy. With the unique electronic synergistic effect between Fe, Cu, Co, Mn and Pt multi-metal components, this nanozyme can efficiently catalyze the decomposition of H₂O₂ in a slightly acidic environment, produce a large amount of reactive oxygen species (ROS), accurately destroy the structure of bacterial biofilm, and disintegrate the important barrier of bacteria against external attacks. More importantly, when exposed to 808 nm near-infrared light, HEAs NPs exhibits excellent photothermal performance. Through local hyperthermia, it can not only directly inactivate pathogens, but also further enhance the generation of ROS, achieving deep synergy between photothermal effect and enzyme catalysis. The research results have opened up a new path for overcoming the problem of drug-resistant bacteria infection and developing new high-efficiency antibacterial materials, showing great application potential and value in the field of biomedical antibacterial.

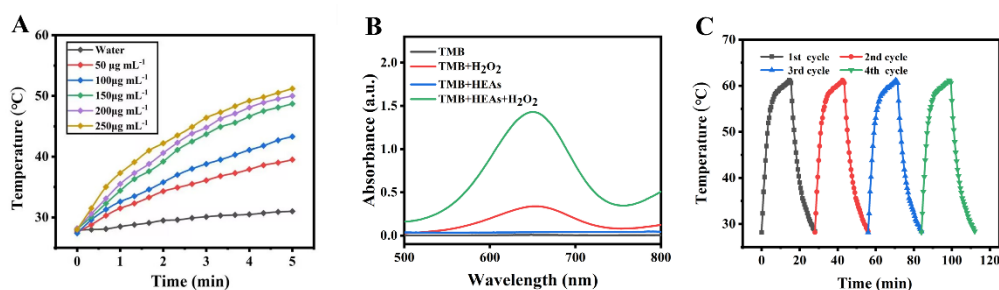


Fig.1 (A) The real-time temperature change curve of HEAs NPs with different concentrations under 808 nm near-infrared light irradiation; (B) TMB color reaction kinetic curve; (C) The stability of HEAs NPs was tested after four heating and cooling cycles.

Keywords: Nanozymes, POD-like Activity, Photothermal antibacterial agents.

Reference:

- [1] Miao X.; Qu D.; Yang D.; et al. *Adv. Mater.*, 2018, **30**: e1704740.
- [2] Qu X.; Gao C.; Fu L.; et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023, **15**: 18608-18619.
- [3] Du X.; Zhang M.; Ma Y.; et al. *J Colloid Interface Sci.*, 2023, **634**: 44-53.

Inhalable nanoaerosols treat bacterial pneumonia by activating HSP70 to reprogram macrophages

Hu Miao^{*}, Zi-Chen Liu, Xin Ding^{**}, Yan-Jun Hu^{**}

Hubei Key Laboratory of Pollutant Analysis & Reuse Technology, College of Chemistry and Chemical Engineering, Hubei Normal University, Huangshi, 435002 PR China

^{**}Email: dingx@hbnu.edu.com, ^{**}Email: huyj@hbnu.edu.cn

This study aimed to address the "infection-inflammation-injury" vicious cycle problem in the treatment of methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) pneumonia, and developed a mannose-modified mesoporous polydopamine nanoparticle aerosol (MPDA/B@M). This nanotherapy system achieves efficient treatment through a multimodal synergistic mechanism: Firstly, the drug active component bufalin is loaded onto the mesoporous polydopamine (MPDA) carrier, and surface mannose modification is used to achieve macrophage-targeted delivery; after inhalation administration, the nanoparticles can efficiently accumulate in the lung lesions, while the controlled release of bufalin enhances the antibacterial effect; the system can specifically eliminate excessive reactive oxygen species (ROS), and achieve dual effects of cell protection and inflammation regulation by inducing the expression of heat shock protein 70 (HSP70).

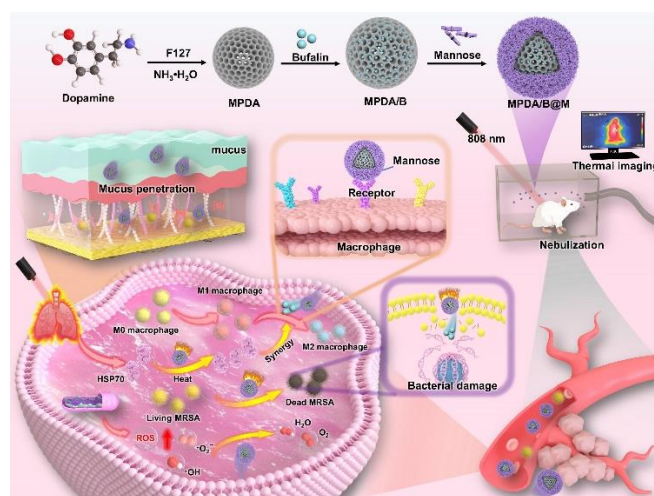


Fig.1 Synthesis of MPDA/B@M and schematic diagram of its application in treating *Staphylococcus aureus* infection-induced pneumonia

Keywords: Pneumonia; HSP70; Targeting; Nebulization

References

- [1] Chen T.; Zhuang B.; Huang Y.; Liu Y.; Yuan B.; Wang W.; Yuan T.; Du L.; Jin Y. *Acta Pharm Sin B*. 2022, **12**: 2522.
- [2] Fu Y.; Yang L.; Zhang J.; Hu J.; Duan G.; Liu X.; Li Y.; Gu Z. *Mater. Horiz.* 2021, **8**: 1618.

碳基纳米氧化铁对含能材料的热分解研究

党佳¹, 李煜¹, 张婷², 赵宁宁³, 马海霞^{1,4*}

¹ 西安特种能源材料重点实验室/西北大学化工学院, 西安 710027

² 延安大学化学化工学院, 延安 716000

³ 西安理工大学理学院, 西安 710048

⁴ 火箭军工程大学, 西安 710025

金属氧化物作为催化剂在磁学、电化学、生物医药、传感及含能材料等领域均有广泛的应用。作为固体推进剂用燃烧催化剂,其研究始于20世纪90年代。目前已有许多关于纳米燃烧催化剂的文献报道,主要研究的金属氧化物涉及以下几种:铅基氧化物、铜基氧化物、铁基氧化物以及铋基氧化物^[1]。氧化铁(Fe_2O_3)成本较低,热稳定性高,使其在催化、储能等方面具有广泛的应用^[2]。

碳材料是含能材料燃烧催化剂组分中不可缺少的一部分,在固体推进剂燃烧过程中,“碳处于一个独特而又微妙的地位”^[3]。最早应用在含能材料中的碳材料为黑火药中的木炭。随着材料科技的不断发展,碳材料的种类得到了丰富与发展。自1985年富勒烯(C_{60})以及后续1991年碳纳米管(CNT)和2004年石墨烯(rGO)的成功合成,引发了纳米碳材料的科技革命。纳米碳材料具有可观的比表面积和良好的导热性,添加到含能材料中可加快传质传热速率,提高其能量释放速率。同时纳米碳材料表面具有丰富缺陷位点,可提高燃烧催化剂的分散性和降低粒径尺寸,提升催化剂接触面积。因此,将纳米碳材料掺杂到燃烧催化剂中可同时满足上述四种提升催化剂燃烧效率的策略目标。

本文以纳米碳材料为基制备出不同碳材料的纳米氧化铁复合催化剂,对其结构和形貌进行了扫描电镜、透射电镜和X射线粉末衍射表征。这些碳材料包括石墨烯(GO)、介孔碳纳米球(MCs)、氮掺杂多孔碳材料(CN)。研究发现复合材料可以降低含能材料(EMs)的热分解温度和活化能,提高EMs的机械安全性,提升EMs的燃烧性能。

关键词: 碳材料; 纳米氧化铁; 催化作用; 热分解

参考文献

[1] Yan Q. L.; Zhao F. Q.; Kuo K. K.; et al. *Prog. Energ. Combust.* 2016, **57**: 75-136.

[2] Li Y.; Mu X. G.; Zhao Z. H.; et al. *Applied Surface Science*, 2025, **709**: 163826

[3] 赵凤起, 仪建华, 安亭, 汪营磊, 洪伟良. 固体推进剂燃烧催化剂, 2016, 国防工业出版社.

致谢

感谢国家自然科学基金 No. 22473089 和 22365030 的资助。

水热合成钛酸钠过程的微量热研究

刘畅

南京工业大学化工学院，江苏 南京 210009；

TiO₂ 与 NaOH 水热合成钛酸钠纳米材料是制备钛酸纳米管的关键步骤。然而，由于该合成过程是在密闭的高温高压反应器中进行，其反应过程一直被看作黑箱，难以准确获得反应动力学信息。针对水热合成钛酸钠过程难以原位监测的问题，本研究首次应用微量热技术，结合定制高压反应池，对 TiO₂ 与 NaOH 水热合成钛酸钠的过程进行原位实时热流测定，系统研究了 TiO₂ 晶相、NaOH 浓度、升温速率等因素对反应热流的影响，并采用 ASTM E698 法拟合动力学参数。研究表明，反应过程的热流曲线呈现三阶段特征，与文献所提出的 TiO₂ 在 NaOH 溶液中的溶解、层状钛酸钠形成及钛酸钠结构致密化重组三个过程吻合。锐钛矿型 TiO₂ 在 NaOH 溶液中的溶解是吸热过程，溶解焓为 8.329 ± 0.453 kJ/mol，通过外推法确定层状钛酸钠形成的最低热力学温度为 59.1 °C，该温度下其标准生成吉布斯自由能为 -2545.4 kJ/mol，反应活化能为 90.17 kJ/mol。

关键词：钛酸钠；纳米线；水热合成；微量热；热分析动力学

Microcalorimetric investigation of the concentration-induced phase transition behaviors of P123/water system

Lin Li*, Yuxia Bai, Lvdan Liu, Yanwei Ding**

Hefei National Laboratory for Physical Sciences at Microscale, Thermal analysis and adsorption Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China

*Email: linli123@mail.ustc.edu.cn, **Email: ywding@ustc.edu.cn

The self-assembly of block copolymers can provide a physical model for understanding protein aggregation under environmental perturbations. In this work, we investigated the concentration-dependent phase transition behaviors of the triblock copolymer PEO₂₀-PPO₇₀-PEO₂₀ (P123) in aqueous solution using ultrasensitive differential scanning calorimetry (US-DSC) combined with particle size and rheological measurements. Our results reveal that P123 aqueous solutions exhibit concentration-dependent multistep pathways in both the aggregation and disaggregation processes, with 10 mg/mL identified as a critical concentration threshold. During heating, concentrations exceeding this threshold lead to the disappearance of the endothermic peak for the sphere-to-rod transition of micelles, accompanied by the emergence of intermicellar association mediated by weak interactions. During cooling, at concentrations below 5 mg/mL, micelles gradually hydrate into monomers as the temperature decreases. In contrast, at higher concentrations below 10 mg/mL, micelles undergo a two-step disaggregation process characterized by an initial fragmentation into smaller intermediates before ultimately dissolving into monomers. For concentrations exceeding 10 mg/mL, large micellar clusters formed during heating first disaggregate into spherical micelles, followed by micellar fragmentation and dissolution. These findings not only advance the theoretical framework for the self-assembly of PEO-PPO-PEO block copolymers but also provide valuable insights into the thermodynamic principles underlying protein aggregation.

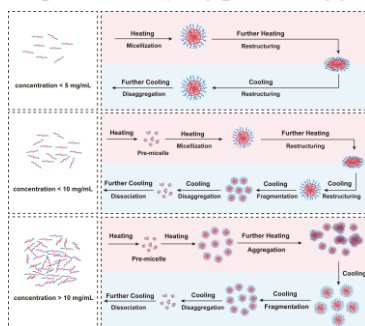


Fig. 1. Pictorial representation of the concentration-induced phase transition mechanism of P123

Keywords: Concentration; PEO-PPO-PEO; Micelle; Phase Transition; Ultrasensitive Differential Scanning Calorimetry

References

- [1] Li L.; Ni K.; Liu L.; Bai Y.; Ding Y. *J Phys Chem B* 2025, 129: 3482-3491.
- [2] Ganguly R.; Kumbhakar M.; Aswal V. K.; *J Phys Chem B* 2009, 113: 9441-9446.

高效锂吸附材料的精准构建及其锂吸/脱附性能热学研究

赵凯宇, 王垒金, 余晓平, 郭亚飞, 邓天龙*

天津科技大学化工与材料学院, 天津经济技术开发区第十三大街 9 号, 300457

*Email: tldeng@tust.edu.cn

众所周知, 锂被誉为“21 世纪的能源金属”, 已成为新世纪重要的战略能源^[1]。近年来, 随着新能源汽车和锂电行业的快速发展, 我国锂盐需求量逐年剧增, 但值得注意的是我国锂盐仍需大量依赖进口, 对外依存度高, 已成为制约新能源产业发展“卡脖子”问题。随着固体锂矿和盐湖液体锂矿逐步开发, 探寻新类型液体锂矿迫在眉睫^[2]。在我国西藏地区发现了储量丰富的地热卤水液矿锂资源, 考虑到青藏高原绿色生态国家发展战略, 选取吸附法提锂。

本研究采用易于规模化制备的高温固相法, 成功合成了钴掺杂型钛系锂离子筛粉体吸附剂 (LTO-1/32Co), 为有效解决其工业柱式操作过程中流动性差的问题, 优选聚醚砜 (PES) 为纺丝基体材料, 采用湿法纺丝技术进行复合成型, 通过凝固浴组成及湿纺工艺的调控, 实现了 PES@LTO-1/32Co 多孔复合纺丝吸附材料的精准构建^[3]。应用于地热卤水提锂, 吸附容量可达 42.12 mg/g, 60 min 即可快速完成锂的吸/脱附, 20 次循环提锂后钛溶损仅为 0.25%。并采用先进的 BT 2.15 微量热技术及 AKTS 热动力学模拟软件对其锂吸/脱附过程进行了深入研究, 发现温度升高可加快 PES@LTO-1/32Co 锂吸/脱附速率。

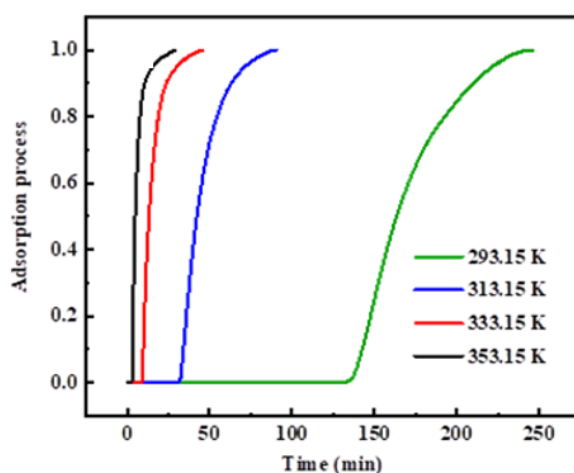


图 1 不同温度下 PES@LTO-1/32Co 锂吸附动力学

关键词: 锂; 吸附; 地热卤水; 微量热; 热动力学

参考文献

- [1] Zhang T.; Yu J. Guo H.; et al. *Chem. Soc. Rev.* 2024, **53**: 12043-12097.
- [2] Yang S.; Wang Y.; Zhou H.; et al. *Nature* 2024, **636**: 309-321.
- [3] Zhao K.; Guo Y. Deng T.; et al. *Chem. Eng. J.* 2024, **482**: 148989.

废离子交换树脂定温热分解实验及 ReaxFF 模拟研究

李秉阳*, 陈梅倩**

北京交通大学机械与电子控制工程学院, 微细尺度流动与相变传热北京市重点实验室, 北京,
100044

*Email: 21116029@bjtu.edu.cn, **Email: mqchen@bjtu.edu.cn

本研究以磺酸型阳离子交换树脂 (IER) 为研究对象, 综合采用固定床实验与反应力场分子动力学 (ReaxFF-MD) 模拟方法, 系统探讨了废树脂在不同热处理气氛下的热解与气化行为。实验部分通过定温热重实验测定了树脂在惰性气氛和水蒸气气氛下的分解特性, 结果表明其热解活化能为38.28kJ/mol, 气化活化能为43.58kJ/mol, 符合随机孔模型的反应特征, 表明反应过程受多孔结构扩散控制。气氛成分对分解行为具有显著影响, 水蒸气的加入可促进碳结构裂解, 提高反应速率。在模拟部分, 通过构建典型IER分子模型, 在3000-4500 K温度范围内开展定温ReaxFF-MD模拟, 进一步揭示温度及水蒸气对分解路径的影响机制。模拟结果显示, 随着温度升高, 碳链断裂程度加剧, 水蒸气参与羟基自由基反应过程, 促进C-S和S-O键断裂, 从而加速有机骨架降解。在4500K下, 气化反应的最大降解率达58.86%。主要生成的气体产物包括SO₂、CO、CO₂、H₂和C₂H₂, 与实验结果保持良好一致。该研究揭示了废离子交换树脂在热化学处置过程中的反应机理及影响因素, 为有机废物的高效气化利用提供了理论支撑与模拟依据, 并为后续工艺优化与设备设计奠定了基础。

关键词: 阳离子交换树脂; ReaxFF-MD; 热解; 气化; 降解率

参考文献

- [1] Li B.Y.; Chen M.Q. *J. Anal. Appl. Pyrol.* 2023, **173**: 106089.
- [2] Li B.Y.; Chen M.Q. *J. Environ. Chem. Eng.* 2024, **12**: 114116.
- [3] 宋琦. 放射性废树脂流化裂解和核素矿化包容技术研究. 浙江大学, 2021.
- [4] Scheithauer D.; Heschel W.; Meyer B.; et al. *J. Anal. Appl. Pyrol.* 2017, **124**: 276-284.

Dynamic properties of methanol confinement in OMC and Ph-PMO pores investigated by QENS

Liu Hongyan^{1,*}, Yongquan Zhou¹, Chai Keke², Yamaguchi Toshio^{1,3,**}

¹ Key Laboratory of Comprehensive and Highly Efficient Utilization of Salt Lake Resources, Key Laboratory of Salt Lake Resources Chemistry of Qinghai Province, Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xining, Qinghai, 810008, China

² University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

³ Department of Chemistry, Faculty of Science, Fukuoka University, Nanakuma, Jonan, Fukuoka, 814-0180, Japan

*Email: lhy@isl.ac.cn, **Email: yamaguch@fukuoka-u.ac.jp

We utilized the quasi-elastic neutron scattering (QENS) to measure the dynamic properties of methanol confined in ordered microporous carbon (OMC) and periodic mesoporous organosilica (PMO) materials with the phenyl groups embedded in silica matrix (Ph-PMO) at 255 K - 315 K, and a comparative analysis was conducted with the dynamic properties of water molecules confined in same conditions. The QENS spectra were analyzed using a jump-diffusion model showed the fit quite well with this model. The half-width at half-maximum (HWHM) obtained through jump-diffusion model fitting decrease as temperature decreasing suggest a slow diffusive motion (Figs. 1a and 1d). For methanol confined in Ph-PMO (30 Å) the diffusion rate progressively slow down, and larger than those of methanol confined in OMC (18.7 Å) as shown in Figs. 1b and 1e indicated that the diffusion rate of methanol in confined materials is not only dependent on the inherent properties of the pores but also strongly correlated with the pore diameter^[1]. For ethanol, same as water^[2], we found evidence for immobile and mobile fractions of the confined liquid by analyzing the EISF (Figs. 1c and 1f).

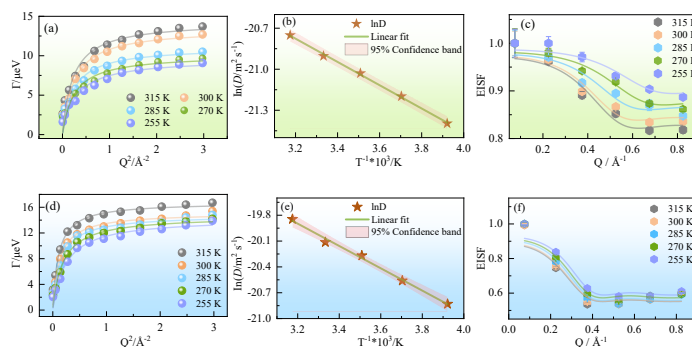


Fig. 1 The HWHM (ball) of the QENS spectra for methanol confined in OMC and Ph-PMO at 315, 300, 285, 270, and 255 K (a,d), the solid lines indicate a nonlinear fitting. Arrhenius plot of diffusion constants of methanol molecules confined in OMC (b) and Ph-PMO (e), the solid lines indicate a linear fitting. EISF for methanol at various temperatures measured in OMC (c) and Ph-PMO pores (f), the solid lines represent fits to the EISF model.

Keywords: Mesoporous/microporous materials; Quasielastic neutron scattering; Confined methanol; Dynamic properties

References

- [1] Aso M.; Ito K.; Sugino H.; Yoshida K.; Yamada T. *Pure Appl. Chem.* 2012, **85**: 289.
- [2] Liu H. Y.; Jing Z. F.; Zhou Y. Q.; Yamaguchi T. *J. Mol. Liq.* 2024, **415**: 126316.

基于晶格-表面分级氢键策略提升 HNIW 的热稳定性研究

宋晓敏¹, 金波², 彭汝芳², 徐金江^{1,*}, 孙杰^{1,*}

¹ 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川绵阳, 621900

² 西南科技大学材料与化学学院, 四川绵阳, 621010

*Email: xujinjiang@caep.cn, sunjie@caep.cn

六硝基六氮杂异伍兹烷 (HNIW, 又称 CL-20) 是目前已知能量水平最高的单质含能材料, 在推进剂和炸药配方等领域具有广阔前景。然而, HNIW 在应用中面临的关键挑战之一是其热稳定性不足, 受到热刺激时易发生晶型转变, 对结构稳定性和安全性能产生影响, 这限制了其在高温环境下的长期储存和安全使用。本研究提出了一种基于晶格-表面的分级氢键策略, 旨在维持炸药高能量的同时有效提升其热稳定性, 实现炸药综合性能的全面优化。通过主客体策略在炸药晶格中嵌入 N₂O 构建了晶胞嵌入式的 HNIW/N₂O 主客体炸药, 显著提升了炸药晶体的热稳定性和能量特性。同时, 使用聚乙烯亚胺 (PEI) 和聚吡咯 (PPy) 表面涂层建立炸药与聚合物之间的氢键相互作用进一步提高热稳定性和安全性能, 并通过分子动力学 (MD) 计算进行佐证。受益于分级氢键相互作用, HNIW/N₂O@PEI 和 HNIW/N₂O@PPy 复合材料展现出优异的性能整合, 包括高爆轰性能 ($D_v=9802$ m/s, $P=45.1$ GPa)、低机械感度 ($IS>20$ J, $FS>140$ N) 和增强的相稳定性 ($T>203$ °C)。另外, 活化能 (E_a) 的大幅度提升也验证了复合含能材料中炸药热稳定性的显著增强。这种双路径优化策略可为先进含能材料的开发提供了一种可拓展的方法, 也为多功能材料的设计提供重要见解。

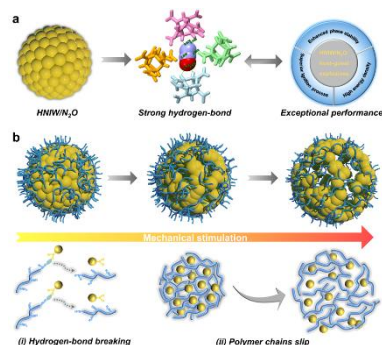


图 1 (a) N₂O 的晶格嵌入促进了炸药晶体的强氢键和优异性能, (b) PEI 分子对 HNIW/N₂O 的表面脱敏。

关键词: HEDMs; 热稳定性; 分级氢键; 双路径优化

参考文献

- [1] Xu J.; Zheng S.; Huang S.; Tian Y.; Liu Y.; Zhang H.; Sun J. *Chem. Commun.* 2019, **55**: 909-912.
- [2] Ding R.; Xu J.; Tao Y.; Sun J.; Lei, M. *J. Phys. Chem. A.* 2020, **124**: 6389-6398.
- [3] Song X.; Huang Q.; Jin B.; Peng R. *Appl. Surf. Sci.* 2021, **558**: 149933.
- [4] Song X.; Zhang H.; Jin D.; Huang S.; Sun J.; Xu J. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* 2024, **16**: 52264-52276.
- [5] Song X.; Jia D.; Sun S.; Sun X.; Zhang H.; Huang S.; Gou H.; Sun J.; Xu J. *Chem. Eng. Sci.* 2025, **313**: 121742.

生物基复合纳米纤维的热分析动力学研究与 Ai 运用设想

董美麟^{1,2}, 刘浩^{1,2}, 王昉^{1,2*}

¹ 南京师范大学 分析测试中心, 南京, 210023

² 南京师范大学 化学与材料科学学院, 南京, 210023

*Email: wangfang@njnu.edu.cn

研究天然高分子材料的体外酶降解和热分解机理对复合高分子材料的设计、制备及其在包装材料、生物学中的稳定性应用具有重要的指导意义。本文采用零级动力学和一级动力学研究丝素-聚乳酸复合材料的降解过程; 通过热重分析法探讨了聚乳酸/丝素纳米纤维复合材料的热降解过程和机理, 利用 Flynn-Wall-Ozawa 法、Kissinger-Akahira-Sunose 法、Achar 法和 Coats-Redfern 法计算热降解过程的热力学参数。研究表明, 所制备的复合比例的丝素-聚乳酸材料更符合一级动力学模型; 乙醇处理后的材料降解速率减慢、半衰期延长、稳定增强; 在 450~600K 的热降解温度范围内, 两种方法计算的平均活化能 $E_a=123.5\text{KJ/mol}$, 最佳动力学模型为 $G(\alpha) = \alpha$ 和

$f(\alpha) = 1$, 其中 $\ln A=35.6$ 。

我们认为, Ai 与热分析的结合运用可以推动复合纳米材料的研究: 第一, 可构建反向传播神经网络(BPNN)模型, 采用相关系数(R^2)、均方根误差(RMSE (均方根误差))和平均绝对误差(MAE (平均绝对误差))来评价人工神经网络模型的性能, 实现对生物基复合纳米纤维热行为的快速评估; 第二, 可借鉴人工神经网络 (ANN), 对复合材料分子晶型温度和焓变的预测, 也可采用多层感知器前馈(Feed Forward, MPL)模型, 实现对材料热稳定性的高效预测。推动生物基复合纳米纤维研究迈向新高度。

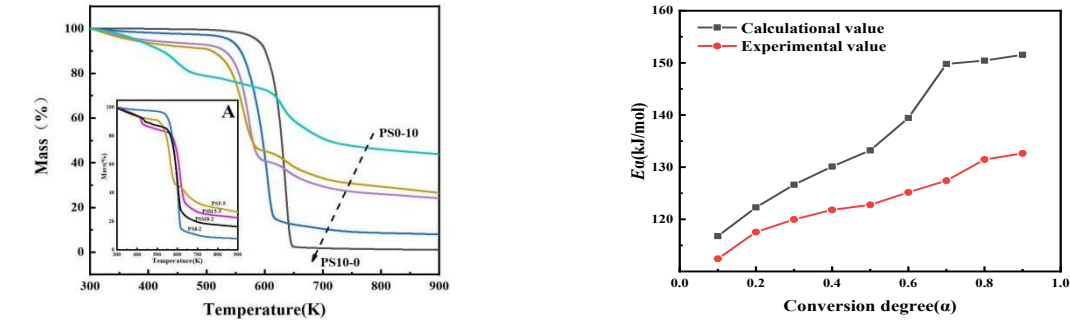


图 1 表示不同质量比 PS 复合纳米纤维的 TG 曲线 (左), 和 PS8-2 的实验活化能 $E_{a,e}$ 和理论活化能 $E_{a,c}$ (右)。

关键词: 复合纳米纤维; 热分解动力学; 聚乳酸; Ai运用; 降解动力学

参考文献

- [1] Wu M.; Li H.; Wang L.; Feng S.; Wang Y.; Yang N.; Wang K.; Yu M. Fuel, 2024, 359.
- [2] Magalhães M.A.; Souza A.V.; Brentan M.B.; et al. Fluid Phase Equilibria, 2025, 590: 1142 83-114283.

离子液体对天然丝蛋白的溶解性研究

罗震^{1,2}, 林平^{1,2}, 王昉^{1,2*}

¹ 南京师范大学 分析测试中心, 南京, 210023

² 南京师范大学 化学与材料科学学院, 南京, 210023

*Email: wangfang@njnu.edu.cn,

近年来, 离子液体因其独特的绿色可回收性、可设计、可调性以及独特的理化性质, 在先进的生物组织、医药和能源材料领域显示出广阔的应用前景。我们的研究表明, 丝素蛋白在离子液体中的溶解是一个放热的、有序的、非自发的现象, 且溶解过程受到所用离子液体中阴、阳离子种类的显著影响, 尤其是含 1-乙基-3-甲基[EMIM]⁺的离子液体, 它与丝素蛋白分子的相互作用更为显著, 导致 β -sheet 结构含量增加, 增强了再生丝素膜的拉伸能力和热稳定性。此外, 含醋酸根(Ac⁻)的离子液体表现出卓越的细胞相容性。这些发现为制备性能优良的再生丝素膜, 开发新型生物材料提供了重要参考。

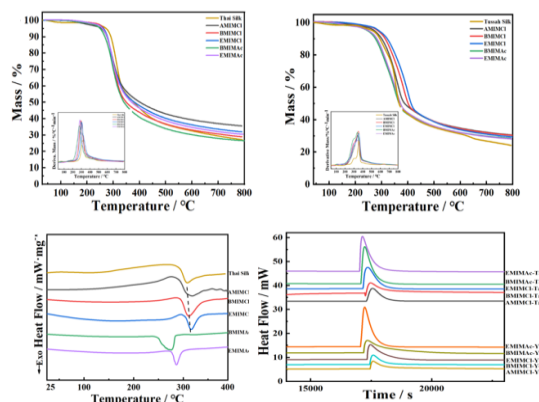


图 1 家蚕和野蚕丝素不同离子液体条件制备下的热分析曲线

关键词: 丝素基; 离子液体; 溶解性; 生物材料

参考文献

- [1] Wang H.Y.; Wei Z.G.; Zhang Y.Q. *Int. J. Biol. Macromol.*, 2020, **143**: 594-601.
- [2] Deng Q.; Wang,F.; Gough C. R.; Hu, X. *Int. J. Biol. Macromol.* 2022, **197**: 55-67.
- [3] Heng H.;Deng Q.; Yang Y.; Wang F. *Int. J. Mol. Sci.*, 2022, **23**: 8706.
- [4] Wang F.; Sheng S.J.; Ge X.F.; Huang H.Y.; Ma Q.Y. *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2019, **135**: 2849–2856.

基于去卷积的多步反应动力学求解方法

杨遂军*, 王亦可, 叶树亮 **

中国计量大学 计量测试与仪器学院, 浙江 杭州, 310018

*Email: yangsuijun@cjl.u.edu.cn, **Email: itmt_paper@126.com

当反应过程包含多个重叠的反应步骤时,传统热动力学分析方法往往难以准确求解各步骤的动力学参数。本文针对多步反应的动力学参数求解问题,提出基于去卷积的动力学参数求解方法。首先,利用Fraser-Suzuki函数对反应曲线进行去卷积^[1,2],将重叠的复杂峰系拆解为若干独立的子反应峰,并据此明确各步反应的峰形特征。在此基础上,采用Friedman^[3]等转化率方法分别计算各反应步骤的活化能,并通过活化能波动幅度是否小于20%判断去卷积获得的子反应是否可视为单步反应过程^[4],以此评价去卷积的分离效果。进一步利用Master Plots^[5,6]方法将实验数据与多种传统理论机理函数进行匹配,求解子反应的机理函数 $f(\alpha)$,并结合Friedman方法求解的 $A\alpha f(\alpha)$ 值,计算获得子反应过程的指数前因子 $A\alpha$ 。最后,利用求解的动力学参数,预测了样品在多升温速率条件下的反应曲线,并与实验中获得的相应曲线进行了对比,预测反应曲线与实验曲线均高度吻合,可准确描述样品反应过程中转化率随温度的变化关系。研究表明,基于去卷积的热动力学分析方法有效解决了多步反应体系中动力学参数求解困难的问题,为复杂反应机理研究与模型构建提供了新的技术路径和理论支撑。

关键词: 热分析动力学; 多步反应; 去卷积; 等转化率方法

参考文献

- [1] Perejón A.; Sánchez-Jiménez P. E.; Criado J. M.; et al. *J. Phys. Chem. B*, 2011, **115**: 1780-1791.
- [2] Svoboda R.; Málek J. *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2013, **111**: 1045-1056.
- [3] Friedman H. L. *J. Polym. Sci. C: Polymer Symposia*, 1964, **6**: 183-195.
- [4] Vyazovkin S.; Burnham A. K.; Favergeon L.; et al. *Thermochimica Acta*, 2020, **689**: 178597.
- [5] Málek J. *Thermochimica Acta*, 1992, **200**: 257-269.
- [6] Ozawa T. *Thermochimica Acta*, 1986, **100**: 109-118.

含锂钠沉锂母液体系热力学性质研究

王佳祺*, 郭亚飞**, 邓天龙**

海洋资源化学与食品技术教育部重点实验室, 天津市卤水化工与资源生态化利用重点实验室, 海洋与环境学院, 天津科技大学, 天津, 300457

*Email: 1812905814@qq.com, **Email: guoyafei@tust.edu.cn and tldeng@tust.edu.cn

锂已成为新世纪战略能源金属, 在能源材料、电池技术及化工生产等领域具有广泛的应用价值^[1], 而沉锂母液作为锂盐生产过程中的关键中间产物, 其热力学性质的研究对优化生产工艺、提高锂资源利用率具有重要意义。沉锂母液是一种以氯化钠为主、锂钠共存的饱和水盐溶液, 其中Li含量约为1-2g/L, 而Na⁺含量高达50-60g/L, 具有典型的高钠低锂特征^[2]。构建热力学模型, 可为实现沉锂母液中碱的回收利用提供共性的相平衡基础数据^[3]。为解决高钠锂比沉锂母液中锂与碱高效回收、绿色分离及资源化利用的技术瓶颈, 本研究以盐湖沉锂母液为对象, 系统开展288.15 K下含锂钠多组分体系的热力学基础实验与理论模型构建。采用等压法、量热法开展不同浓度含碳酸锂盐水溶液体系热力学性质研究。采用量热法分别测定Li₂CO₃二元体系稀释热, (Li₂CO₃ - Li₂SO₄ - H₂O)、(Li₂CO₃ - LiCl - H₂O)三元体系的混合热; 采用等压法测定(Li₂CO₃ - Li₂SO₄ - H₂O)、(Li₂CO₃ - LiCl - H₂O)三元体系的渗透系数、水活度。根据Pitzer离子相互作用模型, 拟合获得三元体系及其子体系的Pitzer单盐参数和混盐参数。研究结果可为高钠锂比沉锂母液绿色分离工艺的设计与优化提供可靠的热力学依据, 支撑我国盐湖锂资源高效开发与“双碳”战略目标的实现。

关键词: 沉锂母液; 等压法; 量热法

参考文献

- [1] Litasov K.; Shatskiy A.; Podborodnikov I.; et al. *Carbon Earth Inter.* 2020, **132**: 137-165.
- [2] Liu P.; Mo L.; Zhong J.; et al. *Cem. Concr. Compos.* 2024, **149**: 105524.
- [3] Herterich J.; Richardson I.; Moro F.; et al. *Cem. Concr. Res.* 2022, **152**: 106643.

钴镍双金属配合物的构建及其催化高氯酸铵热分解性能

张绢*, 彭汝芳, 金波**

西南科技大学, 四川省绵阳市涪城区西南科技大学, 621000

*Email: 1004361577@qq.com, **Email: jinbo0428@163.com

本研究通过原位取代法合成了异双金属配合物 Ni-Co-pzdc (2,3-吡嗪二羧酸), 并以其为牺牲模板制备了 N 掺杂的 Ni-Co-pzdc 衍生物。采用一系列表征手段研究了所得材料的形貌与结构特征, 并分别通过与 AP 均匀混合研究了两种产物的热分解行为, 同时利用 Kissinger 法、Kissinger-Akahira-Sunose (KAS) 法和 Flynn-Wall-Ozawa (FWO) 法计算了其活化能。结果表明, 这两种物质均具有优异的催化活性。

Construction of cobalt–nickel bimetallic coordination polymers and their catalytic thermal decomposition of ammonium perchlorate

Juan Zhang^{1,*}, Rufang Peng², Bo Jin^{1,**}

The addition of a catalyst to ammonium perchlorate (AP) can effectively improve its thermal decomposition properties. The heterobimetallic complex Ni-Co-pzdc (2,3-pyrazinedicarboxylic acid) was synthesized via in situ substitution, and the N-doped Ni-Co-pzdc derivative was prepared by using it as a sacrificial template. A series of characterization tools were used to investigate the morphological and structural features of the resulting materials, and the thermal decomposition behaviors of the two products were investigated by homogeneous mixing with AP, respectively, and the activation energies were calculated by using Kissinger, Kissinger-Akahira-Sunose (KAS), and Flynn-Wall-Ozawa (FWO), and the results showed that both substances possessed excellent catalytic activities.

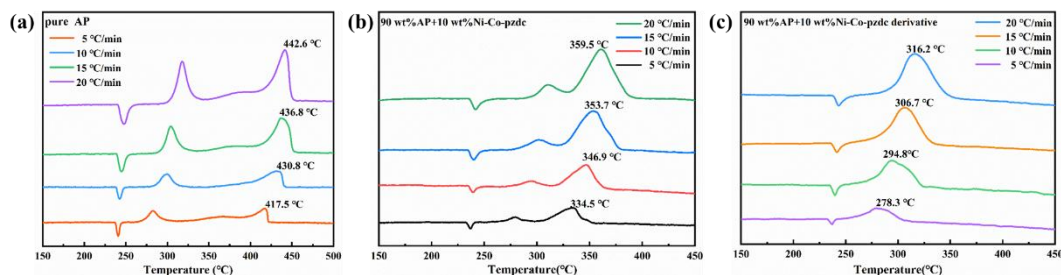


图 1 纯 AP、Ni-Co-pzdc 及其衍生物催化的 AP 在不同升温速率下的 DTA 曲线

关键词: 双金属配合物; N-掺杂; 高氯酸铵; 热分解

Isothermal thermal decomposition and mechanism of CL-20/TNT cocrystal energetic materials

Peng Huan, Liqiong Luo, Peng Rufang*, Bo Jin*

State Key Laboratory of Environment-friendly Energy Materials, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China;

* E-mail: jinbo0428@163.com; rfpeng2006@163.com

The isothermal decomposition process of CL-20/trinitrotoluene (TNT) cocrystal energetic material was studied using the isothermal thermal decomposition method. The gas pressure produced by the decomposition of CL-20/TNT cocrystal energetic material and its mixture was measured at 443–463 K under isothermal conditions. An inflection point ($\alpha = 55\%$) was found on the pressure-time curve of the CL-20/TNT cocrystal, whereas no inflection point existed in the mixture curve. The kinetic parameters and reaction mechanism function were obtained through calculation. When the decomposition degree of CL-20/TNT cocrystal was 55 %, the thermal decomposition of CL-20/TNT cocrystal conformed to the mechanism function model 25, namely, Mampel power rule; that is, the E_a was 205.0 kJ·mol⁻¹. The mixture of CL-20 and TNT conformed to the mechanism function model 28; that is, the reaction order was $n=1/4$, and the E_a was 169.0 kJ mol⁻¹. FT-IR and SEM were used to characterize and analyze the residues at different decomposition degrees. Results showed that the CL-20/TNT cocrystal decomposition was a coordinated process of CL-20 and TNT, and the decompositions of CL-20 and TNT affected each other. The decomposition rate of the mixture is faster than that of the CL-20/TNT cocrystal. Moreover, the CL-20/TNT cocrystal formation can improve the system's thermal stability to a certain extent.

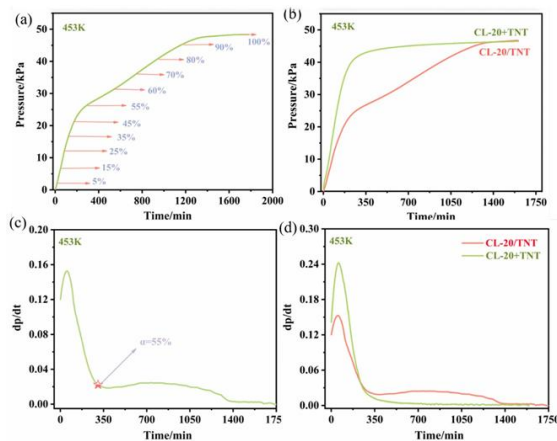


Fig. 1 (a) P - t curve of CL-20/TNT cocrystal; (b) P - t curves of CL-20, TNT cocrystal, and their mixtures; (c) CL-20/TNT cocrystal pressure-time differential curve; (d) pressure-time differential curves of CL-20, TNT cocrystal, and their mixtures.

Keywords: CL-20/TNT cocrystal, Isothermal decomposition, Kinetics

Phase equilibria and phase diagrams for the aqueous salt system of calcium-containing Fly Ash water washing

Haixia Liang*, Yang Ge, Fei Yuan, Tianlong Deng**, YaFei Guo**

Tianjin University of Science and Technology, Tianjin,300457

*Email: 1467565802@mail.tust.edu.cn, **Email: tldeng@tust.edu.cn; guoyafei@tust.edu.cn

With the rapid increase of urban domestic waste, to promote the resource utilization of fly ash fter waste treatment aqueous washing liquid, especially the separation and purification of inorganic salts,the study was conducted based on the phase diagram of the water-salt system.The properties of near-water systems (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} // Cl^- - $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ - H_2O) and their subsystems at 298.15 K and 338.15 K were determined using the isothermal dissolution equilibrium method,the main conclusion is as follows:

The solubility of the quaternary zero variable point of the near-water system at 298.15 K and 338.15 K will decrease with the increase of ethanol concentration. In different systems, the solubility of a single salt is affected by the concentration of ethanol, and the downward trend varies. After the liquid-phase material is evaporated to dryness, the dry basis mass fraction of calcium chloride in the solid-phase material can meet the national standard requirements for industrial anhydrous calcium chloride,indicates the addition of ethanol can effectively enhance the purity of CaCl_2 .

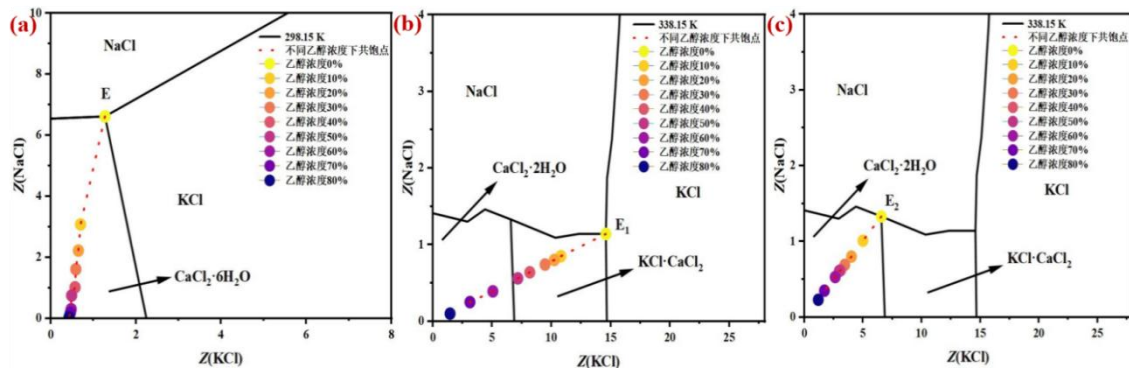


Fig. 1 Phase diagram of the quaternary univariate point of the near-aqueous system (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} // Cl^- - $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ - H_2O) with different ethanol concentrations

(a) At 298.15 K (b) The univariate point E_1 at 338.15 K (c) The univariate point E_2 at 338.15 K

Keywords: Fly ash washing liquid; Near-aqueous system; Phase equilibrium and phase diagram

Reference

- [1] Zhang F.; Zeng Y.; Yu X.; et al. *J. Chem. Eng. Data*, 2024, **69**: 1740-1746.
- [2] Guo X.; Yang X.; Shang Y. M.; et al. *Fuel*, 2024, **372**: 132130.
- [3] Gu S. S.; Li H. R.; Sun K. R.; et al. *J. Chem.*, 2023, **2023**: 9296099.

Epitaxy-mediated transformation to ice VI and XII from unreported ices

Xuan Zhang*, Minglin Wu, Kenji Mochizuki**

Department of Chemistry, Zhejiang University, Hangzhou, 310028, P. R. China

*Email: kenji_mochizuki@zju.edu.cn

水具有20余种晶体形态和2种非晶形态，呈现出丰富的多态性。然而其非晶态的转化机制仍鲜为人知：加热低/高密度非晶冰时，随升温速率和压力改变^[1]，它们既能转化为稳定冰晶（Ih、III、V、VI），也能形成亚稳态冰晶（IX、IV、XII）。其中，冰IV与IX难以从液态水中结晶——为何它们能在非晶态中自发成核？

近日，本团队在模拟中发现在氢有序冰Ih的压力诱导非晶化过程中伴随着一种未报到的氢有序晶相（冰M），其与非晶态的混合物进而可以转化为冰XII^[2]。这表明冰M可能在非晶冰结晶的过程中起到关键作用，其中的机制尚不明确。此外，在实验中冰VI和冰XII可以在相同压力下从非晶态中结晶^[1]，而冰VI的形成过程尚未在模拟中观察到过。

本项目通过分子动力学模拟揭示了氢无序的冰M（冰Md）的(001)晶面诱导冰XII生长的机制；以及其(210)晶面诱导冰VI生长的机制，在此过程中观察到了一种新晶相冰Md2的形成。本研究表明可能存在于非晶态冰种的冰M具有诱导冰XII与冰VI形成的能力。这些发现将为理解非晶冰的结构提供新的角度。

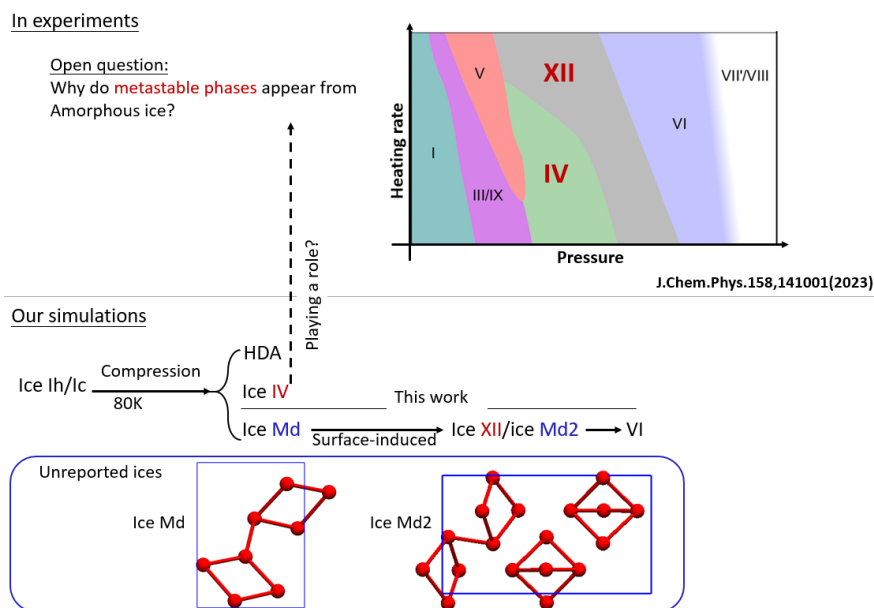


图 1. 冰Md界面诱导成核揭示无定形冰的结晶过程.

关键词：晶体生长；分子动力学模拟；水

参考文献

[1] Tonauer C. M.; et al., *J. Chem. Phys.* 2023, **158**: 141001.

[2] Mochizuki K. *J. Phys. Chem. C*, 2024, **128**: 18582-18587.

Thermodynamic insights into the synergistic inhibition of theaflavin and caffeic acid on the formation of AGEs

Lixia Yuan, Min Liu*

Shandong Key Laboratory of Applied Technology for Protein and Peptide Drugs, Institute of BioPharmaceutical Research, Liaocheng University, Liaocheng, 252059

*Email: panpanliumin@163.com

The accumulation of advanced glycation end products (AGEs) has been implicated in the pathogenesis of various chronic diseases, including cardiovascular disease, diabetes, and esophageal cancer [1]. Therefore, identifying effective strategies to inhibit AGEs formation is crucial. Previous studies have demonstrated that individual or combined consumption of coffee and tea can reduce the risk of AGEs-related diseases and mitigate their progression [2]. Our research identified caffeic acid (CA), a major bioactive component in coffee, as a potent inhibitor of AGEs in fructose (Fru)-induced human serum albumin (HSA) [3]. However, the potential combined effect of CA and theaflavin (TA, a key polyphenol in tea) on AGEs formation remains unclear. In this study, fluorescence spectroscopy revealed a maximum synergistic effect ($SE = 1.25$) when CA and TA were combined at equimolar concentrations (0.2 mM). This finding was further corroborated by scanning electron microscopy and assays of carbonyl and thiol contents. To elucidate the inhibitory mechanism, the interactions between HSA and individual or combined CA and TA were also investigated using a series of spectroscopic techniques. Based on the analysis of binding information (**Figure 1A**) and antioxidant activity (**Figure 1B**), occupying the binding sites of Fru on HSA and scavenging the radicals were the main inhibitory mechanisms of CA and TA on AGEs, respectively. Furthermore, the conformational changes during the glycation and binding were also monitored using circular dichroism spectroscopy and dynamic light scattering. In summary, CA and TA demonstrate an inhibitory effect on AGEs by hindering the reaction of Fru with HSA and scavenging free radicals generated during glycation. Their combination exhibits a synergistic effect ($1 + 1 > 2$), which significantly improves the inhibitory ability on AGEs compared to the individual components. These findings provide a basis for developing CA and TA-based functional foods or therapeutic agents targeting AGEs-associated diseases.

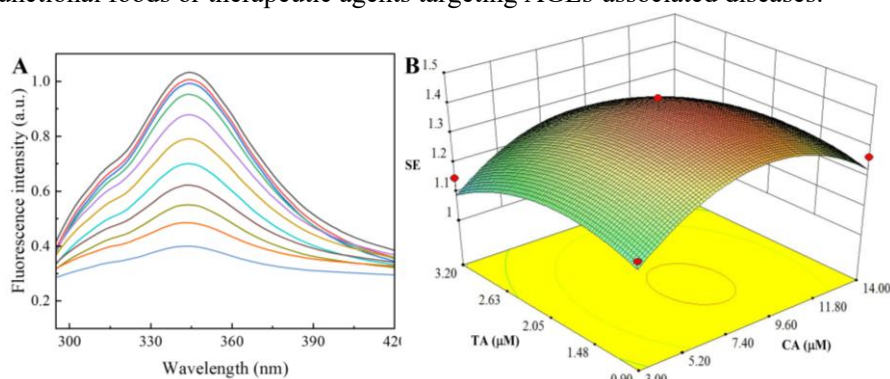


Fig. 1. (A) Effect of TA on the fluorescence emission spectra of HSA in the presence of CA at 298.2 K. (B) 3D surface chart of the influence of different concentrations of TA and CA on the SE.

Keywords: Synergistic effect; Interaction; AGEs; Caffeic acid; Theaflavin

References

- [1] Reimann B.; Sleurs H.; Alfano R.; et al. *Environ. Res.* 2025, **284**: 122229.
- [2] Chen Y.C.; Zhang Y.; Zhang M.N.; Yang H.X.; Wang Y.G. *BMC Med.* 2022, **20**: 449.
- [3] Zhang Y.Q.; Yuan L.X.; Liu M. et al. *J. Mol. Liq.* 2024, **415**: 126322.

新型季铵盐双硼酸作为 pH 响应性糖类受体的热力学研究

赵文琦¹, 刘慧丹¹, 姚美焕¹, 白光月^{1,*}, 王玉洁^{2,**}

¹ 河南师范大学化学化工学院, 新乡, 453007

² 河南科技学院化学化工学院, 新乡, 453003

*Email: baiguangyue@htu.cn, **Email: yujiewang2001@163.com

单糖是构成各种功能性聚糖的基元分子, 因此寻找对密切相关的结构类似物具有高选择性的单糖识别受体至关重要^[1-2]。然而, 所有单糖分子都含有许多具有不同空间取向的羟基, 这使得准确识别单糖变得更加困难。因此, 构建对单糖具有高选择性的人工识别系统仍然是相关科学领域的一个重要挑战。芳基硼酸能够与 1,2-二醇或 1,3-二醇分子形成具有环酯结构的可逆共价复合物, 基于硼酸衍生物的结构多样性可提供更专一性的单糖受体^[3-4]。在芳基硼酸家族中, 二芳基硼酸在糖或其他多羟基分子的识别、反应和功能交联方面最引人注目, 但应进一步努力优化二芳基硼酸受体的结构和性质使其更适合与目标的单糖结合。

在本研究中, 我们设计了一种带有乙基间隔基的双(间苄基铵)硼酸(BTEAB)。不同于其他具有刚性荧光基团间隔基的二芳基硼酸分子, BTEAB 具有一个柔性的间隔基并且在水溶液中具有良好的 pH 响应的荧光性质。偶联的季铵盐和短间隔基使得 BTEAB 在水溶液中具有优异的溶解性, 并具有低于苯硼酸母体的 pK_a 值。在此基础上, 采用等温滴定量热(ITC)、NMR、UV-vis、荧光等方法多维度地研究了 BTEAB 与三种典型单糖(果糖、葡萄糖和半乳糖)相互作用的热力学机制和结合常数, 为二芳基硼酸基单糖识别受体的应用提供更加深入的认识。

关键词: 芳基硼酸; 结合常数; 酸离解常数; pH响应性; 等温滴定量热

参考文献

- [1] Williams G.; Kedge J.; Fossey J. *ACS Sensors*, 2021, **6**: 1508.
- [2] Nan K.; Jiang Y.; Li M.; Wang B. *Biosensors*, 2023, **13**: 618.
- [3] Hansen J.; Christensen J.; Petersen J. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2012, **161**: 45.
- [4] Fang G.; Wang H.; Bian Z.; Sun J. *RSC Advances*, 2018, **8**: 29400.

致谢: 感谢国家自然科学基金(基金编号: 22173027; 21773059)的经费支持。感谢河南师范大学绿色化学介质与反应教育部重点实验室和河南省精细化学品绿色制造协同创新中心的支持。

多官能度端羟基三氟烷氧基聚合物的合成及其固化性能研究

张庆元, 金波*, 彭汝芳**

环境友好能源材料国家重点实验室, 材料与化学学院, 西南科技大学, 四川绵阳, 621010

*jinbo0428@163.com **rfpeng2006@163.com

复合推进剂配方中除了含能材料作为基体外, 还含有大量铝粉作为燃料, 在燃烧过程中由于一些原因存在热值损失, 影响推进剂的能量释放。研究表明, 加入含氟黏结剂可以促进含能材料配方中铝粉的燃烧, 提高热值, 从而获得更大的能量。结合含氟聚合物的相关优势, 本课题以三氟烷氧基缩水甘油醚为环氧单体, 三羟甲基丙烷为扩链引发剂, 在三氟化硼乙醚的催化下通过阳离子开环反应合成多官能度端羟基三氟烷氧基缩水甘油醚预聚物; 在对端羟基预聚物羟值测定结果的基础上, 通过添加不同比例的多亚甲基多苯基多异氰酸酯进行固化得到一系列固化配方, 对新合成的预聚物和固化配方进行红外、核磁、凝胶渗透色谱等表征测试, 证明了预聚物的成功合成并确定其相应的结构。

通过差示扫描量热测试, 对热流曲线进行外推从而确定了预聚物及其固化试样的玻璃化转变温度, 结果显示获得的固化试样玻璃化转变温度虽然略高于异氰酸酯固化试样, 但不同配方下的玻璃化转变温度均低于 -40°C , 说明其具备优异的低温力学性能。随着固化用量的增加, 玻璃化转变温度有一定升高, 说明固化剂的增加限制了弹性体中软链段的运动性能, 而硬链段对性能的影响逐渐明显, 从而提高力学性能。

结合热重分析测试表明: 两种固化弹性体在 200°C 前并未发生明显失重, 之后随着聚氨酯链段结构的分解, 在 360°C 后达到最大分解速率, 说明固化弹性体具有较好的热稳定性。

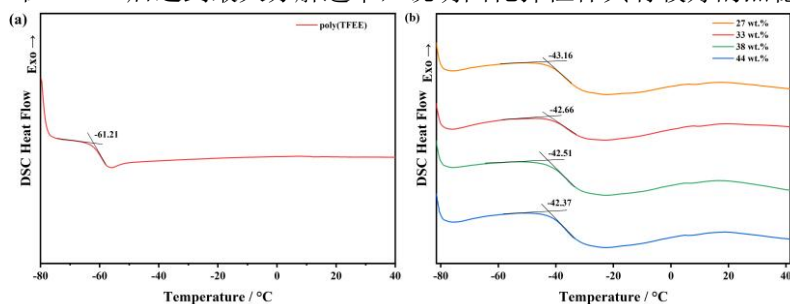


图 1 (a)端羟基预聚物和(b)异氰酸酯固化弹性体的 DSC 热流曲线

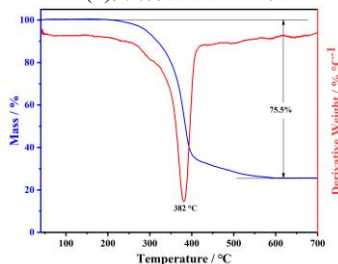


图 2 异氰酸酯固化弹性体的 TG-DTG 曲线

关键词: 含氟聚合物; 固化弹性体; 玻璃化转变温度; 热稳定性

参考文献

- [1] Adams G.F.; Shaw Jr. R.W. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 1992, **43**: 311–340.
- [2] Zhang T.; Liu H.; Shuai J.; et al. *J. Fluor. Chem.*, 2021, **249**: 109861.
- [3] Jin B.; Shen J.; Gou X.; et al. *Polymers*, 2016, **8**: 10.
- [4] Zhang Q.; Chen J.; Jin B.; et al. *Macromol. Res.*, 2023, **31**: 699–709.
- [5] Zhou Y.; Zhang Q.; Peng R.; et al. *Polym. Adv. Technol.*, 2024, **35**: e6409.

Investigation of volumetric properties and ion-interaction parameters in the ternary system ($\text{NaNO}_3 + \text{CsNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$) and its sub-systems at different temperatures

Jiaqi Wang^{*}, Fei Yuan, Tianlong Deng^{}, Yafei Guo^{**}**

State Key Laboratory of Bio-based Fiber Materials, Key Laboratory of Marine Resource Chemistry and Food Technology (TUST) in Ministry of Education, College of Chemical Engineering and Materials Science at Tianjin University of Science and Technology, Tianjin, 300457.

*Email: 1812905814@qq.com, **Email: guoyafei@tust.edu.cn and tldeng@tust.edu.cn

In this study, the densities of the ternary system ($\text{NaNO}_3 + \text{CsNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$) and its sub-systems ($\text{NaNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$) and ($\text{CsNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$) were measured with an accurate digital vibration tube densitometer from 283.15 to 363.15 K at an interval of 5 K. The thermal expansion coefficient α , the apparent molar volume V_ϕ , and the partial molar volume V of the ternary system are calculated. The salt parameters ($\beta_{\text{MX}}^{(0)v}$, $\beta_{\text{MX}}^{(1)v}$, and C_{MX}^v , $\text{MX} = \text{NaNO}_3$ and CsNO_3) were obtained. These results contribute to understanding the physicochemical properties of NaNO_3 (aq) and CsNO_3 (aq) containing solutions, which is crucial for solving the problem involving separating and purifying sodium nitrate and cesium nitrate from decomposition solutions.

Keywords: Density; Sodium nitrate; Cesium nitrate; Apparent molar volume; Pitzer ion interaction

五元体系 $\text{Li}^+, \text{Na}^+//\text{Cl}^-, \text{SO}_4^{2-}, \text{HCO}_3^- - \text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ 相平衡研究

王询¹, 华祎¹, 王云青¹, 孟令宗^{1*}, 邓天龙², 郭亚飞²

¹ 临沂大学化学化工学院, 山东临沂, 276000

² 天津科技大学化工与材料学院, 天津, 300457

*Email: menglingzong@lyu.edu.cn

我国盐湖工业生产碳酸锂过程中得到大量的沉锂母液, 沉锂母液高钠富锂, 如何回收沉锂母液中锂成为盐湖锂工业亟待解决的问题。通过向沉锂母液中通入 CO_2 , 将碳酸盐体系转变为碳酸氢盐体系, 利用锂和钠的碳酸盐和碳酸氢盐溶解度及其随温度变化的差异显著, 可实现碱的回收和锂的富集^[1,2]。本文研究了具有碳酸化沉锂母液卤水组成特征的五元体系 $\text{Li}^+, \text{Na}^+//\text{Cl}^-, \text{SO}_4^{2-}, \text{HCO}_3^- - \text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ 在 333.15 K 和 CO_2 压力为 0.3 MPa 条件下的固液相平衡研究, 获得了该体系溶解度数据, 并绘制了相图。该体系存在 5 个零变量点和 9 条单变量溶解度曲线, 五个固相结晶区 $\text{LiCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 、 NaHCO_3 、 NaCl 、 LiNaSO_4 和一个饱和液相区 LiHCO_3 。其中 NaHCO_3 结晶区面积最大, 表明其溶解度最小; 而 $\text{LiCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ 结晶区面积最小, 溶解度最大。随着溶液中碳酸氢根含量的增多, 溶液中的水含量、钠含量以及溶解的二氧化碳均增长, 当复盐 LiNaSO_4 或含水盐 $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 从溶液中分离出来时水的含量急剧下降。在 298.15、313.15 和 333.15 K 的相图对比中发现, NaHCO_3 始终占据主要结晶区, 而 LiHCO_3 液相区面积随温度升高而增大, 硫酸钠盐溶解度随温度升高先增后降。温度升至 333.15 K 时, 低温下生成的复盐如 $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot 3\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ 在高温下消失^[3]。本研究可为沉锂母液中锂的分离提取提供基础热力学数据。

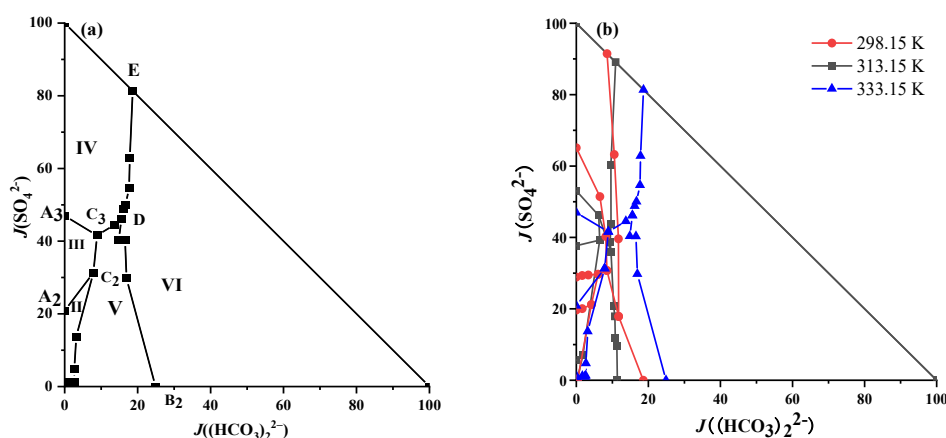


图 1 $\text{Li}^+, \text{Na}^+//\text{Cl}^-, \text{SO}_4^{2-}, \text{HCO}_3^- - \text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ 体系干盐相图

(a) 333.15 K 干盐图; (b) 298.15 K、313.15 K 和 333.15 K 的对比相图

关键词: 相平衡; 溶解度; 碳酸氢锂; 碳酸氢钠; 沉锂母液

参考文献

- [1] Mamontov M. N.; Gorbachev A. V. *J. Chem. Thermodyn.*, 2021, **154**: 106334.
- [2] Zhang L.; Li L.; Rui H.; Shi D.; Song X. *J. Hazrd. Mater.*, 2020, **398**: 122840.
- [3] 马金秋. 碳酸化卤水体系 $\text{Li}^+, \text{Na}^+//\text{Cl}^-, \text{HCO}_3^-, \text{SO}_4^{2-} - \text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ 在 313.15 K 相平衡研究. 临沂大学, 2023.

* 国家自然科学基金 (U21A20299) 和山东省自然科学基金 (ZR2024MB115) 的联合资助。

含能材料熔体结晶动力学

任晓宁^{1,2}, 胡文兵², 刘子如¹

¹西安近代化学研究所, 含能材料全国重点实验室, 陕西西安, 710065,

²南京大学化学化工学院, 江苏南京, 210023)

Email: xueyexy@163.com

含能材料作为一类关键材料主要用于武器系统, 获得理想动力与能量。含能材料熔体结晶动力学服务于武器装药结构调控和性能优化。本文阐述了典型含能材料结晶动力学特征, 旨在促进含能材料发展和热分析技术应用。

关键词: 含能材料; 结晶动力学; 热分析

参考文献

- [1] 胡文兵, 高分子结晶学原理, 化学工业出版社, 2013
- [2] 刘子如, 含能材料热分析, 国防工业出版社, 2008

含碳酸铯卤水体系热力学性质的等压法研究

徐佳, 王询, 林如意, 李丹, 孟令宗*, 马勇

临沂大学化学化工学院, 山东临沂, 276000

*Email: menglingzong@lyu.edu.cn

稀有碱金属元素铯, 以其特有的化学活性和优良的电化学性能成为不可或缺的工业重金属之一^[1], 固体铯矿资源开发生产成本高, 环境污染大, 液态铯资源成为未来开发热点^[2]。卤水体系的热力学性质和热力学模型研究可为卤水资源的开发提供基础数据。本文采用等压法测定了三元体系 $\text{K}_2\text{CO}_3\text{--Cs}_2\text{CO}_3\text{--H}_2\text{O}$ 在 323.15 K 的热力学性质, 获得了体系的渗透系数和水活度数据。采用 Pitzer 电解质溶液理论和 Harvie-Weare 公式^[3], 结合本文测定的渗透系数, 拟合了三元体系中碳酸铯等的 Pitzer 参数 (包括单盐参数($\beta^{(0)}$ 、 $\beta^{(1)}$ 和 $C^{(e)}$)和混合离子作用参数 (θ 和 Ψ)。根据拟合的参数, 结合溶解平衡常数, 构建了 $\text{K}_2\text{CO}_3\text{--Cs}_2\text{CO}_3\text{--H}_2\text{O}$ 三元体系的 Pitzer 化学模型。采用该模型计算了体系的水活度, 计算值与实验值吻合较好。本文关于 $\text{K}_2\text{CO}_3\text{--Cs}_2\text{CO}_3\text{--H}_2\text{O}$ 体系的化学模型的研究可为构建复杂的含碳酸铯卤水体系的热力学模型提供基础数据, 为卤水中铯的提取提供基础的热力学数据。

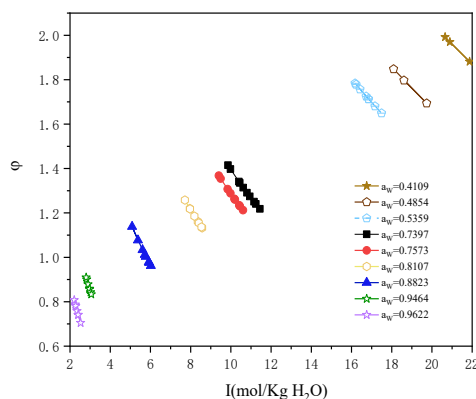
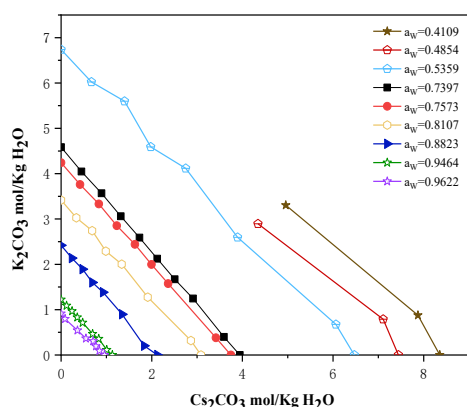


图 1 $\text{K}_2\text{CO}_3\text{--Cs}_2\text{CO}_3\text{--H}_2\text{O}$ 体系 323.15 K 等水活度图 图 2 $\text{K}_2\text{CO}_3\text{--Cs}_2\text{CO}_3\text{--H}_2\text{O}$ 体系 323.15 K 渗透系数图

关键词: 溶解度; 热力学性质; 相平衡; 碳酸铯

参考文献

- [1] Shi M. S.; Chen S. Q.; Hu J. Y.; Guo Y. F.; Deng T. L. *J. Chem. Eng. Data.* 2020, **65**: 1396.
- [2] Chen S. Q.; Hu J. Y.; Han S. J.; Guo Y. F.; N. Belzile.; Deng T. L. *Sep. Purif. Technol.* 2020, **251**: 117340.
- [3] Zhang T.; Yang L.; Li D.; Meng L. Z.; Guo Y. F.; Deng T. L. *J. Chem. Thermodyn.* 2021, **158**: 106446.

* 国家自然科学基金 (U21A20299) 和山东省自然科学基金 (ZR2024MB115) 的联合资助。

碳酸铯溶液多温体积性质研究

王云青, 韩佳欣, 李丹, 孟令宗*, 马勇

临沂大学化学化工学院, 山东临沂, 276000

*Email: menglingzong@lyu.edu.cn

铯作为重要的战略储备资源, 主要分布在我国青藏高原的盐湖卤水中^[1], 虽然液态铯资源储量丰富, 但其纯度低, 组分复杂, 给铯资源的分离提取带来很大的困难^[2], 而相关铯体积性质的研究可以为青藏高原盐湖卤水高效分离提取提供基础数据。本研究采用密度法^[3], 测定了二元体系 $\text{Cs}_2\text{CO}_3\text{-H}_2\text{O}$ 在温度区间 288.15 K ~ 363.15 K (间隔 5 K)、质量摩尔浓度范围为 0.1203 ~ 1.2026 $\text{mol}\cdot\text{kg}^{-1}$ 条件下的密度。并根据经验公式, 计算得到了所研究的二元体系在不同温度和浓度下的热膨胀系数以及表观摩尔体积。分别绘制了密度、热膨胀系数与质量摩尔浓度的关系图。由图 1 可知, 相同温度下, Cs_2CO_3 溶液的密度与浓度呈正相关变化规律; 同一浓度下, 密度随着温度的升高而减小, 这是由于温度升高, 溶液体积膨胀, 密度减小。如图 2 所示, 当温度为 288.15 ~ 313.15 K 时, 随着 Cs_2CO_3 溶液质量摩尔浓度的增加, 热膨胀系数略有增加; 当 $T \geq 313.15$ K 时, 热膨胀系数随着浓度的增加而减小。在恒定浓度下, 高温热膨胀系数明显大于低温热膨胀系数。同时基于 Pitzer 模型和表观摩尔体积数据, 采用最小二乘法首次拟合得到了 Cs_2CO_3 在不同温度下的 Pitzer 单盐参数及参数与温度关联式。本文对铯体积性质的研究可以为盐湖卤水的分离和提取提供基础数据, 有助于卤水中铯的提取。

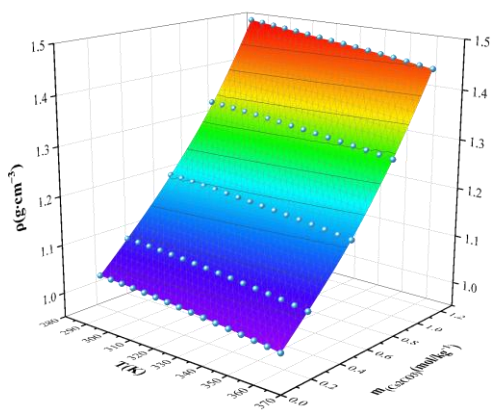


图 1 二元体系 ($\text{Cs}_2\text{CO}_3\text{-H}_2\text{O}$) 密度系数随温度和质量摩尔浓度变化关系

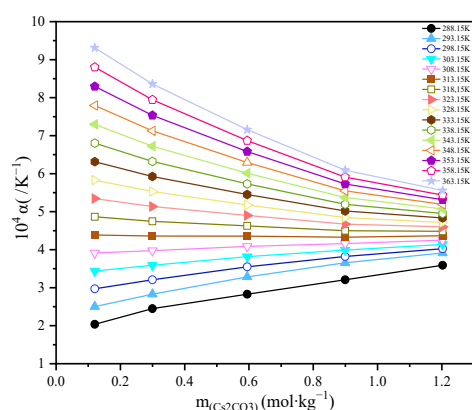


图 2 二元体系 ($\text{Cs}_2\text{CO}_3\text{-H}_2\text{O}$) 热膨胀系数随温度和质量摩尔浓度变化关系

关键词: 碳酸铯; 密度法; Pitzer模型; 热膨胀系数; 卤水

参考文献

- [1] Sun K. R.; Zheng H.; Guo Y. F.; Meng L. Z.; Deng T. L. *J. Chem. Thermodyn.* 2020, **144**: 105976.
- [2] Ge H. W.; Wang M. *J. Chem. Thermodyn.* 2022, **166**: 106690.
- [3] Wang J. Q.; Wei D.; Yan L.; Yuan F.; Liu D.; Han H.; Guo Y. F. *Thermochim. Acta.* 2025, **751**: 180065.

含铯碳酸盐卤水体系热力学性质的量热法研究

韩佳欣, 王云青, 马勇, 李丹, 孟令宗*

临沂大学化学化工学院, 山东临沂, 276000

*Email: menglingzong@lyu.edu.cn

我国铯资源分布具有显著地域特征, 其中液态铯资源主要蕴藏于青海、西藏的盐湖及地热水域。尽管盐湖铯储量丰富, 但受限于铯浓度偏低、成分复杂、易与钠、钾、铷等性质相近的碱金属共生, 给铯的高效提取与分离带来极大挑战^[1]。不同形态含铯碳酸盐的焓、熵、吉布斯自由能等关键热力学参数长期存在数据空白, 而这些参数的精准测定, 既是构建完善的盐湖含铯碳酸盐化学理论体系的核心要素^[2], 更是推动我国盐湖资源科学化、高效化开发利用的重要前提。本研究借助 CC-196 微量热计, 系统测定了 $\text{Cs}_2\text{CO}_3(\text{aq})$ 在两个温度下的稀释热: 一是 298.15 K、101.325 kPa 时, 浓度范围为 0.0824 mol/kg 至 1.7662 mol/kg; 二是 323.15 K、101.325 kPa 时, 浓度区间为 0.0397 mol/kg 至 0.3801 mol/kg。通过实验获取了碳酸铯在上述温度下的表观摩尔焓, 进一步基于 *Debye-Hückel* 极限公式^[3], 计算出 $(\text{Cs}_2\text{CO}_3 + \text{H}_2\text{O})$ 二元体系的相对表观摩尔焓, 绘制了相对表观摩尔焓与摩尔浓度的关系图; 经线性拟合得到 $\text{Cs}_2\text{CO}_3(\text{aq})$ 在不同温度下浓度与表观摩尔焓的关系式, 并计算出溶质和溶剂的相对偏摩尔焓, 有效填补了含铯碳酸盐体系热力学基础数据的空白。深入分析 298.15 K 和 323.15 K 下 $\text{Cs}_2\text{CO}_3(\text{aq})$ 的表观摩尔焓值发现: 298.15 K 与 323.15 K 条件下, $(\text{Cs}_2\text{CO}_3 + \text{H}_2\text{O})$ 二元体系的表观摩尔焓随质量摩尔浓度的变化规律具有区别性: 随着溶液浓度逐渐增加, 298.15 K 下 Cs_2CO_3 溶液的表观摩尔焓均呈减小趋势, 且减小速率随浓度升高逐步减缓; 323.15 K 则呈现相反的趋势。本论文研究成果可为揭示含铯碳酸盐卤水体系的热力学行为提供基础数据。

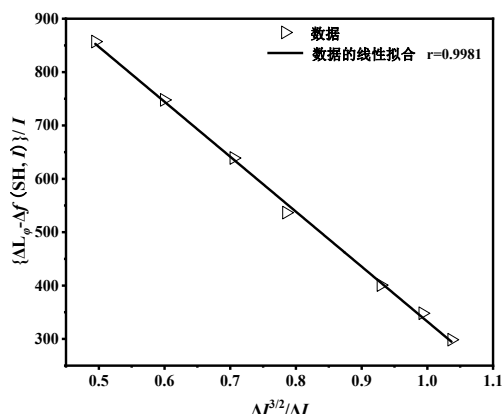


图 1 Cs_2CO_3 在 298.15 K 下 $\{L - f(\text{S}_H, D)\}/I$ 和 $\Delta f^{3/2}/\Delta I$ 线性关系图

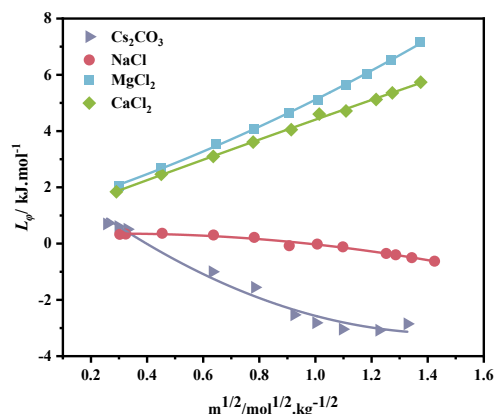


图 2 Cs_2CO_3 、NaCl、 MgCl_2 和 CaCl_2 在 298.15 K 下相对表观摩尔焓和浓度关系图

关键词: 碳酸铯; 稀释热; 量热法; 热力学性质; 表观摩尔焓

参考文献

- [1] Fan Y.F.; Li D.D.; Gao D. D.; Zeng D. W.; Li W. J. *Chem. Thermodyn.*, 2020, **142**: 106001.
- [2] 袁菲, 李华, 李珑, 郭亚飞, 王世强, 邓天龙. 中国科学: 化学, 2022, **52**: 752-757.
- [3] Yuan F., Li L., Guo Y. F., Deng T. L. *Thermochimica Acta*, 2020, **685**: 178506.

* 国家自然科学基金 (U21A20299) 和山东省自然科学基金 (ZR2024MB115) 的联合资助。

硼酸结晶动力学研究

綦泓宇, 王询, 马勇*, 孟令宗*

临沂大学化学化工学院, 临沂, 276000

*Email: mayong@lyu.edu.cn; menglingzong@lyu.edu.cn

硼酸作为盐湖卤水中的重要资源, 提高硼酸晶体的纯度对资源高效利用至关重要。本工作通过系统实验和理论分析, 探究高纯硼酸结晶动力学机制, 指导优化结晶路径。采用激光透射装置、显微镜、X射线衍射等方法, 研究了硼酸结晶的影响因素。结果表明: 硼酸介稳区宽度随饱和温度升高而增大, 成核幂级数提高, 结合显微镜观察图, 得到了高温下成核更易但晶体控制困难的结论; 在中等饱和温度下, 晶体生长缓慢但粒度较大、形态规则。低饱和度区表面张力较低, 高饱和度区表面张力升高, 且饱和温度上升导致表面张力增加, 表明硼酸非表面活性物质但在高温下结构变化显著。低含量的 Na^+ 以及 Mg^{2+} 使其诱导期缩短, 杂质离子的浓度上升时, 介稳区宽度增大, 进而导致了溶液表面张力的增大, 显微镜观察显示的晶体从形状比较规则变为大小不一、形状不规则的晶体, 表明杂质离子吸附提高了结晶能垒。本研究通过动力学参数 (如成核幂级数、表面张力) 和热力学模型拟合, 揭示了硼酸结晶规律, 为盐湖卤水高纯硼酸提取提供了理论依据。

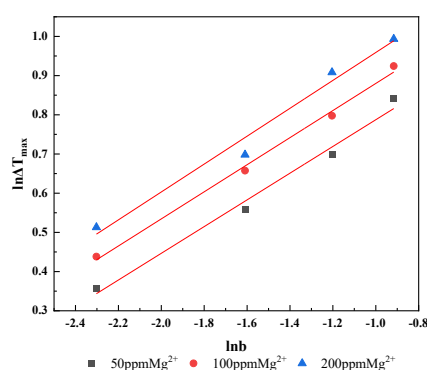
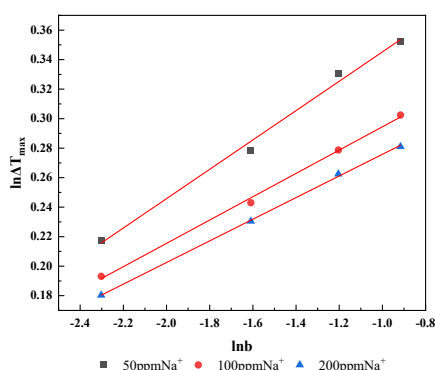


图 1 含不同浓度钠离子的饱和硼酸介稳区宽度拟合图 图 2 含不同浓度镁离子的饱和硼酸介稳区拟合图

关键词: 硼酸; 结晶动力学; 介稳区; 诱导期; 盐湖卤水

参考文献

- [1] Zhang X.Y.; Wang X.; Lin H. *Crys. Res. Technol.*, 2012, **47**: 1153-1163.
- [2] Buchfink R.; Ulrich J. *Chem. Eng. Technol.*, 2011, **34**: 505-509.
- [3] Nyvlt J. *J. Cryst Growth*, 1968, **3**: 377-383.
- [4] Sahin Ö.; Nusret B. A. *Crys. Res. Technol.*, 2003, **38**: 47-55.
- [5] Peters B. *J. Cryst. Growth*, 2011, **317**: 79-83.
- [6] Sangwal K. *J. Cryst. Growth*, 2010, **312**: 3316-3325.

* 国家自然科学基金 (U21A20299) 和山东省自然科学基金 (ZR2024MB115) 的联合资助。

纳米燃烧催化剂对 CL-20 热分解性能影响

肖立柏^{1*}, 高红旭¹, 付青山¹, 张洋¹, 裴庆¹, 牛诗尧¹, 赵凤起¹, 周忠岳²

¹ 西安近代化学研究所 含能材料全国重点实验室, 陕西西安, 710065

² 上海交通大学 机械与动力工程学院, 上海, 200240

*Email: lbxchem@163.com

现代武器的发展对固体推进剂的研发提出了更高的要求, 固体推进剂的燃烧性能和燃速高低直接影响火箭发动机的弹道性能、飞行速度和工作稳定性等^[1,2]。目前, 燃速催化剂的应用已成为调节推进剂燃烧性能的最有效的方法之一。六硝基六氮杂异伍兹烷 (CL-20) 是一种高能量密度含能材料, 其密度、爆热、爆压、爆速等输出性能显著高于环三亚甲基三硝胺 (RDX)、环四亚甲基四硝胺 (HMX) 等现役高能炸药, 是固体推进剂性能提升必选材料之一^[3,4]。通过纳米燃烧催化剂与CL-20 (质量比1:10) 在乙醇/水中研磨制备了纳米燃烧催化剂/CL-20复合物, 利用DSC方法研究了CL-20和不同纳米燃烧催化剂/超细CL-20复合物在不同升温速率下的热分解行为, 采用Kissinger法计算了CL-20和不同纳米燃烧催化剂/超细CL-20复合物的热分解动力学参数。结果表明, 燃烧催化剂纳米CuO、纳米PbO和纳米 β -Cu的加入均降低了CL-20热分解反应的表观活化能, 其中纳米PbO催化效果最明显, 使CL-20热分解的活化能降低了37.2 kJ/mol; 燃烧催化剂纳米 β -Pb和纳米 ϕ -Pb的加入均增加了CL-20热分解反应的表观活化能, 其中纳米 β -Pb使CL-20热分解的活化能增加最多, 活化能增加了60.1 kJ/mol。结合DSC热分解曲线, 发现纳米无机金属催化剂的催化CL-20热分解效果强于有机金属盐。

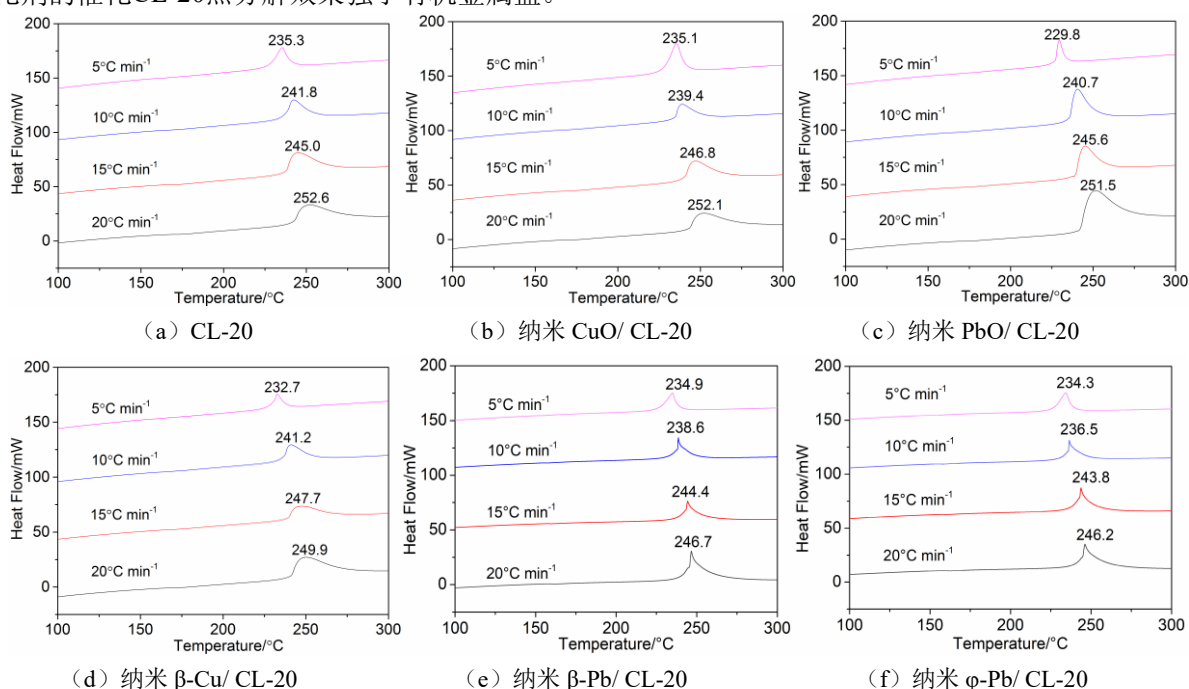


图1 含不同燃烧催化剂的 CL-20 热分解 DSC 曲线

关键词: CL-20; 纳米燃烧催化剂; 热分解; 动力学

参考文献

- [1] Liao X.; Liu J.; Sun M.; Liu H.; Cheng Z. *Combust. Sci. Technol.*, 2024, **196**: 5128-5143.
- [2] Abdelall A.; Lin G. *Combust. Sci. Technol.*, 2021, **193**: 40-59.
- [3] Zhang P.; Guo X.; Zhang J.; Jiao Q. *J. Energ. Mater.*, 2014, **32**: 278-292.
- [4] Bayat Y.; Mokhtari J.; Farhadian N.; Bayat M. *J. Energ. Mater.*, 2012, **30**: 124-134.

rGO as a photosensitizer to enhance the laser initiation performance of energetic complexes

Ping Qin*, Liqiong Luo**

Southwest University of Science and Technology, Mianyang, China, 621010

*Email: 2166738400@qq.com, **Email: llq112321@163.com

Laser initiation technology is favored for its safe initiation method, while near-infrared(NIR) wavelength lasers are widely used due to their low cost and miniaturization. $[\text{Pb}_3(\text{OBTT})_2]_n$ (OBTT = 4,5-bis(1-hydroxytetrazol-5-yl)-2H-1,2,3-triazole) cannot be effectively initiated by the laser energy of NIR lasers because its main optical absorption band is in the visible and ultraviolet regions. To address this issue, this study used rGO(reduction graphene oxide) as a photosensitizer for laser sensitization, with GO(graphene oxide) as a comparison, and the mass addition fraction of both is 0.5%. Due to the addition of rGO, the laser initiation threshold of the $[\text{Pb}_3(\text{OBTT})_2]_n$ decreased from 600 mJ to 186 mJ, and the ignition delay time decreased from 100.3 ms to 31.32 ms. However, GO could't improve the laser initiation performance of the $[\text{Pb}_3(\text{OBTT})_2]_n$ under the same test conditions. In terms of mechanical desensitization, the addition of rGO increased the impact sensitivity of the $[\text{Pb}_3(\text{OBTT})_2]_n$ from 3 J to 42 J, and GO could also improve the mechanical sensitivity of the $[\text{Pb}_3(\text{OBTT})_2]_n$.

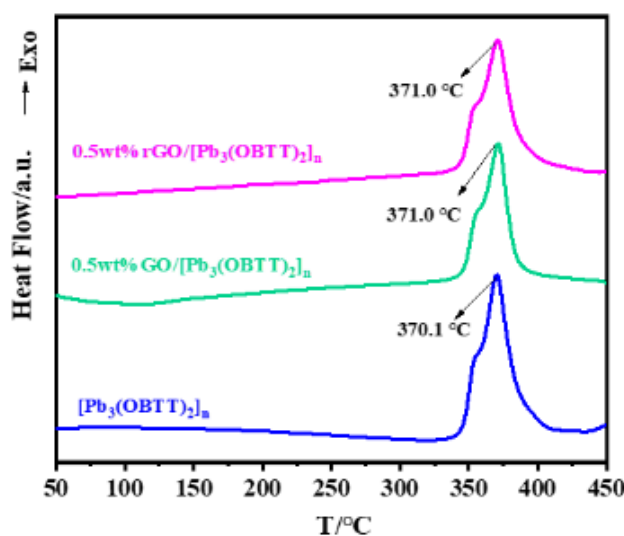


Fig. 1 The DSC curves of $[\text{Pb}_3(\text{OBTT})_2]_n$, 0.5wt%GO/ $[\text{Pb}_3(\text{OBTT})_2]_n$ and 0.5wt%rGO/ $[\text{Pb}_3(\text{OBTT})_2]_n$

Key Words: Photosensitizer; Energetic complexes; Laser Initiation; rGO

References

- [1] Luo L.; Hao W.; Guo Z., Deng H. *Inorg. Chem.*, 2022, **61**: 16248-16255.
- [2] 冯长根, 刘柳, 覃文志, 周阳. 兵工学报, 2020, **41**: 2347-2361.

双金属配合物的制备及其催化高氯酸铵热分解性能研究

吴红, 彭汝芳, 金波

西南科技大学环境友好型能源材料国家重点实验室, 四川 绵阳 621010

Email: 3258663665@qq.com

高氯酸铵 (AP) 是固体推进剂的主要成分之一, 其扮演着氧化剂和释放能量的重要角色。但是, AP 的燃烧分解通常存在着放热慢、放热不集中的问题, 影响固体推进剂的发展需求。添加燃烧催化剂能够有效改善 AP 热分解性能, 制备催化活性高的燃烧催化剂是极为重要的。双金属配合物具有独特的电子结构、金属间协同作用能够提高催化活性, 能从分子层级分散金属活性中心, 是一类极具潜力的燃烧催化剂。本文以多齿羧酸、硝酸铅和氢氧化钾为原料, 通过水热法制备出了两种新型双金属 AP 燃烧催化剂 $[\text{KPb}_2(\text{TATAB})_2]$ 、 $[\text{KNi}_2(\text{TATAB})_2]$ 。采用单晶 X 射线衍射、粉末 X 射线衍射等方法证实配合物的结构。采用差示扫描量热仪、热重分析、差热分析研究了其热稳定性。采用差热分析研究了不同升温速率下, 两种 MOF 对 AP 的催化行为研究, 并对其反应活化能进行了计算。



Fig.1 Preparation process diagram

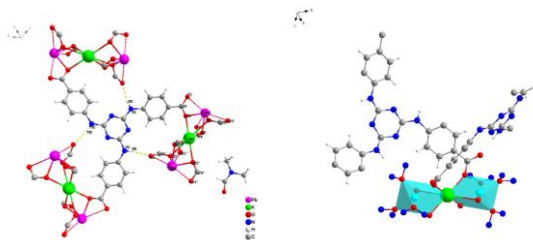


Fig. 2 (a) Coordination diagram of $\text{KPb}_2(\text{TATAB})_2$; (b) Coordination diagram of $\text{KNi}_2(\text{TATAB})_2$

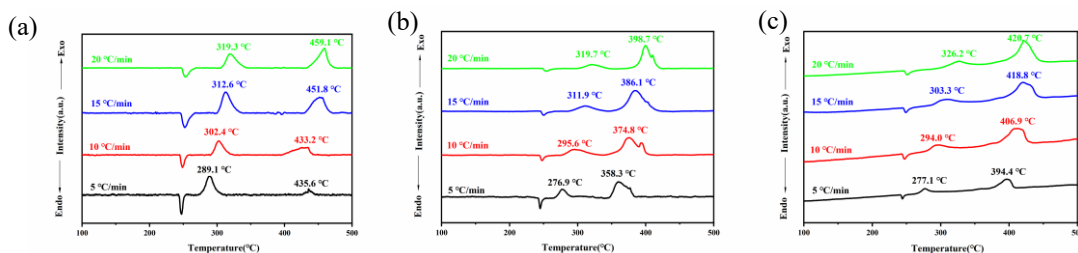


Fig. 3 (a) DTA curves for different heating rates of pure AP; (b) DTA curves for different heating rates of $\text{AP}+\text{KPb}_2(\text{TATAB})_2$; (c) DTA curves for different heating rates of $\text{AP}+\text{KNi}_2(\text{TATAB})_2$

关键词: 双金属; AP; 催化; 热分析

参考文献:

- [1] Mchale E. T. Combust. Flame, **1975**(24): 277-279.
- [2] Babushok V. I.; Linteris G. T.; Hoorelbeke P.; et al. Combust. Sci. Technol., 2017, **189**: 2039-2055.

不同粒度六硝基六氮杂异伍兹烷热解规律和热解机理

高红旭^{1,*}, 肖立柏¹, 付青山¹, 张洋¹, 赵凤起¹, 周忠岳², 郝嘎子³, 裴庆¹

¹ 西安近代化学研究所 含能材料全国重点实验室, 陕西西安, 710065

² 上海交通大学 机械与动力工程学院, 上海, 200240

³ 南京理工大学 国家特种超细粉体工程技术研究中心, 江苏南京, 210094

*Email: gaohx204@163.com

六硝基六氮杂异戊兹烷 (HNIW, 俗称CL-20) 是迄今为止能量和密度最高的含能化合物。采用美国TA公司的SDT Q600型TG/DSC同步热分析仪测试不同粒度的超细CL-20的热分解, 获得粒度对CL-20热解的影响规律, 同一升温速率下随着粒径的减小, 放热峰温提前, 200-500 nm的CL-20的比表面积大, 其与外界的有效接触面积大, 同等受热时间内能够比微米级CL-20吸收更多的外界能量, 从而提前达到引起自身热分解所需的温度, 进而表现为 T_p 值比微米级CL-20明显降低。采用原位大气压光电离质谱分析法对CL-20的初始热解产物进行了检测和分析, 压力范围0.1-15MPa, 温度高达1000℃, 分辨率达到10000m/ Δm 。该法不仅可以检测到小分子量产物 ($m/z < 100$) 还能够检测到多种大分子量的产物 ($450 > m/z > 100$)。这些大分子量的产物对应着母体分子较初级的热解产物。根据精确分子量分析, 分子量 $m/z \geq 155$ 的热解产物的分子式中均含有6个C, 与CL-20分子的C数相同, 仅涉及H、O、N数的变化, 说明这些产物为较初级的产物或中间体。

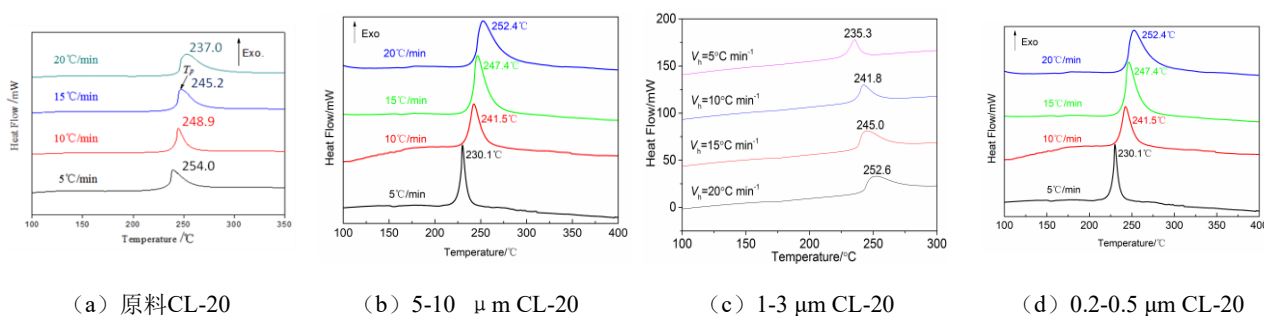


图1 微米级 CL-20 和超细 CL-20 在 5, 10, 15 和 20 °C·min⁻¹ 下的 DSC 曲线

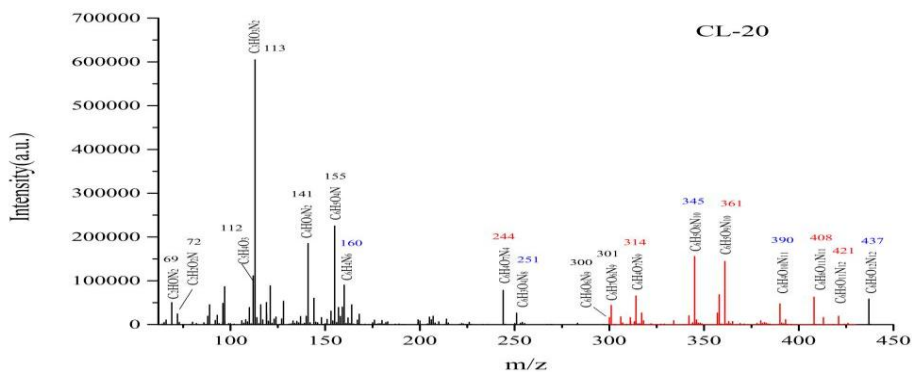


图2 CL-20初始热解产物的质谱图

关键词: 六硝基六氮杂异伍兹烷; 粒度; 热解规律; 热解机理

参考文献

- [1] Zhu Y.L.; Shan M.X.; Xiao Z.X.; Wang J.S.; Jiao Q.J. *Korean J. Chem. Eng.*, 2015, **32**: 1164-1169.
- [2] Kumar M.A.; Ashutosh P.; Vargeese A.A. *J. Phys. Chem. A*, 2019, **123**: 4014-4020.

聚对苯二胺安定剂的合成以及对硝化棉的热安定性能研究

盛婷^{1,*}, 赵杨^{1,*}, 金波^{2,**}

¹ 西南科技大学, 材料与化学学院, 四川, 绵阳, 621010.

² 西南科技大学, 国防学院, 四川, 绵阳, 621010.

*Email: 18780958357@126.com, **Email: jinbo0428@163.com

为保障硝化棉在长期储存和工业化生产下的安定性, 本研究首次将聚对苯二胺 (PpPD) 作为一种安定剂引入推进剂领域, 它与二苯胺 (DPA) 具有非常相似的结构。与硝化棉相比, 甲基紫试纸变色时间延长67min, VST测试放气量降低37%, 失重率降低了7.3%。添加PpPD后硝化棉热分解峰值温度向高温移动, 且仅有一个放热峰, 峰值温度差为1.7℃。与传统安定剂的安定性相比具有更高的安定性能。

In order to ensure the stability of nitrocellulose under long-term storage and industrial production, polyp-*p*-phenylenediamine (PpPD) was introduced into the propellant field as a stabilizer for the first time, which has a very similar structure to diphenylamine (DPA). Compared with nitrocotton, the discoloration time of methyl violet test strips was extended by 67 minutes, the outgassing volume of VST test was reduced by 37%, and the weight loss rate was reduced by 7.3%. After the addition of PpPD, the peak temperature of nitrocotton thermal decomposition moved to high temperature, and there was only one exothermic peak, and the peak temperature difference was 1.7℃. It has a higher stability performance compared to the stability of traditional stabilizers

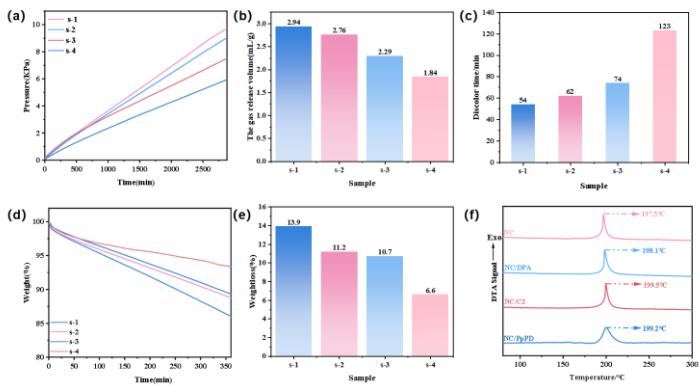


图 1.(a)PpPD 的 VST 压力变化曲线, (b)PpPD 气体释放体积, (c)PpPD 甲基紫测试变色时间, (d)PpPD 在 134.5℃下的等温热重曲线, (e)PpPD 在 134.5℃下 360 min 的失重率, (f)PpPD 与纯 NC 的 DTA 曲线。

表 1 聚对苯二胺的安定性检测结果

Stabilizers	discolouration time	Gas release volume	weightloss rates
None	56min	2.94mL/g	13.9%
DPA	62min	2.76mL/g	11.2%
C2	74min	2.29mL/g	10.7%
PpPD	123min	1.84mL/g	6.6%

关键词: 安定剂; 硝化棉; 热安定性

金属基微波点火药剂的开发及其微波点火燃烧性能研究

陈苏杭*, 陈小远, 徐抗震

西北大学化工学院/高能化学材料陕西省高校重点实验室, 西安, 710127

针对常用点火药微波点火时间长和金属粉微波吸收弱的难题, 引入介电性金属复合氧化物开发了 $n\text{-Ti/CuFe}_2\text{O}_4/\text{KClO}_4$ (10,20,30,40%) 和 $\text{AlTi@KP}(10,15,20\%)/\text{CuFe}_2\text{O}_4$ 钛基微波点火药, 在 Al 表面构造聚多巴胺(PDA)和含氟(PF)包覆壳层及硅烷偶联剂(APTES)引入化学键或静电吸附作用来引导高介电特性 CuFe_2O_4 在 Al 表面的锚定, 构造微波敏感型 $\text{Al@MFe}_2\text{O}_4$ 核壳富燃颗粒。开展了钛基和铝基微波点火药自催化性、点火特性、能量输出规律和微波点火机理研究, 结果表明: CuFe_2O_4 在钛基点火药中的实现氧化剂、催化剂和微波敏化剂三协同作用, 实现低点火潜伏期和优异的燃烧性能, $n\text{-Ti/CuFe}_2\text{O}_4/\text{KClO}_4$ 10% 在 64W 微波下点火延迟时间低至 6.34 ms, 计算得到 200 W 下的延迟时间低至 3.42 ms, 展现超低微波点火延迟, 燃烧性能和安全性能优于常规点火药。核壳结构和多组分的协同优化产生了非均匀界面和多重损耗机制, 提高了 Al 微波响应; APTES 增强的 $\text{Al/CuFe}_2\text{O}_4$ 提高了微波吸收, 将点火延迟降低到 23.41 ms; PF 分解引起的氟化反应和 PDA 分解引起的碳催化反应使燃烧速率提高了 327%; $\text{Al@CuFe}_2\text{O}_4$ 10% MCo_2O_4 在 64W 微波下点火延迟时间低至 12.36 ms。开展了钛基微波敏化剂的电场和温度场仿真, 解决了钛基微波敏化剂在微波点火过程中的换能和传质传热问题, 通过实验测试进一步揭示了 $n\text{-Ti}$ 介电加热换能和吸波氧化物 CuFe_2O_4 等的热击穿产生氧空位机理, 为固体推进剂、炸药等含能材料的微波敏化提供参考。

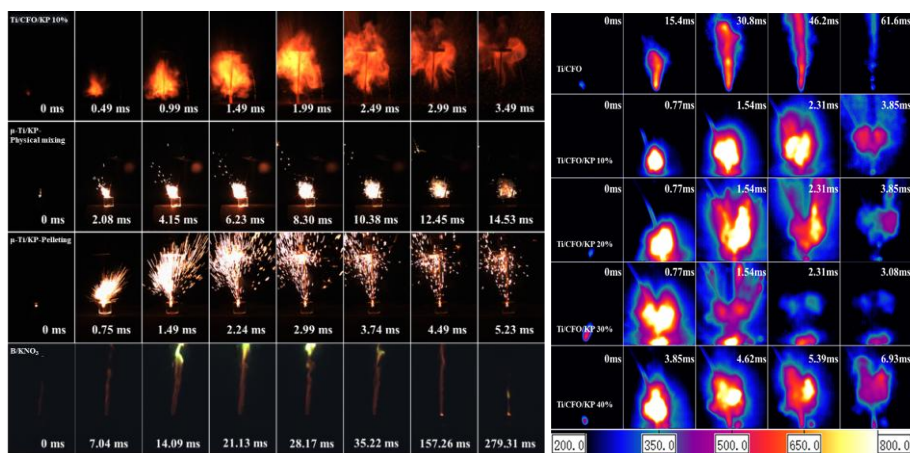


图 1 钛基微波点火药微波点火性能及火焰温度

关键词: 介电性金属复合氧化物; 微波点火药剂; 核壳结构

参考文献

- [1] Tang K.; Chen X.; Tang Z.; et al. *Ceram. Int.*, 2024, **50**: 29256-67.
- [2] Cheng J.; Zhang Z.; Li F.; et al. *Combust. Flame*, 2024, **260**: 113217.
- [3] Alibay Z.; Kline D. J.; Rehwoldt M. C.; et al. *Chem. Eng. J.*, 2021, **415**: 128657.

恒温环境滴定量热仪的研制

邓 斌^{1,*}, 李强国¹, 李传华¹, 李旭¹, 雷艳华¹, 董家新^{2,**}

¹ 湘南学院, 湖南 郴州, 423000

² 广西师范大学, 广西 桂林, 541006

*Email: dbhy88@yahoo.com.cn, **Email: djxchem@yahoo.com.cn

随着化学、生物化学、生命科学和药学等交叉学科的迅速发展, 滴定量热法的应用越来越广泛, 对精密滴定量热计的需求也越来越凸显。国外对等温滴定量热法的研究起步较早, 本世纪初, 美国学者就在中国申请了热导式等温滴定微测热计装置的发明专利。国内对滴定量热计的研制起步较晚, 迄今为止, 没有搜索到我国学者申请的滴定量热计发明专利, 也没有自主知识产权的商品化的滴定量热计。国内高校和科研院所现行使用的等温滴定量热计均是国外进口产品。为了促进我国化学、生物和医学领域的发展, 突破长期靠进口的技术瓶颈, 我们另辟蹊径先是开展了恒温环境滴定量热仪的研制, 如图1所示。用标准量热物质THAM与HCl的反应, 对恒温环境滴定量热装置进行了标定。经十次测量, 测得盐酸与THAM滴定的热电势随时间变化曲线, 如图2所示。并将实验结果与文献值进行比较(如图3所示)十分吻合, 说明该恒温环境滴定热量仪是可靠、可行的。然而, 该仪器无论是单位时间的测量效率, 还是在样品用量上都与市场现有等温滴定量热计存在差距。为了增强新开发仪器的市场竞争力, 我们在此基础上正在开发一种新型的滴定量热装置。

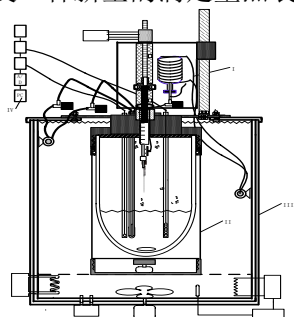


图1 恒温环境滴定量热仪示意图

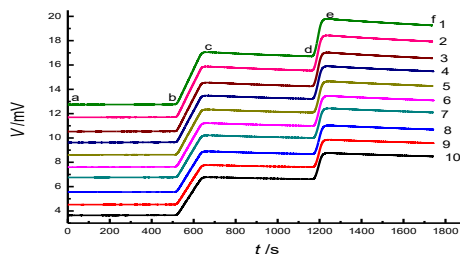


图2 盐酸对THAM滴定的热电势随时间变化曲线

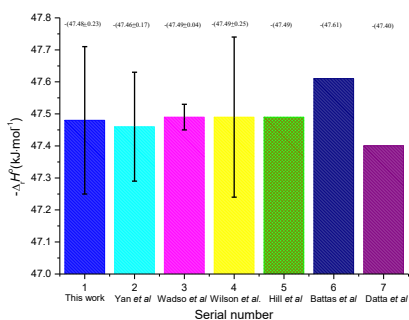


图3 盐酸和 THAM 的摩尔反应焓与文献值的比较

关键词: 滴定量热仪; 等温滴定量热仪; 恒温环境滴定量热仪

参考文献

- [1] 布罗加 M., 普里塞 P.F., 史密斯 S. 200980149081.9[P] 中国. 2009-12-01.
- [2] 阎海科, 杨冠英, 顾国兴等. 物理化学学报, 1991, 7: 613.

胆碱基氯化钙/镁水合盐 DES 的结构与传输性质

柴珂珂^{1,2*}, Toshio Yamaguchi¹, 刘红艳¹, 周永全^{1,**}

¹ 中国科学院青海盐湖研究所, 盐湖资源综合高效利用重点实验室, 西宁, 810008

² 中国科学院大学, 北京, 100049

*Email: kkchai@163.com, ** Email: yongqzhou@163.com

氯化胆碱(ChCl)和水合金属氯化物可以形成第二类低共熔溶剂(DES II), 由于其良好的热力学性质、电化学性质及高黏性在电化学、生物质预处理、超润滑剂等领域展现出广泛的应用前景。当前对胆碱基氯化钙/镁水合盐 DES 微观形成机制及其传输性质认识的不足限制设计制备新型 DES 以及拓宽 DES 应用领域。本工作采用“分子模拟轨迹逆向重构实验结构因子与多元实验散射数据驱动全原子建模”方法研究 ChCl-CaCl₂·6H₂O/MgCl₂·6H₂O DES 的微观结构, 结合密度泛函理论(DFT)计算、分子动力学(MD)模拟关联 DES 的结构与传输性质。研究发现 ChCl/3[CaCl₂·6H₂O]和 ChCl/1MgCl₂·6H₂O DES 中均存在 Cl⁻入侵 Ca²⁺/Mg²⁺的溶剂化层, 形成 [CaCl₃·4H₂O]⁻/[CaCl₃·3H₂O]⁻、[MgCl₃·3H₂O]⁻超卤钙/镁阴离子水合团簇, 同时释放 2~3 个 H₂O, 扩大了 Ca²⁺/Mg²⁺的溶剂化层, 进而限制 Ca²⁺/Mg²⁺的自扩散, 直接升高黏度, 降低电导率。Ca-Cl 离子缔合作用强于 Ca²⁺离子水合作用的逆转是 Cl⁻入侵 Ca²⁺的溶剂化层的内在驱动力, 而 Mg²⁺依然保持强水合作用, 这是 ChCl/MgCl₂·6H₂O DES 具有高黏性的关键因素。此外, 团簇分布显示, ChCl/3[CaCl₂·6H₂O]中的 H₂O 以大尺寸团簇为主, 而 ChCl/MgCl₂·6H₂O 中主要为单体 H₂O, 促使 ChCl/MgCl₂·6H₂O 中形成富 Z 键基序的链、环结构, ChCl/3[CaCl₂·6H₂O]中形成富 H 键异质结构。对胆碱基氯化钙/镁水合盐 DES 微观结构的认识可为 Ca²⁺/Mg²⁺溶剂化结构设计及 DES 性质调控提供新思路。

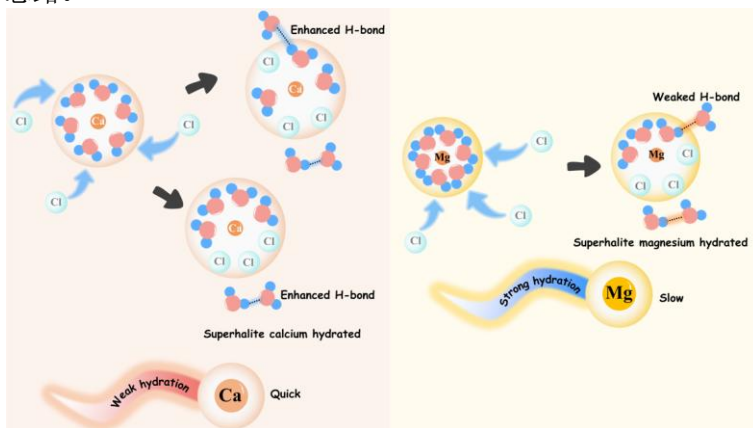


图 1 胆碱基氯化钙/镁水合盐DES的结构与传输性质

关键词: X射线/中子散射; EPSR模型; Ca/Mg局域结构; H键; Z键

参考文献

- [1] Chai K.; Yamaguchi T.; Zhou Y.; et al. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2025, **16**: 5091-5100.
- [2] Chai K.; Y. Zhou.; Yamaguchi T.; et al. *J. Phys. Chem. B*, 2024, **128**: 7445-7456.
- [3] Chai K.; Zhou Y.; Lu X.; et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023, **25**: 10481-10494.
- [4] Chai K.; Zhou Y.; Lu X.; et al. *J. Mol. Liq.*, 2022, **362**: 119742.

基于电子结构调控的镍锰氧化物电催化剂用于高效 HMF 氧化：电化学热力学机制研究

陈澜^{1,*}, 胡启鲁¹, 薛智敏^{1,**}, 牟天成^{2,**}

¹ 北京林业大学, 北京市海淀区清华东路 35 号, 100083

² 中国人民大学, 北京市海淀区中关村大街 59 号, 100872

*Email: chenl@bjfu.edu.cn, **Email: zmxue@bjfu.edu.cn, **Email: tcmu@ruc.edu.cn

生物质平台化合物5-羟甲基糠醛 (HMF) 电催化氧化为高价值的2,5-呋喃二甲酸 (FDCA) 是一种环境友好的可持续途径。精确调控关键活性位点的电子结构对于实现优异的催化性能至关重要, 这直接影响反应底物的吸附强度。

本研究通过引入具有低3d电子填充的Mn^{4+/3+}, 构建了具有独特电子相互作用的Mn-O-Ni电子通道, 实现了对催化剂电子梯度轨道和自旋态的精确调控, 从而显著提升了HMF电催化氧化反应 (HMFOR) 的性能。我们设计了一种Mn改性的多孔金属骨架 (Mn-Ni(OH)₂/PMS) 电催化剂, 在施加电位仅为1.42 V vs. RHE的低电位下即可实现了1.2 A cm⁻²的超高HMFOR电流密度, 超越了现有报道的大多数催化剂。通过对电极电势与反应自由能之间关系的深入分析, 我们认识到催化剂的电子结构调控是提升反应热力学可行性的关键。Mn的引入通过 π -供电子效应减弱了活性位点与反应中间体之间的电子-电子排斥, 并优化了关键中间体的吸附能, 降低了反应的活化能垒, 从而在热力学上促进了HMFOR的进行。密度泛函理论计算进一步揭示了Mn的掺杂通过调控镍活性位点的电子结构, 显著降低了HMFOR中关键的质子耦合电子转移过程的吉布斯自由能变化, 为整体高效的HMFOR提供了关键的热力学驱动力。此外, 在膜电极组流动电解槽中进行的长期稳定性测试表明, 该催化在连续运行300小时后仍能保持88.3%的FDCA分离产率, 展现出优异的工业应用潜力。本研究强调了通过精确的电子结构调控, 可以有效优化电催化剂的电化学活性和反应的热力学可行性, 为设计高效生物质转化催化剂提供了新的思路。

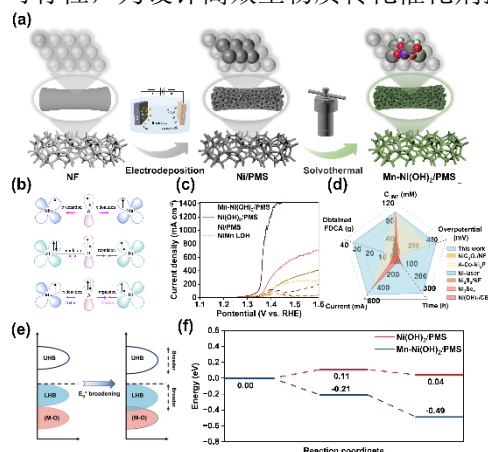


Fig. 1 (a) Schematic synthesis pathway of the catalyst Mn-Ni(OH)₂/PMS. (b) Schematic illustration of the electron coupling between Ni and Mn. (c) Polarization curves of Mn-Ni(OH)₂/PMS and reference samples in 1 M KOH with and without 50 mM HMF. (d) The long-term stability performance of Mn-Ni(OH)₂/PMS was compared with some of the latest catalysts reported in the literature. (e) A schematic band illustration. (f) Energy changes in the deprotonation process on Mn-Ni(OH)₂/PMS and Ni(OH)₂/PMS.

关键词: 电催化氧化; 5-羟甲基糠醛; 2,5-呋喃二甲酸; 电子结构调控

自组装体相变机理研究与结构表征新方法

曹波波, 杨海军, 尉志武*

清华大学化学系, 北京 100084

*Email: yuzhw@tsinghua.edu.cn

本研究基于分子自组装体系的结构调控与表征技术展开系统性研究。作为自然界普遍存在的现象, 分子自组装通过分子间弱相互作用构建有序结构, 在化学、材料科学和生物医药等领域具有广泛应用。然而, 现有研究对分子自组装动态过程及其相变机制的认知仍显不足, 制约了精准调控自组装结构的技术发展。同时, 随着自组装体系在功能材料等领域的深入应用, 开发兼具高效性、可靠性和信息丰富性的新型表征技术已成为当前研究的重要方向。针对离子液体表面活性剂自组装体系的相变机制, 我们采用原位同步辐射 X 射线散射结合红外光谱技术, 系统研究了[C₁₆mim]Cl 水溶液从球状胶束 (M) 到层状凝胶 (L_β) 的相转变动力学。首次揭示了无序层状相 (L_α) 在球状胶束 (M) 向层状凝胶 (L_β) 转变中的关键桥梁作用。相变协同性分析表明, 表面活性剂尾部构象调整是触发相变的主导因素, 头部基团调整呈现滞后特征。在表征技术创新方面, 本研究基于磷脂分子自组装结构的 ³¹P-NMR 信号特异性, 构建了以 Lyso PC 为分子探针的新型检测体系, 成功实现了六方相 (H)、层状相 (L) 和球状胶束 (M) 三种典型自组装结构的精准鉴别。该策略突破了传统表征方法在检测灵敏度与结构特异性方面的限制, 为复杂自组装体系的原位分析提供了新思路。本研究不仅深化了对自组装体系动态演变机制的理解, 更为复杂自组装体系的结构解析提供了创新性的表征策略, 对推动功能化自组装材料的开发具有重要理论价值和实践指导意义。

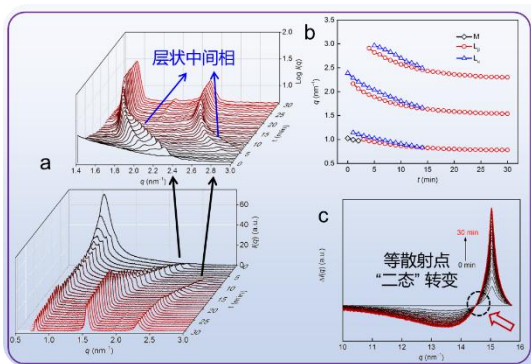


图 1 原位SAXS-WAXS表征球状-层状相转变过程

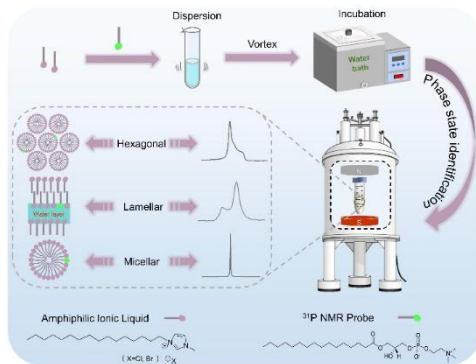


图 2 静态固体核磁磷探针识别自组装结构新方法

关键词: 自组装; 相变机理; NMR探针; 静态固体³¹P-NMR

参考文献

- [1] Cao B.; Guo H.; Hao X.; Wu Z.; Wu F.; Yu Z. *J. Phys. Chem. Lett.* 2021, **12**: 4484.
- [2] Cao B.; Yang H.; Yu Z. *J. Phys. Chem. Lett.* 2024, **15**: 262.

正温度系数对液体合体表面张力的影响

姚雅锋，陈飞武*

北京科技大学化学与化工系，北京 100083

*Email: chenfeiwu@ustb.edu.cn

我们将液体表面吸附理论^[1-7]，拟合Ga-Al、Ga-Zn、Cu-Ag和Pb-Sb四种二元液态合金体系表面张力和浓度的实验数据，通过分析表面相浓度和体相浓度的关系，成功解释了Ga-Al、Ga-Zn和Cu-Ag液态合金表面张力分别随体相Ga、Ag浓度增加呈下凹变化，而Pb-Sb液态合金表面张力则随体相Sb浓度升高呈现微弱上凸趋势。另外，我们还发现，这四种二元液态合金体系的表面张力与表面相浓度均呈线性相关。

基于课题组的表面吸附理论^[1-7]，我们推导了等压下二元液态合金表面张力关于温度和浓度的详细关系式，以及表面张力温度系数的计算公式。利用这两个公式，解释了Cu-Sn液态合金中Cu摩尔分数为0.5时表面张力随温度增加而增加的反常现象，以及Cu摩尔分数为0.3时表面张力随温度增加而减小的现象。分析表明，造成表面张力随温度增加而增加的原因是，当 $x_{\text{Cu}}=0.5$ 时表面相Cu浓度随温度的变化大于 $x_{\text{Cu}}=0.3$ 液态合金中表面相Cu浓度随温度的变化。另外，我们还采用分子动力学模拟计算了 $x_{\text{Cu}}=0.3$ 和0.5时表面相中Cu原子浓度随温度的变化，计算结果与表面吸附理论得到的结果是一致的。

参考文献

- [1] Chen F.; Lu T.; Wu Z. *Acta Phys.-Chim. Sin.* 2015, **31**: 1499.
- [2] Chen F.; Ren Q. *Chem. Phys. Lett.* 2017, **685**: 438.
- [3] Ren Q.; Chen F. *Chem. Commun.* 2020, **56**: 15076.
- [4] Teng K.; Yao Y.; Chen F. *Langmuir* 2024, **40**: 1203.
- [5] Yuan B.; Zhang W.; Ren Q.; Chen F. *J. Mol. Liq.* 2024, **396**: 124025.
- [6] Wang F.; Yuan B.; Zhang W.Y.; Chen F. *Colloids Surf. A* 2024, **701**:134914.
- [7] Yuan B.; Chen F. *Langmuir* 2025, **41**: 7659.

晶格缺陷诱导深共晶溶剂渗透与溶解纤维素晶体：分子热力学-动力学耦合框架研究

余沅鸿^{1,*}, 宋先雨^{1,**}, 赵双良^{2,**}, 刘洪来³

¹ 重庆三峡学院, 环境与化学工程学院, 重庆, 404130

² 广西大学人工智能学院、广西石油化工资源加工及过程强化技术重点实验室, 南宁, 530004

³ 华东理工大学化学工程联合国家重点实验室, 化学与分子工程学院, 上海, 200237

*yuanhongy2002@163.com, **Email: xianyusong@sanxiau.edu.cn, **Email: szhao@gxu.edu.cn

纤维素是地球上最丰富的天然高分子材料, 具有广阔的可持续材料应用前景。然而, 由于其高度有序的晶体结构和密集的氢键网络, 导致其在常规溶剂中难以溶解, 严重限制了其大规模利用。本研究提出分子热力学-动力学耦合方法, 研究纤维素在深共晶溶剂 (DES) 中的溶解行为。扫描电镜 (SEM) 实验与分子动力学模拟 (MD) 结果表明: 传统溶剂无法有效渗透和破坏纤维素晶体, 而以氯化胆碱与 π -共轭构成的深共晶溶剂可实现超过95%的溶解率。结构与热力学分析揭示了以晶体缺陷为分子机制的为渗透传质路径, 证实了深共晶溶剂组分与纤维素羟基之间存在动态协同氢键效应。模拟进一步表明, 含 π -共轭的咪唑、吡唑类氢键供体深共晶溶剂体系表现出更高的溶剂可及性、更低的溶解自由能-546.086到-605.875 kJ·mol⁻¹以及更优的扩散动力学0.0182到0.9361 $\times 10^{-5}$ cm²·s⁻¹。此外, 纤维素链长对溶解动力学和扩散能垒也具有显著影响。本研究以分子热力学-动力学耦合策略从分子层面揭示了纤维素-溶剂相互作用机制, 为开发高效、绿色的纤维素加工体系提供了理论支持, 并为其在先进功能材料中的应用奠定了基础。

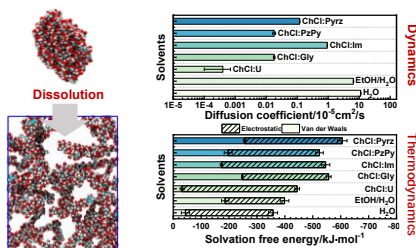


图 1. 分子热力学-动力学耦合框架研究深共晶溶剂渗透与溶解纤维素晶体

关键词: 分子动力学; 分子热力学; 纤维素溶解; 晶体缺陷; 协同氢键效应

参考文献

- [1] Tong Z.; Wang W.; Zeng S.; Sun Y.; Meng J.; Liu Y.; Xia Q.; Yu, H. *Green Chem.*, 2022, **24**: 8760-8769.
- [2] Yurtsever A.; Wang P.X.; Priante F.; Morais Jaques Y.; Miyazawa K.; MacLachlan M. J.; Foster A. S.; Fukuma T. *Sci. Adv.*, 2022, **8**: eabq0160.

Crystallization of Ice Ic from Ice XVII

Kenji Mochizuki*, Qianli Xue

浙江大学化学, 杭州, 310014

*Email: kenji_mochizuki@zju.edu.cn

The rare Scheiner's halo at 28° around the sun, first reported nearly 400 years ago in Rome, suggests the presence of cubic ice (ice Ic) in the sky. However, humans only held its pure form in hand just 5 years ago, as the synthesis had been hindered by the competitive formation of hexagonal ice (ice Ih) and the mixture of hexagonal and cubic stacking sequence, resulting in stacking disordered ice (ice Isd). Since then, methods for creating pristine ice Ic from ice XVII and C2 hydrogen hydrate have been established.^[1,2] However, the underlying molecular mechanisms remain largely unexplored. Here, we unveil the microscopic details that enable the preferential formation of ice Ic from ice XVII through spontaneous crystallization in molecular dynamics (MD) simulations. The phase transition proceeds in two steps: first, the outward surface freezing of ice Ic within the pre-melting layer on the ice XVII surface, followed by the inward, layer-by-layer propagation of the stable Ic-XVII coexistence. The matching of lattice lengths and the defect-free layerwise conversion are essential. This mechanism could provide valuable insights for the precise synthetic control of target crystals over other polymorphs with similar stability, with broad applications in various fields.^[3]

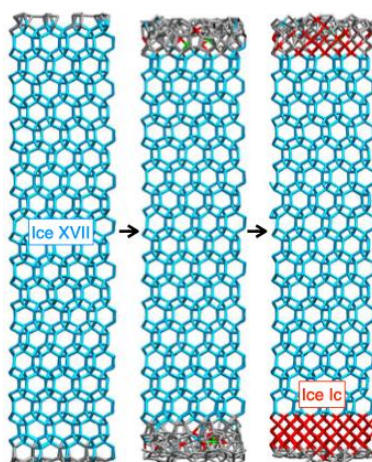


Fig. 1 Formation of ice Ic (red) from ice XVII (blue), achieved MD simulations

Key words: Ice; Phase transition; MD simulation

References

- [1] Komatsu K.; Machida S.; Noritake F.; Hattori T.; Sano-Furukawa A.; Yamane R.; Yamashita K.; Kagi H. *Nat. Commun.* 2020, **11**: 464.
- [2] del Rosso L.; Celli M.; Grazzi F.; Catti M.; Hansen T.C.; Fortes A.D.; Ulivi L. *Nat. Mater.* 2020, **19**: 663–668.
- [3] Mochizuki K.; Xuw Q. *Cryst. Growth Des.*, 2025, **25**: 1628-1635.

纳米载体跨生物膜输运界面热力学及动力学多尺度分子模拟研究

宋先雨^{1,*}, 赵双良^{2,**}

¹ 重庆三峡学院, 环境与化学工程学院, 重庆, 404130

² 广西大学人工智能学院、广西石油化工资源加工及过程强化技术重点实验室, 南宁, 530004

*Email: xianyusong@sanxiau.edu.cn, **Email: szhao@gxu.edu.cn

纳米药是 21 世纪最重要的研究课题, 借鉴化工热力学与界面科学的基本原理和方法研究纳米药是化工前沿领域之一。纳米药由于在实体肿瘤表面较差的聚集性以及较差的药代动力学, 使得递送效率低, 严重制约临床应用与发展。因此, 理解和认识纳米载体在细胞摄取内化过程中的分子相互机制对设计高递送率的纳米载体成为了一项重要课题。基于微妙时长分子动力学、伞形采样分子动力学、温和元动力学、密度泛函理论, 构建了“热力学-动力学”多尺度分子动力学模拟框架, 该框架能在皮秒、原子尺度研究生物跨膜动力学及热力学基本性质。利用该框架, 针对纳米水凝胶、Janus 氧化石墨烯、多氯联苯等生物活性材料进行生物跨膜动力学行为进行系统研究。该研究为纳米智能控释设计提供了理论指导, 并为水凝胶在药物智能控释方面提供新的研究思路。

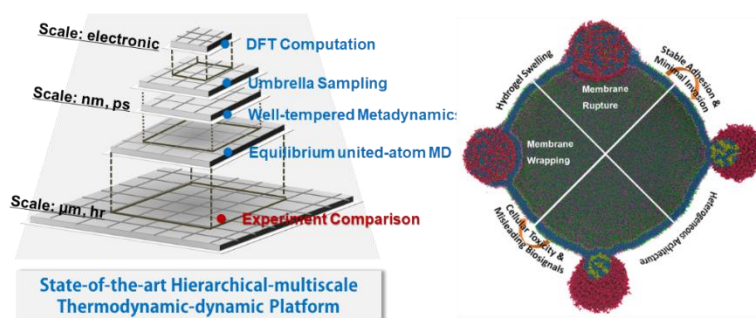


图1 基于“热力学-动力学”方法耦合研究纳米-生物界面

关键词: 分子热力学; 生物-纳米界面; 纳米载体; 热力学动力学耦合

参考文献

- [1] Song X.; Duan X.; Xiang W.; Zhao S. *J. Med. Chem.*, 2025, **68**: 15015–15025.
- [2] Song X.; Liu H.; Duan X.; Hu Q.; Liang K.; Li T.; Zhao S.; Liu H. *Appl. Surf. Sci.*, 2023, **609**: 155425.
- [3] Song X.; Ma J.; Long T.; Xu X.; Zhao S.; Liu H. *ACS Appl. Mater. Interf.*, 2020, **13**: 123-134.

课题资助: 国家自然科学基金面上项目 (22478045)。

蒾烯基碳氢燃料的燃烧性能与燃烧初期路径研究

陈鑫阳*, 方文军, 郭永胜**

浙江大学化学系, 浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号, 310058

*Email: 22137007@zju.edu.cn, **Email: wjjw@zju.edu.cn

具有优异点火燃烧性能的碳氢燃料对高超声速飞行器的发展至关重要^[1], 分子内含有高张力环结构的生物质蒾烯基碳氢燃料在此方面展现出显著优势^[2]。本工作以蒾烷和环丙烷化蒾烷为主要研究对象, 系统考察了其在不同条件下的点火燃烧性能(包括点火延迟与液滴寿命), 并与高密度碳氢燃料JP-10进行对比。研究表明, 得益于分子内高张力环结构对反应活性的促进作用, 蒾烯基碳氢燃料的点火燃烧性能显著优于JP-10, 尤为突出的是, 环丙烷化蒾烷的点火延迟相比于JP-10更是呈现出数量级水平的降低。在625 °C的环境温度下, 蒾烷的点火延迟为JP-10的22.5%, 而环丙烷化蒾烷的点火延迟仅为JP-10的3.9%。此外, 蒾烯基碳氢燃料的液滴寿命相比于JP-10同样有不同幅度的缩短。为深入探究蒾烯基碳氢燃料优异燃烧性能的初始反应机制, 本文在高温无氧环境下进行了碳氢燃料的裂解行为研究, 并通过裂解产物的定性与定量分析, 解析了其主导裂解路径。结果表明, 蒾烯基碳氢燃料在高温无氧环境中率先发生高张力环的断裂, 这为其优异的点火燃烧性能提供了关键贡献。

关键词: 蒾烯基碳氢燃料; 生物质; 高张力; 燃烧性能; 燃烧初期路径

参考文献

- [1] Zhang X.; Pan L.; Wang L.; Zou J. *Chem. Eng. Sci.* 2018, **180**: 95-125.
- [2] Mi J.; Chen X.; Wu P.; Di Y.; Guo Y.; Fang W. *Sustainable Energy & Fuels*. 2023, **7**: 5374-5384.

水/碳氢燃料乳液凝胶的形成机制与性能研究

魏一鸣*, 戴恽童, 方文军, 郭永胜**

浙江大学化学系, 浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号, 310058

*Email: 12437041@zju.edu.cn, **Email: wjjw@zju.edu.cn

高超声速飞行器的发展对吸热型碳氢燃料性能提出了更高要求^[1]。尽管含适量水的碳氢燃料乳液可提升燃烧与换热性能^[2-3], 但其稳定性难以满足应用需求; 而将其转化为乳液凝胶燃料, 则能显著改善其储存稳定性和机械强度^[4-5]。本研究围绕先进水/碳氢燃料乳液凝胶体系的构筑展开, 以脲类化合物为分子平台设计并合成了凝胶因子, 根据不同的配比制备了水/碳氢燃料乳液凝胶; 探究了碳氢燃料、水、表面活性剂与凝胶因子间的相互作用, 明确凝胶因子在乳液凝胶燃料中的自组装机理, 建立凝胶因子-乳液燃料匹配关系; 最后, 结合乳液凝胶燃料相关的物理和化学性能表征, 主要关注其稳定性、燃烧和换热特性的变化, 明确乳液凝胶燃料组成与性能间的关系, 从而制备出高稳定、高性能的水/碳氢燃料乳液凝胶。

关键词: 碳氢燃料; 乳液凝胶; 自组装; 燃烧; 换热

参考文献

- [1] Wang C.; Du C.; Shang J.; Zhu Y.; Yao H.; Xu M.; Shan S.; Han W.; Du Z.; Yang Z.; Li D. *J. Anal. Appl. Pyrolysis*. 2023, **169**: 105867.
- [2] Xu B.; Wang Y.; Liu G. *J. Anal. Appl. Pyrolysis*. 2023, **169**: 105875.
- [3] Gao M.; Hou L.; Zhang X.; Zhang D. *Energy Fuels*. 2019, **33**: 6126-6133.
- [4] 曹锦文, 潘伦, 张香文, 邹吉军. 含能材料, 2020, **28**: 382-390.
- [5] Padwal M.; Natan B.; Mishra D. *Prog. Energy Combust. Sci.* 2021, **83**: 100885.

Effect of fluorinated polyether grafting ratio on dual curing of GAP

Keyu Liu^{*}, Bo Jin^{**}

Southwest University of Science and Technology, Southwest University of Science and Technology,
Fucheng District, Mianyang City, Sichuan Province, 621000

*Email: 2710405951@qq.com, **Email: jinbo0428@163.com

To improve the flexibility of GAP, in this paper, fluorinated polyether flexible chains containing more hydroxyl groups were introduced into the side chains of GAP1k through click chemical reaction to synthesize GAP1k-g-F3 with different grafting rates, which were analyzed by infrared spectroscopy and differential scanning calorimetry. Moreover, 3THD and 3HDI were used for dual curing to prepare GAP1k-g-F3-PTU, and tests on its mechanical properties, TG (thermogravimetric analysis) and SEM (scanning electron microscopy) were carried out. The results show that when the grafting rate of fluorinated polyether is 5%, the mechanical properties of the elastomer are improved, with a tensile strength of 75.35 MPa and an elongation at break of 31%; the morphology is relatively uniform and smooth; and it has good thermal stability.

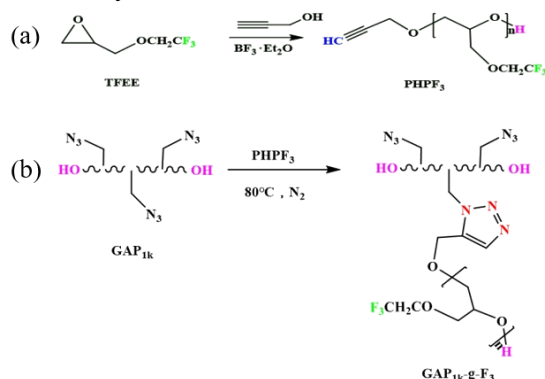


Fig.1 The synthetic route of GAP_{1k}-g-F₃

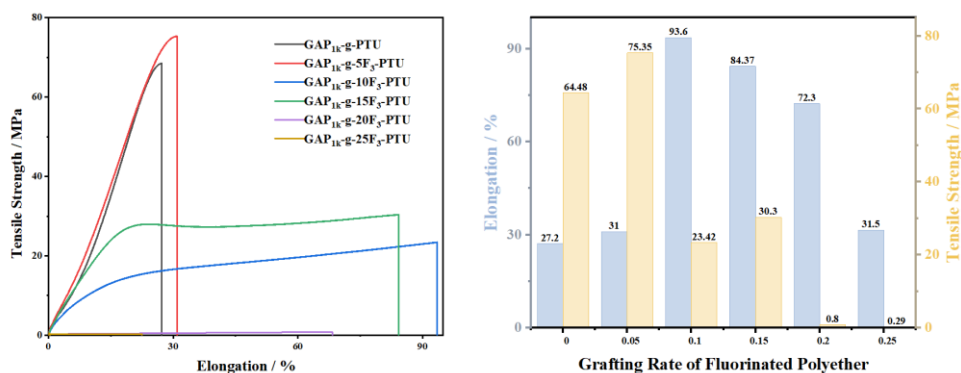


Fig.2 Stress-strain curve, elongation at break and tensile strength of GAP_{1k}-g-F₃-PTU

Key words: GAP graft modification; Dual curing process; Mechanical properties; Thermal stability

BODIPY 荧光探针检测次氯酸的动力学研究

刘艺璇, 付秀丽, 焉炳飞*

烟台大学化学化工学院, 山东 烟台 264005

*yangbf2014@126.com

次氯酸(HClO)作为一种重要的活性氧分子,在生物体内发挥着双重作用:适量时能够有效杀灭入侵病原体,维持机体健康;然而过量时则会对生物体造成严重损害。研究表明,过量的HClO/CIO⁻不仅会导致蛋白质等生物大分子发生氧化损伤,还可能诱发多种疾病,包括某些癌症的发生。因此,准确检测生物系统中的HClO浓度对于阐明其在生命活动中的作用机制具有重要意义。在众多检测方法中,荧光探针法因其具有操作简便、成本低廉、可重复使用、生物相容性好等优势而备受关注。本研究基于碳氮双键(C=N)可被HClO选择性氧化的特性,设计了一种新型荧光探针。该探针以BODIPY作为荧光基团,羟胺作为识别基团,其分子内部具有推拉电子结构,在激发态下可产生分子内电荷转移(ICT)效应,发射橙红色荧光。当探针与HClO反应时,分子内的不饱和C=N键被氧化为醛基,导致ICT效应减弱,荧光发射峰发生蓝移。实验结果表明,该探针对HClO具有优异的选择性识别能力。在0~60 μM浓度范围内,探针的荧光强度与HClO浓度呈现良好的线性关系,其线性回归方程为 $Y=14.42X+41.75$ ($R^2=0.9923$)。通过空白值测试计算得到该探针的检出限为0.048 μM,显示出较高的检测灵敏度。在实际样品检测中,自来水样品未检出ClO⁻,加标回收率稳定在90.3%~106.2%之间;对稀释后的84消毒液样品进行检测,其加标回收率在105.4%~114.7%范围内,表明该探针具有良好的实际应用价值。

关键词: 次氯酸; 荧光探针; BODIPY

木质素还原酸解制备芳烃化合物及产物的核磁表征

胡启鲁*, 陈澜, 严传玉, 薛智敏**

北京林业大学, 北京市海淀区学院路街道清华东路 35 号, 100091

*Email: huqilu@bjfu.edu.cn, **Email: zmxue@bjfu.edu.cn

木质纤维素是一种重要的生物质资源, 其中木质素是木质纤维素的重要组分, 它是自然界中唯一能直接提供芳香族化合物的可再生资源, 具有氧含量低、能量密度高的优点^[1]。将木质素解聚为芳香单体是实现木质素高值化利用的重要研究内容, 尽管这一研究领域在过去十年里取得了重大进展, 目前已经有热解^[2]、酸/碱催化水解^[3]、氧化和还原裂解^[4,5]等木质素解聚方法, 但存在反应中间体易缩聚、贵金属催化剂的高成本和高压氢气的使用等问题, 这阻碍了其大规模应用^[3,6]。针对以上难题, 这项工作提出了离子液体/有机酸体系, 将不同生物质来源的木质素高效解聚为芳香单体。

离子液体具有熔点低、溶解性好、易分离回收等优良特性, 被广泛用作生物质溶解和转化的有前途的溶剂或催化剂^[7]。在该工作中, 构建离子液体/氢碘酸催化体系, 将其用于五种木质素模型化合物和五种真实木质素的解聚反应, 以解决上述木质素解聚方法中存在的问题。结果表明, 在该反应介质中, 利用氢碘酸的还原酸能力和离子液体作为绿色溶剂的优良物理化学性质, 模型化合物的转化率接近 100%, 真实木质素的低分子量解聚产物的收率高达 81wt%。此外, 我们引入扩散核磁共振色谱法来鉴定解聚产物, 使产物的详细结构归属变得简单明了。这项工作中展示的[Bmim]I/有机酸的优点是反应条件温和、易于大规模应用和成本效益高, 将木质纤维素生物质转化为可持续的化学品, 有利于实现木质素最大价值化利用。

关键词: 木质素; 还原酸解; 芳香化合物; 扩散核磁

参考文献

- [1] Li G.; Wang R.; Pang J.; Wang A.; Li N.; Zhang T. *Chem. Rev.* 2024, **124**: 2889-2954.
- [2] Xue X.; Zhang C.; Xia D.; Wang Y.; Liang J.; Sun Y. *Chem. Eng. J.* 2022, **431**: 134251.
- [3] Deepa A. K.; Dhepe P. L. *ACS Catal.* 2015, **5**: 365-379.
- [4] Luo H.; Weeda E. P.; Alherech M.; Anson C. W.; Karlen S. D.; Cui Y.; Foster C. E.; Stahl S. S. *J. Am. Chem. Soc.* 2021, **143**: 15462-15470.
- [5] Huang H.; Zhang X.; Ma L.; Liao Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025: e202502545.
- [6] Wang S.; Zhang K.; Li H.; Xiao L.P.; Song G. *Nat. Commun.* 2021, **12**: 416.
- [7] Hou X.; Feng G.; Chen Z.; Wu H.; Zhao H.; Cao S.; Hallett J. P. *Green Chem.* 2024, **26**: 5977-5987.

离子液体参与构筑的微乳液体系相行为调控及其对 CO₂ 的可逆捕集

李志勇*, 李雯雯, 牛琳惠, 王键吉

河南师范大学化学化工学院, 绿色化学介质与反应教育部重点实验室, 河南省新乡市, 453007

*Email: lizhiyong03@126.com; yli@htu.edu.cn

碳捕集是实现“双碳”目标的核心技术之一。目前最成熟的碳捕获技术依赖于碱性水溶液和乙醇胺等胺类吸附剂, 这些技术通常需要耗能的热解吸来释放捕获的 CO₂ 和吸附剂再生。如果一个高效的碳捕集体系, 能够通过可见光照射实现 CO₂ 的释放和吸附剂的再生, 就能够解决再生过程能耗高的问题。螺吡喃分子具有光异构效率高、可逆性好等特性, 在可见光照射下, 螺吡喃由开环[MC(H)]结构转变为闭环(SP)结构^[1-2]。该异构化过程伴随着质子(H⁺)的释放与吸收, 从而引起局部微环境 pH 值发生显著变化。基于此, 我们设计了一类光酸离子液体, 并将它们用于构筑光响应离子液体微乳液, 以这些微乳液作为吸附剂, 通过对光酸结构的设计调控目标离子液体的溶解度和酸碱度, 使其能在光照下发生可控的 pH 值变化, 以实现 CO₂ 的捕集与光控释放。

关键词: 光调控; CO₂捕集; 微乳液; 离子液体

参考文献

[1] Alfaraidi A. M.; Kudisch B.; Ni N.; Thomas J. *J. Am. Chem. Soc.* 2023, **145**: 26720-26727.

[2] de Vries A.; Goloviznina K.; Reiter M.; Salanne M. *Chem. Mater.* 2024, **36**: 1308-1317.

本工作得到了国家自然科学基金 ((22273016)、河南省自然科学基金-杰出青年基金 (252300421043)和河南省高校科技创新团队(25IRTSTHN002)的支持

植物活性物共晶的氢键作用及溶液性质研究

王小永*

华东理工大学，上海市梅陇路 130 号，200237

*Email: xiaoyong@ecust.edu.cn

植物活性物是从植物中提取的次生代谢产物，具有抗炎、杀菌、抗氧化、抗肿瘤等多种生物活性和健康功效。但是，许多植物活性物存在难溶于水、稳定性差、生物利用度低等问题。

共晶是利用晶体工程原理将活性物分子与配体分子通过氢键、 π - π 共轭、范德华力等弱相互作用形成的超分子晶体结构。通过筛选合适配体分子，我们成功制备了阿魏酸、姜黄素等植物活性物的二元及三元共晶。

(1) 采用单晶XRD、红外光谱和Hirshfeld表面分析等方法研究了植物活性物共晶中氢键作用的类型、强度及占比。

(2) 测定了植物活性物共晶在水中的溶出曲线、平衡溶解度、稳定性、自由基清除率等物理化学性质及生物活性。

(3) 通过多种光谱方法证实，植物活性物共晶在水溶液中并没有完全解离，活性物分子与配体分子之间仍然保持氢键作用，并对植物活性物的溶液性质有重要影响。

(4) 研究工作能够为通过共晶方式调控难溶性植物活性物的理化性质、生物活性和健康功效提供有益指导。

关键词：共晶；植物酚酸；氢键；溶液

注：国家自然科学基金资助项目（22273022）。

Effects of ($M^+ = \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{NH}_4^+$) on the Ti_3C_2 -MXene as counter electrode for triiodide reduction in dye-sensitized solar cells

Ziwei Chen, Kezhong Wu*

Hebei Key Laboratory of Inorganic Nano-materials, College of Chemistry and Materials Science, Hebei Normal University, Shijiazhuang, 050024, China

*E-mail: kzwu@hebtu.edu.cn

The Ti_3C_2 -MXene as counter electrode (CE) catalysts of dye-sensitized solar cells (DSSCs) were prepared by etching Ti_3AlC_2 with various fluoride salts in hydrochloric acid (HCl), including lithium fluoride (LiF), sodium fluoride (NaF), potassium fluoride (KF), and ammonium fluoride (NH_4F), which can be an effective strategy for improving the power conversion efficiency (PCE). In this study, DSSCs with the four different Ti_3C_2 -MXene catalysts yield PCEs of 7.88% (NaF + HCl-), 7.49 % (KF + HCl-), 6.50 % (NH_4F + HCl-), and 5.94 % (LiF + HCl-). The excellent performance can be ascribed to the ordered interlayer structure of 2D- Ti_3C_2 MXene by the etching solution effect, resulting from the generation of a larger number of active sites due to changes in the microelectronic and geometric structures.

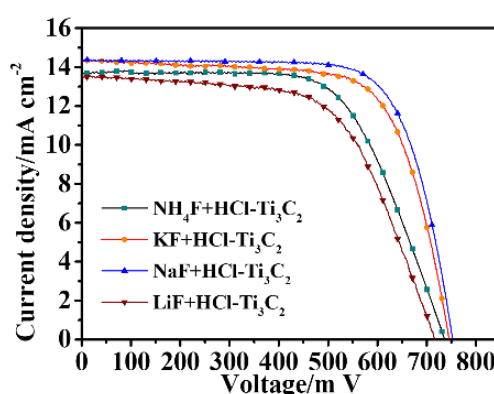


Fig. 1. J-V curves of DSSCs using four different Ti_3C_2 -MXenes as CEs

Keywords: 2D-MXene; Counter electrode; Dye-sensitized solar cells; Power conversion efficiency

References

- [1] Nie F.; Zhao H.; Liu S.; Li Y.; Zhang H.; Wu M.; Wu K. *Diamond Relat. Mater.* 2024, **141**: 110586.
- [2] Zhao H.; Chen Z.; Li Y.; Liu S.; Li P.; Wu M.; Wu K. *Renewable Energy* 2025, **245**: 122858.

咪唑离子液体对电化学 CO₂ 还原为合成气的调控作用

赵扬*, 闵照军, 李志勇, 王慧勇, 王键吉**

河南师范大学化学化工学院, 绿色化学介质与反应教育部重点实验室, 河南新乡, 453007

*Email: zhaoyang@htu.edu.cn, **Email: jwang@htu.edu.cn

CO₂是主要的温室气体, 也是重要的C1化学资源^[1]。电化学CO₂还原反应(CO₂RR)是促进碳平衡的重要途径之一, 它不仅能将CO₂转化为高附加值的化学品, 还能为可再生能源的存储提供有效的方法^[2]。合成气作为许多工业产品的基础原料, 可根据CO/H₂的摩尔比将其应用于不同的化学品生产中^[3]。目前, 不少研究者认为, 将CO₂电化学还原为合成气有可能是率先实现CO₂RR工业化应用的一种途径, 其关键在于如何提高特定CO/H₂摩尔比下的电流密度, 但目前这仍是一项充满挑战的任务。

鉴于此, 本文设计、制备了一种原位生长在泡沫镍上的纳米银(nano-Ag@Ni foam)催化剂, 并将其应用于离子液体-乙腈电解质溶液体系的CO₂电化学还原制备合成气中。得到如下主要结论:

1、在1-丁基-3-甲基咪唑六氟磷酸离子液体-乙腈 ([C₄mim][PF₆]-MeCN) 电解液中, 实现了合成气中CO/ H₂的摩尔比可在1/5 ~ 26/1范围内调变。

2、在流动电解池中, 当CO/ H₂的摩尔比为1/1, 1/2和1/3时, 相应电流密度分别达到363.6, 458.2和644.7 mA cm⁻², 这些摩尔比的合成气可直接用于氢甲酰化反应和费托合成。通过甲基取代咪唑阳离子的C2-H可实现CO₂RR产物从合成气到CO的切换, 相应流动池中的电流密度高达528.3 mA cm⁻²。

3、机理研究表明, nano-Ag@Ni foam催化剂上CO₂RR的反应中间体分别为*COOH和*CO。离子液体[C₄mim][PF₆]的C2-H主要负责H₂的生成, 而C4/5-H协同稳定自由基中间体*COO-生成CO。nano-Ag@Ni foam催化剂与离子液体电解液的协同作用是CO₂RR制合成气性能提高的关键。

关键词: CO₂还原反应; 合成气; 活性质子; 离子液体; 调控作用

参考文献

- [1] Hao S.; Elgazzar A.; Ravi N.; Wi T.U.; Zhu P.; Feng Y.; Xia Y.; Chen F.Y.; Shan X.; Wang H. *Nat. Energy*, 2025, **10**: 266-277.
- [2] Jiang Y.; Huang L.; Chen C.; Zheng Y.; Qiao S. *Energy Environ. Sci.*, 2025, **18**: 2025-2049.
- [3] Min Z.; Chang B.; Shao C.; Su X.; Wang N.; Li Z.; Wang H.; Zhao Y.; Fan M.; Wang J. *Appl. Catal. B: Environ.*, 2023, **326**: 122185.

含氮小分子高值转化与低能耗电化学制备技术

李嘉辰*, 马海霞**

西北大学化工学院, 陕西省西安市长安区学府大街 1 号, 710127

*Email: lijiachen@nwu.edu.cn, **Email: mahx@nwu.edu.cn

富氮杂环类含能材料由于在具有挑战性的含能材料领域中能够同时满足多种需求被认为是具有前景的含能化合物。然而常规有机合成法制备该类化合物通常包含有机试剂和氧化剂, 这些试剂通常具有毒性、腐蚀性和高成本以及副产物较难去除等弊端。并且需在高温下进行反应, 具有较大安全隐患。本研究在绿色水相溶剂中通过电氧化 N-N 偶联脱氢策略实现电合成偶氮四唑、偶氮呋唑、偶氮三唑。同时, 借助 N-N 偶联脱氢低热力学电位的特点和电解水制氢中阳极析氧反应(OER)高能垒的缺陷, 将绿色电合成偶氮含能材料反应替代高能垒 OER 并与阴极制氢反应耦合, 构建新型低能耗电解体系。该体系能够在阴极实现低槽电压、低能耗制氢的同时在阳极实现绿色电合成偶氮含能材料, 达到一举两得的目的。为新型低能耗电解水产氢耦合体系的设计提供了一个新方向。

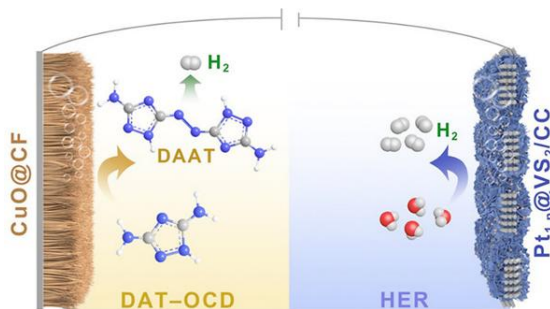


图 1 低能耗电解槽制备体系示意图

关键词: 绿色电合成技术; 偶氮含能材料; 叠氮化铜; 电解水制氢; 低能耗制备

参考文献

- [1] Li J.; Li Y.; Ma Y.; Zhao Z.; Peng H.; Zhou Tao; Xu M.; Fan D.; Ma H.; Qiu J.; Gu, Z.; *J. Am. Chem. Soc.* 2025, **147**: 9505–9518.
- [2] Li J.; Ma Y.; Zhang C.; Zhang C.; Ma H.; Guo Z.; Liu N.; Xu M.; Ma H.; Qiu J. *Nat. Commun.* 2023, **14**: 8146.
- [3] Li J.; Zhang C.; Zhang C.; Ma H.; Guo Z.; Zhong C.; Xu M.; Wang X.; Wang Y.; Ma H.; Qiu J. *Adv. Mater.* 2022, **34**: 2203900.
- [4] Li J.; Li Y.; Wang J.; Zhang C.; Ma H.; Zhu C.; Fan D.; Guo Z.; Xu M.; Wang Y.; Ma H. *Adv. Funct. Mater.* 2022, **32**: 2109439.
- [5] Li J.; Ma Y.; Mu X.; Wang X.; Li Y.; Ma H.; Guo Z. *Adv. Sci.* 2025, **12**: 2411964.
- [6] Ma Y.; Zhao Z.; Zhang C.; Zhang Y.; Zhang C.; Li J.; Xu M.; Ma H. *Chem. Eng. J.* 2023, **475**: 146303.
- [7] Zhang C.; Ma Y.; Zhang C.; Guo Z.; Mu X.; Liu N.; Wang X.; Li J.; Xu M.; Ma H. *Electrochim. Acta*, 2024, **507**: 145164.

分布式流动热量计用于测量燃料临界参数、等压比热容

邵崇坤^{1,*}, 王培伦¹, 方文军^{1,2,**}

¹浙江大学化学系, 浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号, 310058

²浙江大学化学前瞻技术研究中心, 浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号, 310058

*Email: 12437023@zju.edu.cn, **Email: fwjun@zju.edu.cn

面向高超声速飞行器的研制与发展需求, 吸热型碳氢燃料经精准的化学调控能够赋予其优异的热沉、热值特性, 进而实现主动冷却与推进的双重功能。燃料在高温高压状态下工作, 呈现高流速、宽温域、多组分和变组成特征。这使得燃料在进入燃烧室后不再保留其初始的状态和组成。此外, 燃料热物理性质在相变温度、临界温度附近剧烈变化。等压比热容是设计先进主动冷却系统的重要参数之一。然而, 由于壁温测量分辨率不足、能量计算模型差异、燃料临界参数难以测量、燃料成分受热化学反应影响而动态演变, 等压比热容的精确测量面临巨大挑战。本工作针对上述难题, 研制了分布式流动热量计, 开发了线视场宽量程温度场精密测量技术, 将量热微通道 ($\Phi 3.0 \times 0.5$ mm, $L=1000.0$ mm) 划分为 2200 个量热微元, 实现了管壁温度的实时精确测量。基于轴向差分原理明确了燃料流动换热过程中温度、热沉、组分分布。分布式流动热量计可实现 298.0-1173.0 K 与 0.1-6.0 MPa 条件下燃料相变温度、临界参数、等压比热容及其沿热量计微通道轴向分布的动态实时测量。本工作系统测量了甲苯、十氢萘和 JP-10 的相变温度、临界温度、临界压力及等压比热容, 测量结果的相对不确定度分别为 0.73%、1.98%、2.11%、1.43%, 充分证明了分布式流动量热法可以成功地将热力学性质测量从平衡态扩展到具有显著温度梯度的稳态。

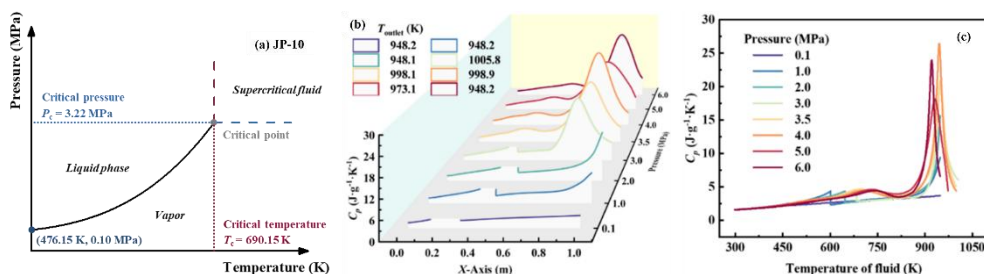


Fig. 1 Thermodynamic parameters of JP-10: (a) phase diagram of P - T , (b) axial distribution of the isobaric specific heat capacity, (c) temperature-dependence of the isobaric specific heat capacity.

关键词: 临界参数; 等压比热容; 分布式流动热量计; 吸热型碳氢燃料

参考文献

[1] Shao C.; Wang P.; Mi J.; Jiang P.; Guo Y.; Fang W. *Energy Conversion and Management*, 2025, **341**: 120048.

致谢: 感谢国家自然科学基金项目 (22127802) 的资助!

六价碲增强氧化物电极表面电解液稳定性的研究

于养信*, 吴智海

清华大学化学工程系, 北京, 100084

*Email: yangxyu@mail.tsinghua.edu.cn

综合考虑资源、成本、安全等因素, 钠电池在大规模储能场景下具有巨大的竞争优势。合理的阴极设计是实现钠电池长期稳定运行的关键。蜂窝层状氧化物 (HLO) 在空气/水环境中是稳定的, 并且作为阴极表现出了良好的稳定性, 但其界面稳定的内在本质仍然未知。为了将表面反应性与其界面稳定性联系起来, 我们利用密度泛函理论, 研究了典型 HLO 材料($\text{P2-Na}_{2/3}\text{Ni}_{2/3}\text{Te}_{1/3}\text{O}_2$)(NNTO)及其相应金属氧化物结构($\text{P2-Na}_{2/3}\text{NiO}_2$)(NNO)在六种不同碳酸酯溶剂中的吸附和反应活性。这些碳酸酯溶剂在两个阴极表面上显示出相似的吸附构型, 而 NNTO 阴极表面的吸附较弱, 降解反应都具有较高的反应能垒, 表明其具有较低的反应活性。我们对部分带电表面进行了进一步分析, 并通过表面性质的变化解释了溶剂分解反应活性的不同变化趋势。发现表面 $\text{O}2\text{p}$ 轨道的占有率可成功描述溶剂在阴极脱氢反应活性, 而表面氧和金属离子的自旋可成功描述溶剂在表面亲核攻击反应活性。我们不仅揭示了 HLO 材料界面稳定本质, 发现了六价碲可钝化 HLO 材料表面, 还明晰了阴极不同溶剂分解反应活性的描述符。这些见解为阴极-电解质界面设计提供了新思路。本研究得到了国家自然科学基金(No. 22178193)的资助。

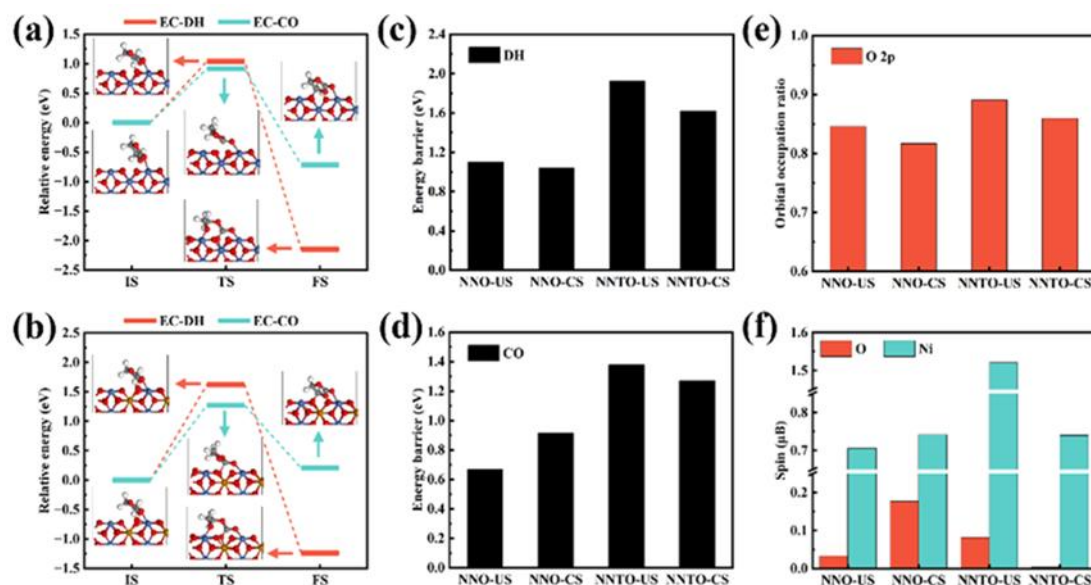


图 1 带电电极表面碳酸酯分解及与化学反应性描述符的关联

关键词: 层状氧化物阴极; 阴极-电解质界面; 密度泛函理论; 溶剂降解; 反应描述符

参考文献

- [1] Wu Z.H.; Yu Y.X. *ACS Appl. Energy Mater.* 2024, 7: 8715.
- [2] Wu Z.H.; Yu Y.X. *Mater. Today Chem.* 2025, 46: 102778.

基于膨胀石墨表面及层间调控活化过硫酸盐降解有机污染物机制研究

谭烨^{1,*}, 严婷¹, 周志宏¹, 李惠琳¹, 曾巨澜^{1,2,**}

¹ 长沙理工大学化学与医药工程学院, 长沙, 410114

² 长沙理工大学能源与动力工程学院, 长沙, 410114

*Email: tanye@csust.edu.cn, **Email: jlzeng@csust.edu.cn

难降解有机污染物的大量排放对新工业背景下的污水处理技术提出了新的挑战。基于硫酸根自由基的类芬顿技术由于其优异的氧化能力、较强的环境适应性被认为是理想的难降解有机物处理技术。然而, 现有的过硫酸盐活化材料存在活化能力不足、易发生二次污染、成本高昂、稳定性差等缺点。本工作使用廉价易得的膨胀石墨作为过硫酸盐活化材料, 通过对其层间结构进行调控, 增强其电子传导能力, 实现对四环素的去除。此外, 利用膨胀石墨层间缺氧结构, 对钴铁氧体氧化程度进行调控, 成功制得了具有丰富氧空位的钴铁氧体/膨胀石墨复合材料, 使得四环素的去除率达到 87.3%。DFT 计算结果表明, 膨胀石墨可以有效吸附过硫酸盐分子及污染物, 并通过表面官能团作用降低过硫酸盐活化难度, 提高自由基产率, 强化污染物去除效率。此外, 所得活化材料均具有优异的环境适应能力, 在较宽的 pH 范围内(3-11)表现出较好的污染物去除能力, 且不易受到常见水体中的阴离子干扰。本研究有望为过硫酸盐活化材料的设计与开发提供新的思路。

关键词: 膨胀石墨; 过硫酸盐; 难降解有机物

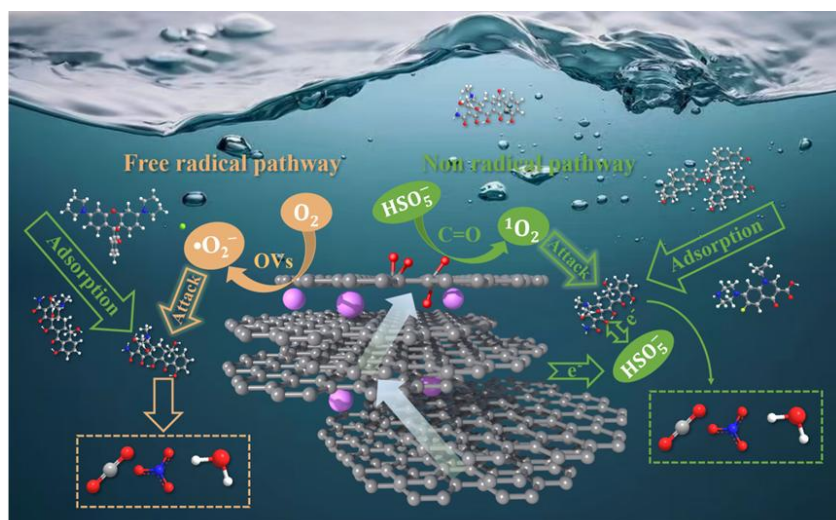


图 1 CoFe₂O₄/EG 复合材料活化 PMS 降解四环素过程示意图

Mechanisms of Li/Mg selective separation and membrane interface effects in electric field-assisted nanofiltration

Qing qing zhang^{1,*}, Fei Li^{1,2**}, Liting Fei², Jie Liu^{1,2}, Xiaofu Guo^{1,2}, Yingying Zhao^{1,2},

Shizhao Wang^{1,2}, Junsheng Yuan^{1,2}, Zhiyong Ji^{1,2}

¹School of Chemical Engineering, Hebei University of Technology/Engineering Research Center of Seawater Utilization Technology, Ministry of Education, 5340 Xiping Road, Beichen District, Tianjin 300130, China

²Hebei Provincial Collaborative Innovation Center for Modern Marine Chemical Technology, 5340 Xiping Road, Beichen District, Tianjin 300130, China

*Email: 15530708805@163.com, **Email: lifei2008_ok@126.com

Lithium, as a critical energy metal, is an indispensable resource for the future development of the new energy industry. This study introduces electric field-assisted nanofiltration (E-NF) technology to achieve the separation of lithium and magnesium. It was showed that under an applied electric field of 2.0 mA cm⁻², the rejection rate of Li⁺ significantly decreased from -5.57% to -76.56%, with its permeation rate increasing by 70.99%, while the rejection rate of Mg²⁺ over 98.50%. The separation factor ($S_{Li/Mg}$) reached 202.73. To further investigate the mechanism of Li/Mg separation under the electric field, operando Raman spectroscopy, X-ray scattering (XRS), and molecular dynamics (MD) simulations were carried out. Raman results revealed that under pressure-driven conditions, the number of double-donor double-acceptor (DDAA) hydrogen bonds decreased, whereas the reduction was less pronounced when the electric field was introduced compared to the pressure field alone. XRS data further indicated a decrease in the Ow-Ow peak area at 2.80 Å, along with a significant reduction in the Li-O peak area, while the Mg-O peak area remained stable. This suggests that the electric field weakened the binding between Li⁺ and water molecules, leading to partial dehydration of Li⁺, whereas the hydration structure of Mg²⁺ was preserved. These findings indicate that the electric field modulates the hydrogen bond network of the solution by influencing the Li⁺ concentration at the membrane surface, with lithium ions exhibiting a stronger disruptive effect on tetrahedral hydrogen bonds than magnesium ions. MD simulations showed that under the electric field, the coordination number of Li⁺ in its first hydration shell decreased significantly, while the hydration structure of Mg²⁺ remained stable. Comprehensive analysis suggests that under the electric field, Mg²⁺ rapidly migrates to the membrane surface but is retained due to the Donnan effect and dielectric exclusion, whereas Li⁺ permeates the membrane with dehydration, achieving effective separation between Li⁺ and Mg²⁺.

Keywords: Lithium-magnesium separation; Operando Raman; Operando X-ray; Molecular dynamics; Electric field-assisted nanofiltration

References

- [1] Fei L.T.; Wang M.L.; Qiao M.D.; Zhang Y. *J. Phys. Chem. B.* 2024, **128**: 208-221.
- [2] Qiao M.D.; Wang M.L.; Meng X.Z.; Zhu H.Y. *J. Mol. Liqs.* 2023, **373**: 121238.

基于石墨纳米片构建三维多孔碳材料及其储热应用研究

曾巨澜*, 袁煜琳, 曾博涵, 熊欢, 谭烨

长沙理工大学 化学与医药工程学院, 长沙, 410004

*Email: jlzeng@csust.edu.cn

相变储热技术具有储热容量大、吸放热过程近似恒温的优点, 在储能领域有广阔的应用前景。相变储热技术的核心是相变储热材料。近年来, 相变储热材料的应用研究领域扩展到太阳能直接热利用、绿电生产/消纳和热管理等领域。为改善固液相变材料固有的不足, 高性能相变材料的研究热点主要集中在对固液相变材料进行高效封装、改善其导热性能和增强其光热转换性能等方面。石墨纳米片具有高导热和高光热转换特性。为此, 本文基于石墨纳米片构建了一系列三维多孔材料, 并以其为支撑材料吸附固液相变材料赤藓糖醇 (ET) 制备了一系列定形相变材料 (FSPCMs)。研究结果表明, FSPCMs 中 ET 的担载量可达 91.23%, 相变焓达 318.5 J/g, 导热率较纯 ET 提升了 69%。同时, FSPCMs 具有良好的热可靠性并展现出优异的光热转换效率 (93.06%)。

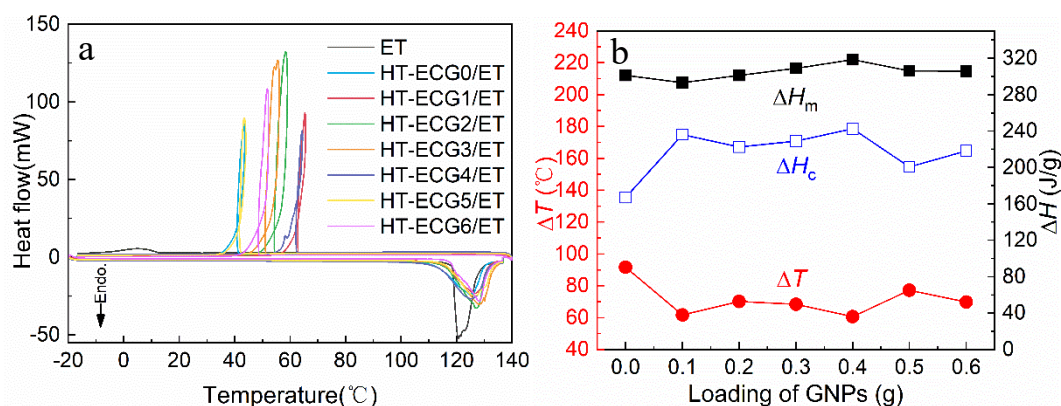


图 1 FSPCMs 的 DSC 曲线 (a) 及吸放热性能 (b) 字体

关键词: 相变储热; 定形相变材料; 石墨纳米片; 光热转换

参考文献

- [1] Ming Z.; Zhang J.; Li W.; Wang S.; Zhang Y.; Lu Z.; Zhang T.; Zhou Z.; Xia Y.; Zhang Y.; Zhou X.; Xiong J. *Adv. Mater.* 2025, 2501809.
- [2] Ning Y. H.; Tan Y.; Lin C. H.; Li Q.; Yu L. P.; Cao Z.; Sun L. X.; Li C. C.; Zeng J. L. *Chem. Eng. J.*, 2023, **459**: 141599.
- [2] Zhao H. Y.; Shu C.; Wang X.; Min P.; Li C. J.; Gao F. L.; Li X. F.; Yu Z. Z. *Adv. Funct. Mater.*, 2023, **33**: 2302527.

熔盐辅助改性烟煤基衍生碳材料的储钠性能

杜宇轩*, 王剑, 陈树伟**

太原理工大学化学, 山西太原迎泽西大街 79 号, 030024

* Email: duyx1997@t163.com, ** Email: csw603@163.com

烟煤为原料制备钠离子电池的负极材料具有潜在应用前景^[1]。然而, 烟煤衍生硬碳材料的微结构仍然不能满足 Na^+ 的储存要求^[2,3]。针对此问题, 本研究通过熔盐辅助策略实现了结构调控, 制备了层间距大、缺陷丰富的硬碳材料。通过改变不同比例, 调节 NaCl 和 KCl 熔盐体系, 优化了碳材料的微结构, 提高了钠离子电池负极材料的储钠性能。在循环 60 圈后的可逆容量达到 366.7 mAh/g (100 mA/g), 在高电流密度 (1 A/g) 下循环 1000 次后容量仍能保持 99%。通过研究, 制备了以烟煤为原料的煤基衍生硬碳负极材料, 为开发高效、低成本的钠离子电池负极材料提供了依据。

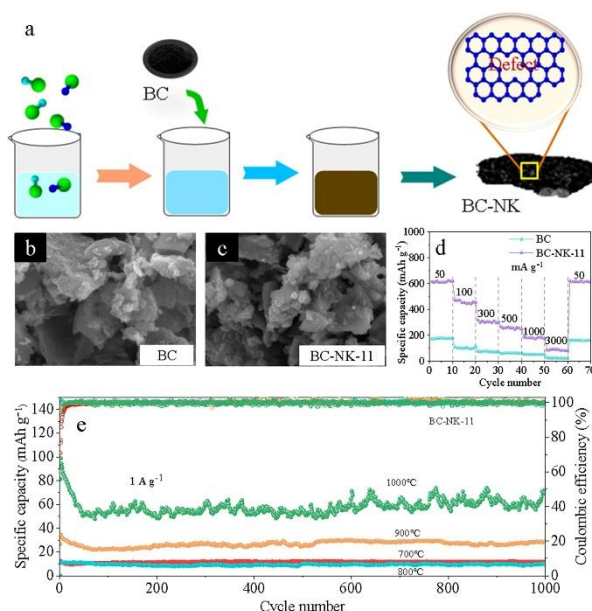


图 1 (a) 熔盐辅助制备硬碳策略, (b, c) 熔盐改性前后碳材料的形貌, (d) 倍率性能, (e) 不同条件制备硬碳的循环稳定性

关键词: 熔盐; 硬碳; 负极材料; 钠离子电池

参考文献:

- [1] Huang Y.; Hou Z.; Wang J.; Li, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, **64**: e202423864
- [2] Li M.; Chen H.; Li J.; Li Y. *Carbon*. 2025, **243**: 120577
- [3] Wang K.; Sun F.; Wang H.; Wu D. *Adv. Funct. Mater.* 2022, **32**: 2203725

智能手机辅助多酸基类过氧化物酶比色检测食品中的过氧化氢和抗坏血酸

孙琳*, 张怡怡

河南大学化学与分子科学学院, 河南省开封市, 475000

*Email: sunlin@vip.henu.edu.cn

在食品工业中快速准确的检测过氧化氢 (H_2O_2) 和抗坏血酸 (AA) 对人类健康至关重要。近年来, 越来越多的 Ce 基材料和多金属氧酸盐 (POMs) 在催化领域得到应用, 但其稳定性差、溶解度高、比表面积小等缺点限制了其应用前景。金属有机骨架 (MOF) 具有大孔隙率、高比表面积和优异的生物相容性等独特性能, 并且有高效的过氧化物酶活性。因此, 本研究合成了一种新型的铈基多金属氧酸盐 $[\text{Ce}(\text{H}_2\text{O})[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})(2,6\text{-pdca})]_3\text{H}[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]\cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (Ce-POM) (2,6-pdca = 2,6-吡啶二羧酸), 并将其负载在 CuBTC 上, 得到 Ce-POM/CuBTC 类过氧化物酶, 并开发了一种基于 Ce-POM/CuBTC 的智能手机辅助的纸基检测装置 (PAD), 用于现场快速检测 H_2O_2 和 AA。此外, 通过小鼠皮肤毒性研究表明, Ce-POM/CuBTC 具有良好的生物安全性。该研究为设计过氧化物酶提供了一种新策略, 可用于食品和添加剂中 H_2O_2 和 AA 的简便高效检测。

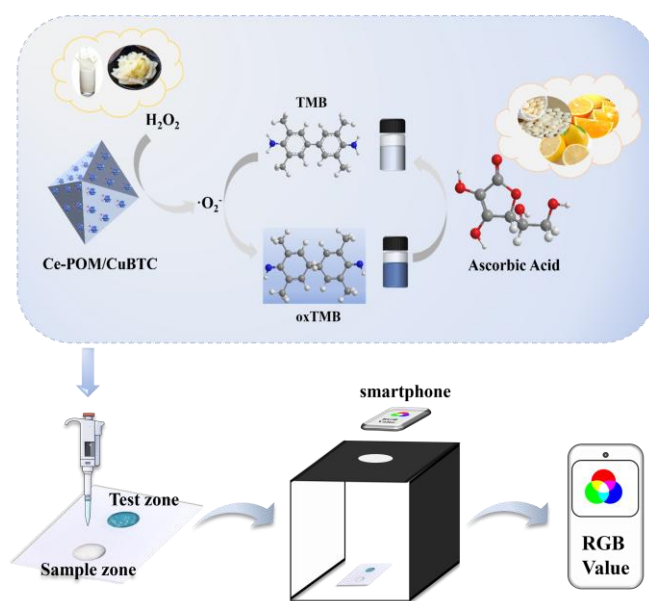


图 1 Ce-POM/CuBTC的智能手机辅助的纸基检测装置

关键词: 多金属氧酸盐; 抗坏血酸; 过氧化氢

参考文献

- [1] Liu L.; Wang T.; Zhao J.; Liu X.; Cui J.; Zhang X.; Sha J. *Chem. Eng. J.* 2025, **506**: 159999.
- [2] Zhang Y.; Zhang B.; Guo Z.; Lu S.; Li Y.; Zhang R. *Anal. Chim. Acta* 2025, **1341**: 343685.

面向主动热防护的高分散吸热型燃料新体系研究

糜基^{1*}，方文军^{2**}

¹ 中国计量大学仪器与计量学院，钱塘区下沙高教园区学源街 258 号，310018

² 浙江大学化学系，浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号，310058

*Email: fwjun@zju.edu.cn

吸热型燃料是用于飞行器主动热防护系统的特种燃料，需承担换热冷却和燃烧推进的双重任务。常规的吸热型燃料主要来源于煤基燃料或合成烃类，存在氧化、结焦等问题。近年来的研究表明，向碳氢燃料中加入水、氨等组分可以通过阻断结焦前驱体反应路径改善燃料的氧化和结焦，并通过微爆等过程促进燃烧，从而提升碳氢燃料的综合性能。但是，通常由水、氨等组分与碳氢燃料形成的常规掺混体系（乳化燃料）为非热力学稳定体系，存在高冰点、低稳定、不耐过载等问题，限制了这些有效组分的使用。本报告聚焦吸热型碳氢燃料对结焦抑制和热沉提升的应用需求，将水、氨等组分与碳氢燃料有机整合，制备形成具有低结焦特性的水基高分散燃料新体系，克服了常规乳化燃料稳定性差、冰点高以及不耐过载等问题，并较为系统地研究了系列高分散体系组成、结构与理化性能间的关系，测定了高分散体系的相平衡特征。这一技术有望拓展吸热型燃料的物质结构，为高性能燃料的研制探索出一条新途径。

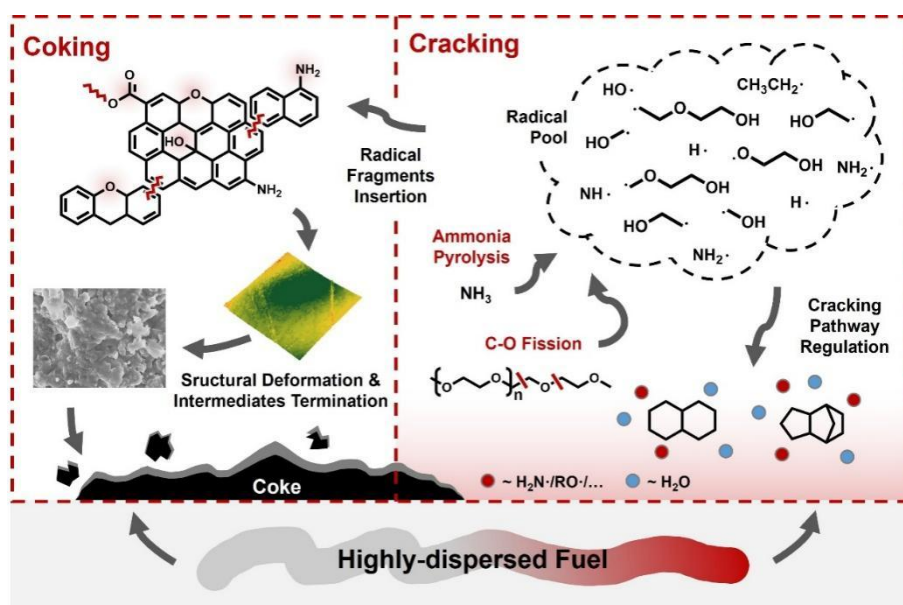


图 1 高分散燃料新体系促进热沉提升，抑制结焦的机制

关键词：吸热型燃料；高分散体系

参考文献

- [1] M, J.; Ye C.; Guo Y.; Fang W. Fuel, 2023, **351**:128834.
- [2] Mi J.; Pei L.; Wang H.; Shao C.; Yuan Z.; Ma J. Guo Y.; Lin X.; Fang W. Fuel, 2025, **384**: 134055.

嵌段共聚物作为碳氢燃料清净分散剂的研究

孙彬, 蒋朋飞, 郭永胜, 方文军*

浙江大学化学系, 浙江省杭州市余杭塘路 866 号, 310058

*Email: fwjun@zju.edu.cn

嵌段共聚物是一种具有独特节段结构和丰富单体组成的聚合物, 其特殊的结构性质使其有望在抑制碳氢燃料的热氧化沉积中得以应用。碳氢燃料在高温下不可避免地溶解氧发生链式反应, 形成可溶性大分子氧化活性物质 (SMORS); SMORS在高温下进一步发生脱氢缩合反应, 形成胶体和固体沉积物; 在飞行器长时间的运行过程中, 表面沉积物逐渐聚集成焦炭。本文通过间歇式反应釜将高能量密度碳氢燃料JP-10加速氧化 (1.5 MPa氧压, 160 °C), 通过紫外分光光度法评价加入不同结构嵌段共聚物对SMORS的分散效果, 并与商用分散剂聚异丁烯丁二酰亚胺 (PIBSI) 进行比较。研究表明, 含有胺基的嵌段共聚物 (HMC-AM) 的分散效果明显高于含有羟基 (HMC-AO) 和羧基 (HMC-AC) 的嵌段共聚物, 也显著高于PIBSI。且HMC-AM的分散效果随着嵌段共聚物中胺基嵌段比例的增加而增强, 与未处理的JP-10相比, 在添加250 ppm HMC₂-AM₁的JP-10静置8小时后的紫外线透过率下降了71.09 %。较低的紫外线透过率表明SMORS在体系中分散更均匀, 沉积程度更低。

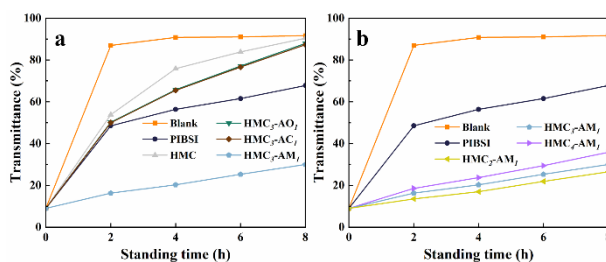


Fig. 1 UV transmittance at 500 nm versus standing time for JP-10 oxidation residues with different block copolymers: (a) copolymer type, (b) monomer ratio

关键词: 嵌段共聚物; 清净分散剂; 碳氢燃料

参考文献

- [1] Liu Z.; Yuan S.; Gong S.; Liu G. *Fuel*. 2021, **303**: 121250.
- [2] Jiang P.; Mi J.; Shao C.; Dai Y.; Yan S.; Guo Y.; Fang W. *J. Phys. Chem. C*. 2023, **127**: 14645-14655.
- [3] Sun B.; Wang P.; Shao C.; Jiang P.; Guo Y.; Yan S.; Fang W. *Fuel*. 2025, **385**: 134164.
- [4] Yuan Z.; Guo Y.; Fang W. *Energy*. 2025, **320**: 135265.

致谢: 感谢国家自然科学基金项目 (22127802) 的资助!

Study of antibacterial activity of high-entropy oxides containing Fe, Mn, Al, Ce, and La

Shuang Cai^{*}, Xing-Peng Lv, Xin Ding^{**}, Yan-Jun Hu^{**}

Hubei Key Laboratory of Pollutant Analysis & Reuse Technology, College of Chemistry and Chemical Engineering, Hubei Normal University, Huangshi, 435002 PR China

^{**}Email: dingx@hbnu.edu.cn, ^{**}Email: huyj@hbnu.edu.cn

High-entropy spinel materials have shown great potential in the field of photothermal conversion due to their unique compositional tunability and excellent physicochemical properties, providing a novel approach for the development of efficient and novel photo-responsive antibacterial agents. High-entropy oxides containing five metal elements (Fe, Mn, Al, Ce, and La) with the ability to scavenge reactive oxygen species were synthesized by the sol-gel method. Under near-infrared (NIR) irradiation, the multi-component synergy significantly enhanced the light absorption and photothermal conversion efficiency, and the surface temperature of the material could rapidly rise to a level sufficient to disrupt bacterial structures ($>50^{\circ}\text{C}$). More importantly, the photothermal process promoted the generation of a large amount of reactive oxygen species (ROS) on the material surface. This highly oxidative ROS environment triggered by the efficient photothermal effect, in conjunction with the local high temperature, exhibited excellent bactericidal effects against Gram-positive bacteria (such as MRSA), with antibacterial efficiency far exceeding that of single thermal effects or traditional photocatalytic materials, demonstrating its outstanding advantages in biomedical anti-infection applications.

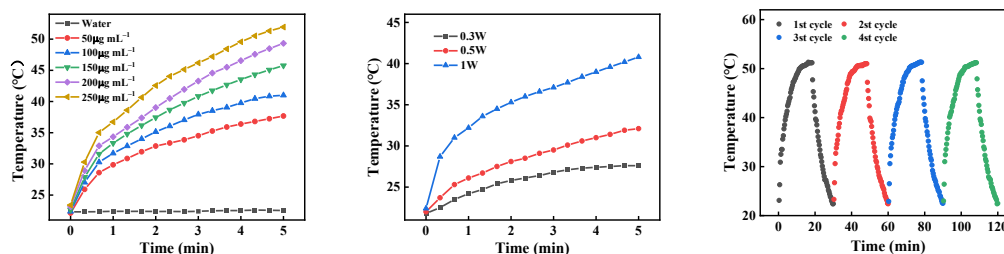


Fig. 1. Photothermal heating curves of HEOS aqueous solutions irradiated by an 808 nm laser (A) at different concentrations, (B) at different power densities, (C) over 4 cycles

Keywords: Photothermal effect; reactive oxygen species; antibacterial mechanism

References

- [1] Wang Y.; Liu K.; Wei W.; Dai H. *Adv. Funct. Mater.* 2024, **34**: 2402531.
- [2] Huan J.; Jia X.; Wang Y.; Qiao Y.; Jiang X. *Adv. Healthc. Mater.* 2025, **14**: 2400401.

The antioxidant mechanism of Prussian blue nanoenzymes:

A new strategy for treating kidney damage

Wen Lin^{*}, Ze-Wei Feng, Xin Ding^{**}, Yan-Jun Hu^{**}

Hubei Key Laboratory of Pollutant Analysis & Reuse Technology, College of Chemistry and Chemical Engineering, Hubei Normal University, Huangshi, 435002 PR China

^{**}Email: dingx@hbnu.edu.cn; ^{**}Email: huyj@hbnu.edu.cn

Excessive reactive oxygen species (ROS) generated through oxidative stress is an important pathogenic factor for acute kidney injury (AKI), which can lead to lipid peroxidation of renal tubular epithelial cells, mitochondrial dysfunction, and DNA damage, thereby triggering inflammatory cascades and cell apoptosis. Traditional antioxidants, due to their poor targeting, low catalytic efficiency, and short in vivo half-life, are difficult to achieve effective intervention in renal lesions.

To overcome the limitations of traditional antioxidants, we developed Prussian blue nanoparticles (PB NPs) with triple enzyme mimetic activity (superoxide dismutase/hydrogen peroxide enzyme/glutathione peroxidase). PB NPs specifically accumulate in damaged kidney tissues and remove various ROS through the redox cycle of iron ions, while simultaneously activating the Nrf2-Keap1 antioxidant pathway. In AKI models, PB NPs significantly reduced oxidative stress and inflammatory responses, and restored renal function. This work demonstrates the potential of nanozyme-mediated dual-mode therapy in the treatment of kidney diseases related to reactive oxygen species.

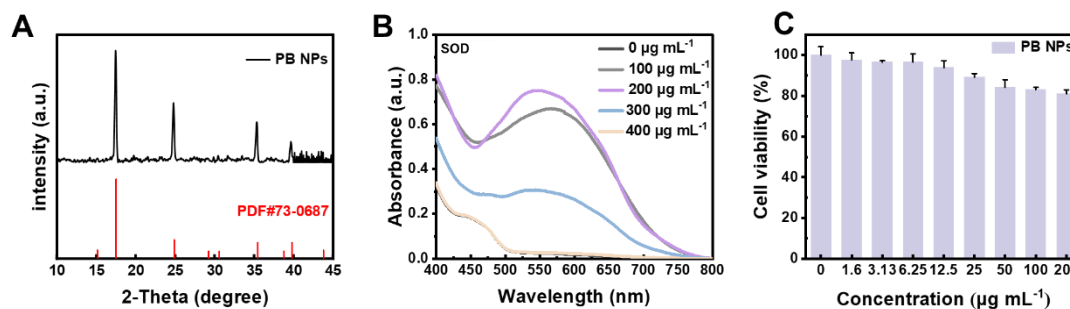


Figure 1 (A) XRD characterisation profile of PB/NPs. (B) Ability of PB/NPs to scavenge $\cdot\text{O}_2^-$ with increasing concentration. (C) Effect of PB NPs on HK-2 cell viability ($200\text{ }\mu\text{g mL}^{-1}$).

Keywords: Reactive oxygen species; Kidney injury; Antioxidant

Reference

- [1] Ren Y.; Wu F.; Huo L.; Wang X. *Mater. Today Bio.* 2024, **29**: 101328.
- [2] Wu A.; Li M.; Chen Y.; Zhang W. *Adv. Healthc. Mater.* 2024, **13**: 2302556.

在层状双氢氧化物中构建高熵和异质结工程用于提高电解水反应性能

闫峰峰, 李伟*

首都师范大学化学系, 北京市海淀区西三环北路 105 号, 100048

*Email: wli@cnu.edu.cn

“碳达峰、碳中和”目标政策是我国应对全球气候变化、推动经济社会可持续发展的重大战略决策。在这一目标指引下, 发展可再生能源转换技术成为关键。电催化全解水技术因其绿色、高效的特性, 在推动能源结构低碳转型技术中引起广泛关注。其中, 开发高活性且耐久的非贵金属催化材料是推动电解水技术发展的关键一环。高熵层状双氢氧化物 (HELDHs) 因其丰富的活性位点, 多金属协同作用优化的电子结构, 结构可调等优点得到深入探索应用; MoS_2 在电催化方面有高载流子迁移率, 高热导率, 独特的界面性质等优点; 超临界 CO_2 技术以超临界 CO_2 (scCO_2) 作为绿色溶剂可以剥离制备二维纳米片, 剥离后的纳米片提高了电导率, 增大比表面积等^[1,2]。在本工作中, 我们合理地构建了 HELDH 与 $1\text{T}/2\text{H}-\text{MoS}_2$ 相耦合的异质结催化材料。采用水热法合成 HELDH, 超临界 CO_2 技术剥离 HELDH 和 MoS_2 , 再通过静电自组装形成 HELDH/ MoS_2 异质结。多种金属掺入和异质结之间的协同作用导致 $\text{O } 2\text{p}$ 带的上移, 触发了晶格氧机制 (LOM), 提高了本征活性。通过电化学测试, 该材料对于析氧反应 (OER) 在 10 mA cm^{-2} 时具有极低的过电位 220 mV 优于商业催化剂 RuO_2 (290 mV)。在 OER 和 HER 电化学 2000 次 CV 循环测试稳定性中 HELDH/ MoS_2 性能分别衰减 14 mV 和 2 mV 并在 $i-t$ 稳定性测试中表现出比 RuO_2 和 Pt/C 优异的稳定性。将催化剂应用于组装的全解水装置中, 全解水电压和稳定性均优于 $\text{Pt}|\text{ClRuO}_2$ 组装的全解水装置。通过高熵和异质结工程与绿色制备技术结合, 为应用在全解水非贵金属催化剂的合成提供新方法并在清洁能源领域展现应用价值。

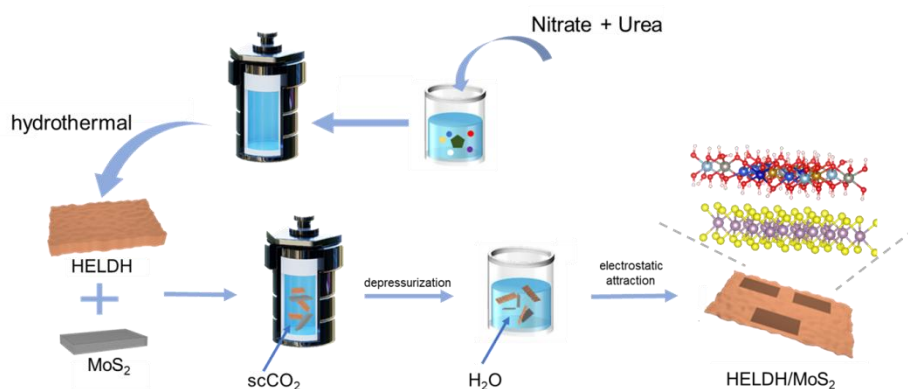


图 1 二维/二维 HELDH/ MoS_2 异质结复合材料的合成过程

关键词: 超临界二氧化碳; 高熵材料; 层状双氢氧化物; 氧析出反应; 电催化全解水

参考文献

- [1] Wang H.; Ma Y.; Tang S.; Liang Y.; Zhang D.; Jin X.; Wang Q.; Sun W.; Zheng L.; Li W. *Carbon*. 2024, **218**: 118723.
- [2] Tang S.; Ma Y.; Wang H.; Liang Y.; Xu X.; Zhang D.; Cao B.; Wang Q.; Li W. *ChemSusChem*. 2023, **16**: e20220218.

低熔混剂

陈钰*

廊坊师范学院 化学与材料科学学院, 河北廊坊, 065000

*Email: yuchen@iccas.ac.cn

自2003年Abbott等^[1]首次提出低共熔溶剂 (deep eutectic solvents, DESs) 以来, 该领域受到了广泛关注。DESs是一种具有显著共熔效应的多组分混合物, 其固液相图中应具有水平的三相线 (eutectic), 并且实际液相线应显著低于理想液相线 (deep)。然而, 大多数报道的DESs并未测试固液相图, 或固液相图中不存在水平三相线和更低实际液相线。

为了解决近20年来DESs理论与实际应用之间的矛盾, 2023年清华大学尉志武教授课题组^[2]首次提出了低熔混剂 (low-melting mixture solvents, LoMMSs) 这一概念。LoMMSs是指熔点低于其组分熔点的混合物, 突破了传统共熔原理降低熔点的局限, 旨在实现工业应用所需的低熔点, 从而进一步拓展了绿色溶剂和绿色化学的范围。因此, LoMMSs更符合实际需求, 成功弥补了20多年来DESs理论与实际之间的差距。自2023年提出以来, LoMMSs在机理、合成、分离等多个领域备受关注,^[3-14] 且Google Scholar数据显示其^[2]总被引次数已高达70余次。

参考文献

- [1] Abbott A.P.; Capper G.; Davies D.L.; Rasheed R.K.; Tambyrajah V. *Chem. Commun.* 2003, 70–71.
- [2] Chen Y. Yu Z. *Green Chem. Eng.* 2024, **5**: 409-417.
- [3] Kalthor P.; Sun Z.; Yu Z. *J. Phys. Chem. B* 2024, **128**: 2490–2503.
- [4] Fu L.; Liu Y.; Guo J.; Zhang X.; Li W.; Zhao J.; Zhen Z.; Chen Y. *Biomacromolecules* 2025, **26**: 1274–1282.
- [5] Chen Y.; Zhao M.; Chen J.; Dong J.; Niu Z.; Wang T.; Wang C.; Zhang Y. *Battery Energy DOI*: 10.1002/bte2.20240091 (2025) 20240091.
- [6] Chen Y.; Zhang X.; Wang C.; Shi Z.; Wang X.; Dong J.; Wang Y.; Feng M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2025, **27**: 12004-12015.
- [7] Chen Y.; Shen Y.; Liu Z.; Yang M.; Zhang Y.; Niu Z.; Wang Y.; Feng M.; Shi Z. *ChemSusChem* 2025, 18: e202402457.
- [8] Chen Y.; Liang H.; Zhang Q.; Zhao G.; Liu Z.; Guo Y.; Yang Z.; Wang T.; Chen J. *Sep. Purif. Technol.* 2025, **354**: 128967.
- [9] Xu J.G.; Wang L.; Lyu X.; Li M.; Su K.; Li S. *J. Mol. Liq.* 2024, **403**: 124812.
- [10] Shen X.; Zhong L.; Li L.; Zou B.; Suo H.; Yan L. *J. Mol. Liq.* 2024, **398**: 124253.
- [11] Niu J.; Wang H.; Zhang Z.; Li J.; He Y.; Hao J. *Process Saf. Environ.* 2024, **190**: 77-84.
- [12] Liu C.; Han X.; Zhang Q.; Shi Z.; Zhang Y.; Chen Y. *J. Indian. Chem. Soc.* 2024, **101**: 101458.
- [13] Huang X.; Dong W.; Luo X.; Xu L.; Yang D.; Wang Y. *J. Mol. Liq.* 2024, **414**: 126179.
- [14] Alomari N.; Maletta A.; Aparicio S.; Gutiérrez A.; Atilhan M. *J. Mol. Liq.* 2024, **407**: 125170.

基于热可逆粘结剂的 RDX/Al 基复合含能材料制备与性能调控研究

邹成岭^{1,*}, 南海², 马海霞^{1,3,**}

¹ 西安特种能源材料重点实验室, 西北大学化学工程学院, 西安, 710127

² 西安近代化学研究所, 陕西西安, 710065

³ 智剑实验室, 西安, 710025

*Email: 1547019120@qq.com, **Email: mahx@nwu.edu.cn

为研究热可逆粘结剂配比对 Al/RDX(环三亚甲基三硝胺)基复合含能材料关键性能的影响, 采用声共振混合技术, 制备了粘结剂质量分数为 3%-13.5%梯度的 RDX/Al 基复合含能材料, 并浇注成型为药柱。采用扫描电子显微镜 (SEM) 和 X 射线衍射 (XRD) 分别表征了复合含能材料的表面形貌与晶体结构。利用热重分析 (TGA) 评估了粘结剂的热稳定性, 并通过差示扫描量热法 (DSC) 探究了复合含能材料的热分解行为。最后, 系统研究了复合材料的机械感度、燃烧性能及力学性能。结果表明, 粘结体系的加入未改变 RDX 晶型且随着粘结剂含量的增加含能药柱的微观形貌得到优化。热可逆粘结剂的失重过程分为三段, 并有着较好的热稳定性和较高的降解温度 (最大失重温度为 510 °C)。在 10 °C/min 升温速率下, 复合含能材料中 RDX 的热分解峰值温度较纯 RDX 呈现降低的趋势。此外, 不同升温速率下的动力学分析表明, 粘结剂与 Al 粉的协同作用降低了 RDX 的热分解活化能。机械感度测试结果表明, 当热可逆粘结剂含量达到 13.5%时, 复合含能材料的撞击能量较纯 RDX 提高 83%, 达到 11 J, 摩擦感度临界载荷高于 360 N。力学测试表明, 随粘结剂含量增加, 含能药柱抗压强度呈先增后减趋势, 在 10 wt%含量时达峰值强度 (11.73 Mpa), 同时破坏模式由脆性劈裂向剪切滑移转变。研究结果为工艺适应性强的可控固化含能材料提供了新思路。

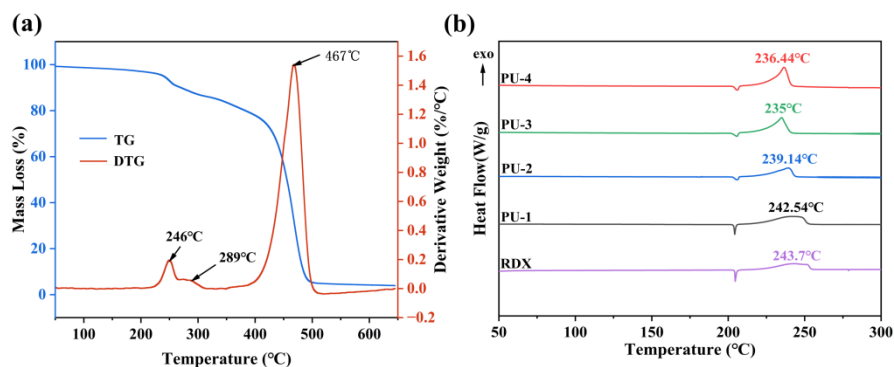


图 1 (a) 粘结剂的 TG 曲线; (b) RDX 和复合含能材料在 10 °C/min 下的升温曲线

关键词: 热可逆粘结剂; 复合含能材料; 热分析; 机械感度; 点火燃烧性能

参考文献

- [1] Cheng W. ; Mu J. ; Li K. ; et al. *J. Energ. Mater.* 2023, **41**: 595.
- [2] Ji W. ; Duan Y. ; Dong J. ; et al. *RSC Adv.* 2025, **15**: 9216.

致谢

本研究得到中国国家自然科学基金的资助(No. 22473089)。

多孔框架对 NH₃ 的高效捕集与分离

王键吉

河南师范大学化学化工学院，绿色化学介质与反应教育部重点实验室，河南新乡，453007

*Email: jwang@htu.edu.cn

近年来，离子液体已用于 NH₃ 的捕集，并展示了优良的捕集性能。但是，由于离子液体的比表面积小，其活性捕集位点不能得到充分的暴露和利用，捕集容量仍然偏低。MOF、COF、分子筛等孔状材料具有大孔隙率和高比表面积，将离子液体高度分散在这些孔状材料的孔道表面，为解决这一问题提供了新的思路。在这种情况下，如果能够对孔状材料的微结构进行适当的调控，即可发挥离子液体与孔状材料的协同作用，实现 NH₃ 的高效捕集、低能耗脱附和选择性分离。

本文结合作者实验室的部分研究工作，重点介绍近两年来离子液体杂化多孔材料的设计、微纳结构调变、吸附性能调控及其对 NH₃ 的高效捕集和选择性分离方面的研究进展，主要包括：多位点离子杂化孔状材料的微纳结构调控及其对 NH₃ 的高效捕集，光响应孔状材料的设计及对吸附 NH₃ 的低能耗脱附，离子杂化孔状材料的性能调控及针对空气净化和某些工业过程中 NH₃ 的选择性分离，目前尚待进一步研究的主要问题。

关键词：离子液体；杂化材料；NH₃捕集

参考文献

- [1] Snyder B.; Turkiewicz A.; Furukawa H.; Paley M.; Velasquez E.; Dods M.; Long J. *Nature* 2023, **613**: 287-291.
- [2] Shi Y.; Wang Z.; Li Z.; Wang H.; Xiong D.; Qiu J.; Tian X.; Feng G.; Wang J. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, **61**: e202212032.
- [3] Tian X.; Zhao X.; Wang Z.; Shi Y.; Li Z.; Qiu J.; Wang H.; Zhang S.; Wang J. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, **63**: e202406855.

基于静电喷雾技术的 F2603/DNTF/Al 复合材料：热稳定性与燃烧性能研究

李倩^{1,*}, 南海², 任莹辉^{1,**}, 马海霞^{1,3,**}

¹ 西安市特种能源材料重点实验室, 西北大学化工学院, 陕西 西安, 710127

² 西安近代化学研究所, 陕西 西安, 710065

³ 智剑实验室, 陕西 西安, 710025

*Email: 2608672011@qq.com, **Email: yiren@nwu.edu.cn, **Email: mahx@nwu.edu.cn

采用静电喷雾技术制备了形貌规则、组分均匀的 F2603 (氟橡胶)/DNTF (3,4-二硝基呋喃基氧化呋喃)/Al 复合材料 (简称为 E-x), 系统研究了铝含量 (5-35 wt%) 对其热分解行为与燃烧性能的影响。结果表明, 物理混合法与静电喷雾法制备的 F2603/DNTF/Al 复合材料, 其放热峰温较原料 DNTF (放热峰温为 265.1 °C) 均显著升高。具体而言, E-5%、E-15%、E-25% 和 E-35% 的放热峰温分别为 268.9 °C、274.0 °C、278.6 °C 和 280.5 °C, 较 DNTF 分别提升了 3.8 °C、8.9 °C、13.5 °C 和 15.4 °C。同时, 复合材料的表观活化能增加了 11.05-26.5 kJ·mol⁻¹, 证实纳米铝的加入有效提升了材料的热稳定性。随着铝含量的增加, F2603/DNTF/Al 复合材料的火焰高度、燃烧强度及燃烧速率均逐步提高, 其中 E-35% 的增压速率达到了 178.3 kPa·ms⁻¹, 较物理混合样品 (P-35%) 提升了 88.3%。因此, 静电喷雾技术不仅能够提升复合材料的热稳定性, 更能显著增强其能量释放性能。

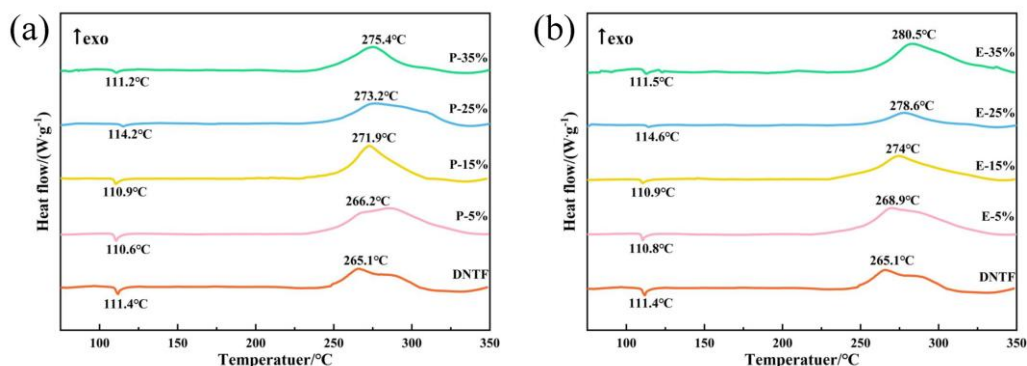


Fig. 1. (a) P-x and (b) E-x 在 10°C 升温速率下的 DSC 曲线

关键词: 静电喷雾; DNTF; Al; 热分析; 燃烧性能

参考文献

- [1] Lan G.; Zhang G.; Chao H.; L, Z.; Wang J.; Li J. *Chem Eng J.* 2022, **434**: 134513.
- [2] Fang H.; Zhou, J.; Deng P.; Zhu P.; Guo X. *Energ Mater Front.* 2022, **3**: 233-239.

致谢

本研究由陕西省重点科技创新团队项目 (No. 2022TD-33) 提供资助。

二维材料在离子液体中的液相剥离

王慧勇*, 郭莹莹, 宋韬, 庞超杰, 王键吉**

河南师范大学化学化工学院, 绿色化学介质与反应教育部重点实验室, 河南新乡, 453007

*Email: hywang@htu.edu.cn, **Email: jwang@htu.edu.cn

二维层状材料具有低密度、高机械强度、低摩擦系数、良好的导热性等优点使其在能源、环境、电子、生物等方面得到了广泛的应用。二维层状材料包括石墨烯、黑磷、六方氮化硼、过渡金属硫族化合物、金属-有机框架、共价有机框架(COF)等。在现有制备方法中,液相剥离法是一种适合大规模生产二维层状材料的可行方法之一^[1-3]。但是,目前二维层状材料的液相剥离普遍存在产率较低、所使用的溶剂大部分具有毒性等问题。离子液体具有极低的蒸汽压、优异的溶解能力、良好的热稳定性,为二维层状材料的液相剥离提供新的机遇。基于此,我们系统地研究了离子液体在COF、MX₂ (M= Ti、Zr、Hf、Mo, X=S、Se、Te)液相剥离中的构效关系,获得了高效的液相剥离体系。研究表明,离子液体应具有合适的分子尺寸、与二维材料匹配的表面能和相适应的Hansen溶度参数及其较强的相互作用等特性。只有满足这些条件的离子液体,才有可能用于IVB族过渡金属硫族化合物的高效和层数可控的液相剥离。

关键词: 二维材料; 液相剥离; 离子液体; 机制

参考文献

- [1] Guo Y.; Zhang Q.; Gao S. et al., *Green Chem.* 2022, **24**: 9530.
- [2] Wang H.; Song T.; Su X. et al., *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2020, **8**: 1262.
- [3] Pang C.; Liu, J.; Wang, H. et al., *J. Mol. Liq.* 2023, **381**: 121814.

离子液体分离共沸物的相平衡和机理研究

周瑜*

青岛大学化学化工学院，山东省青岛市宁夏路 308 号，266071

*Email: zhouyu@qdu.edu.cn

共沸物分离作为化工分离的典型难题广泛存在于工业生产中（如水-醇、酯-醇、醇-酮等体系），其组分因沸点相近或形成共沸点，导致常规精馏无法实现有效分离。离子液体具有独特的物化性质（如近零挥发性、高热稳定性、强溶解性等），作为夹带剂/萃取剂可避免传统有机溶剂的高挥发性污染，同时规避无机盐结晶导致的设备损耗等问题，因而成为共沸物分离的理想夹带剂/萃取剂。

本工作主要介绍了本课题组以离子液体作为夹带剂/萃取剂通过精馏萃取和液液萃取分离共沸物的研究。通过充分考虑共沸体系和离子液体的组成与结构，构建不同的离子液体-共沸体系。通过COSMOthermX软件对离子液体的阴阳离子进行筛选，通过相平衡实验，找到离子液体打破共沸的最小浓度；通过采用谱学（红外光谱、超额红外光谱）并结合理论计算（量子化学计算和分子动力学模拟）等实验技术和手段，围绕复合离子液体对共沸体系微观结构调控规律开展系统研究，重点研究离子液体破共沸效应与对混合溶液微观结构和相互作用的影响规律。

关键词：共沸；离子液体；分离机理；相平衡；氢键

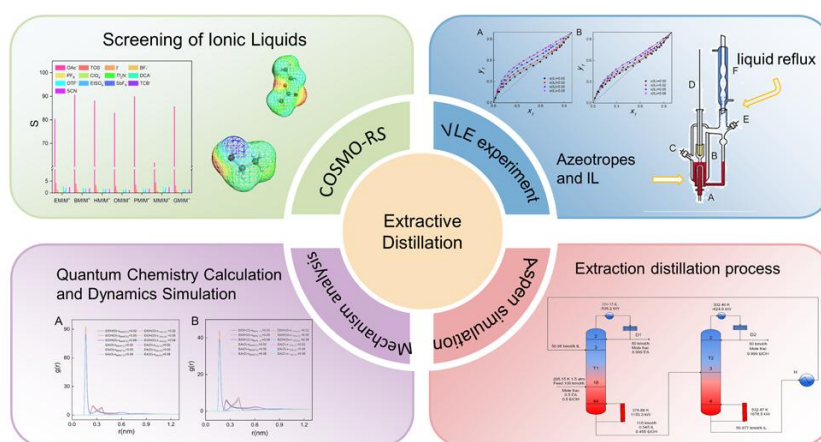


图 1. 离子液体分离乙醇和乙酸乙酯的流程图

A flexible hydrated salts phase change film for efficient thermal dissipation of electronic devices

Qirui Wang¹, Xiang Wang^{2,*}, Xiaobin Gu¹, Yongquan Zhou¹, Hongen Nian^{1,*}

¹Key Laboratory of Green and High-end Utilization of Salt Lake Resources, Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Key Laboratory of Salt Lake Resources Chemistry of Qinghai Province, Xining 810008, China

²Center of Digital Dentistry, Faculty of Prosthodontics, Peking University School and Hospital of Stomatology & National Center of Stomatology & National Clinical Research Center for Oral Diseases, Beijing 100081, China.

*Email: nhe@isl.ac.cn, **Email: xiangwang@pku.edu.cn

Electronic devices' transient high-heat flux endangers safe operation, requiring efficient thermal dissipation materials to prevent thermal runaway. Phase change materials (PCMs) exhibit excellent heat absorption during phase transition, positioning them as ideal thermal interface candidates. Herein, a hydrated salts phase change film (HSPCFs) comprising three key components has been developed: a thermal storage hydrated salt (sodium acetate trihydrate) offers high heat enthalpy, high thermally conductive expanded graphite network serving as the structural skeleton, and a flexible, insulated adhesive matrix made of polyvinylidene fluoride. The HSPCF exhibits excellent flame retardancy (UL-94 V-0) and electrical insulation properties (9.81 KV/mm). The temperature-responsive flexibility of HSPCF enables conformal contact with heat-generating components during phase transitions, minimizing air gaps and thermal resistance. To demonstrate thermal management capacity of the HSPCF, we fabricated a proof-of-concept device. Results show it lowers thermal runaway battery temperatures by 10°C and reduces high-power CPU surface temperatures by ~17°C. The heat dissipation properties of the HSPCF developed in this work offering a promising solution for next-generation thermal management.

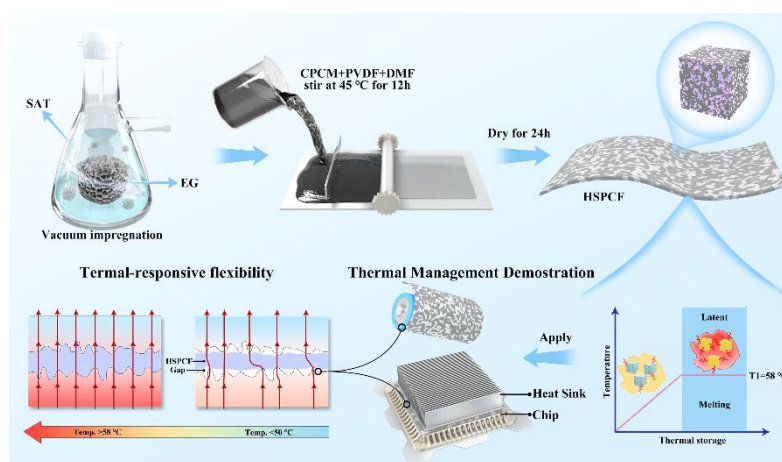


Fig 1. HSPCF preparation process and schematic diagram.

Key Words: Thermal management; Phase change material; Temperature-responsive flexibility

Breaking stereotypes: Continuous direct lithium extraction from seawater via an unconventional selective solid electrolyte

Jinghui Li, Yafei Guo*, Tianlong Deng*

State Key Laboratory of Bio-based Fiber Materials, Key Laboratory of Marine Resource Chemistry and Food Technology (TUST) in the Ministry of Education, College of Marine and Environmental Sciences, Tianjin University of Science and Technology, Tianjin, 300457, P.R. China.

*Email: guoyafei@tust.edu.cn and tldeng@tust.edu.cn

With the significant depletion of terrestrial lithium resources, attention has shifted toward seawater, which holds the largest total lithium reserves on Earth. However, extracting lithium from seawater presents a complex challenge due to its intricate composition and extremely low concentration of lithium ions. Herein, we demonstrated using inexpensive selective solid electrolyte for lithium recovery from seawater resources through electrodialysis. This method effectively separated lithium and sodium from seawater. It extracted lithium ions from raw seawater at an initial concentration of 0.17 mg/L and enriched them to 22.25 mg/L in the receiving solution. The sodium and magnesium ion concentrations in the receiving solution were only 33.5 mg/L and 0.66 mg/L. The Li/Na selectivity ($S_{Li/Na}$) and Li/Mg selectivity ($S_{Li/Mg}$) were remarkably high, reaching 42,000 and 240,000, respectively. Furthermore, density functional theory (DFT) was employed to investigate the factors contributing to the high selectivity of lithium and sodium ions during the lithium-selective solid electrolyte delivery process. The calculated desolvation energies for lithium and sodium hydrated ions on the surface of crystal were found to be 1.31 eV and 2.06 eV, respectively. The diffusion energy barriers for lithium and sodium ions within the crystals were determined to be 0.33 eV and 0.90 eV, respectively. XAS and XRD refinement revealed that the lithium-ion conductor remained stable without any signs of decomposition after 50 hours of operation in seawater, highlighting its strong potential for industrial application.

Keywords: Lithium-extraction; Lithium selective-solid electrolyte; Electrochemical lithium recovery

References

- [1] Yang S.; Wang Y.; Pan H.; He P.; Zhou H. *Nature* 2024, **636**: 309-321.
- [2] Zhang Y.; Sun W.; Xu R.; Wang L.; Tang H. *J. Clean. Prod.* 2021, **285**: 124905.

单分子石墨烯量子点光动力抗肿瘤应用

高天*

武汉科技大学，湖北省武汉市青山区和平大道 947 号，430081

*Email: gaotian@whu.edu.cn

石墨烯量子点（GQDs）因其优异的光学性质、高稳定性、良好的生物相容性以及强光致活性氧（ROS）生成能力，被视为理想的新一代可视化抗肿瘤纳米光敏剂。然而，GQDs 微观结构极难调控，常规方法无法得到结构明确的产物，这严重限制了其生物学应用。本研究创新单分子纳米材料的有机合成策略，成功构建并精确制备了水溶性优良的D-12A型单分子GQD。该单分子纳米药物具备一个大型中心电子供体（D）和十二个边缘电子受体（A）的独特结构，突破了传统D-A型有机光敏剂的构型限制。实验表明，D-12A型单分子GQD展现出优异的光学性能与光动力治疗（PDT）效果，在细胞及动物模型中均发射明亮的红色荧光，其单线态氧（ $^1\text{O}_2$ ）量子产率高达0.85，对4T1细胞 IC_{50} 低至 $0.22\ \mu\text{mol L}^{-1}$ ，对荷瘤小鼠的肿瘤抑制率达71%。尤为重要的是，该光敏剂在光照30秒内即可快速释放大量的ROS，而持续光照10分钟后可有效清除残余ROS。此特性实现了高效PDT，并免除了治疗后避光的需要，避免了患者长期处于黑暗环境的不便。本工作不仅开创了有机合成法制备水溶性单分子发光碳纳米材料的先例，并极大地拓展了光敏剂的电子构型设计，将纳米药物研发推进至原子精度水平，为其临床应用提供了重要的理论依据和实践范式。

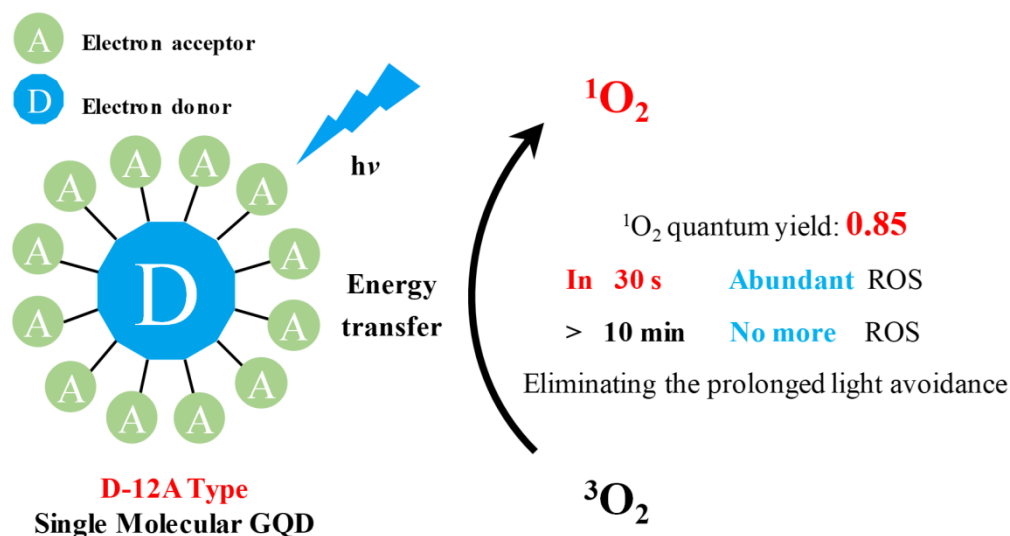


图 1 D-12A型单分子石墨烯量子点的电子结构与PDT性能示意图

关键词：单分子石墨烯量子点；单分子纳米药物；光动力治疗；抗肿瘤应用

参考文献

- [1] Chen J.; Yin S.; Yang F.; Guo S.; Zhang J.; Lu Z.; Gao T. *Chem. Sci.* 2025, **16**: 13923-13934
- [2] Gao T.; Guo S.; Zhang J.; Chen J.; Yin S.; Peng N.; Cai Q.; Xu H.; Liu Y. *Green Chem.* 2023, **25**: 8869-8884.

盐湖铷铯资源辨识吸附分离

周永全*, 庞登科, 王航宇, 景转芳, 刘忠, Muhammad Ikram

中国科学院青海盐湖研究所, 青海西宁, 810008

*Email: yongqzhou@163.com

铷 (Rb)、铯 (Cs) 是重要且昂贵的稀碱金属, 广泛应用于国防、催化、夜视成像和太阳能电池等领域。铷铯广泛存在于盐湖卤水中, 但其含量与其他宏量离子如 Na^+ 、 K^+ 、 Mg^{2+} 、 Cl^- 和 SO_4^{2-} 相比非常低, 并且在盐湖蒸发过程中常常由于形成 $(\text{K}, \text{Rb})\text{Cl}$ 和 $(\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs})\text{MgCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 等固溶体而“消失”于卤水中, 这使得实现有效的浓缩、富集与分离提取变得困难^[1]。在高离子强度下的水合和竞争络合作用进一步加剧了选择性分离的困难。萃取和吸附是从盐湖卤水中选择性提取铯的重要方法。

我们开发了一种通过预皂化 *t*-BAMBP 选择性提取铯的工艺, 该工艺可大幅减少萃取过程中的酸碱消耗。研究发现, 除了传统的酚羟基 ($-\text{OR}$) 和 Rb^+/Cs^+ 之间的静电吸引外, 离子- π 相互作用在 *t*-BAMBP 选择性提取铯中也起着重要作用^[2]。基于冠醚对碱金属离子的优秀的碱金属识别性能, 通过将 18-冠-6 醚的功能团酰胺化为羧基化的 Fe_3O_4 磁性纳米粒子 ($\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{R}-\text{COOH}$) 制备了用于 Cs^+ 的磁分离吸附剂^[3], 讨论了其高选择性的机制^[4]。进一步地, 为获得更适合盐湖卤水系统的无机吸附剂, 并解决水力性能差和易溶损失的问题, 我们设计并通过自模板方法合成了具有可控形态的钴铁氰化钾双空心纳米泡棱柱 (Co-PBA DHNP) 吸附剂^[5]。最近, 我们还制备了钾离子支撑的层状金属硫化物铯离子辨识吸附剂, 利用尺寸筛分与软硬酸碱理论 (HSAB) 实现了卤水中 Cs^+ 的选择性提取, 这些吸附剂有望实现从卤水中高效的 Cs^+ 分离和提取。

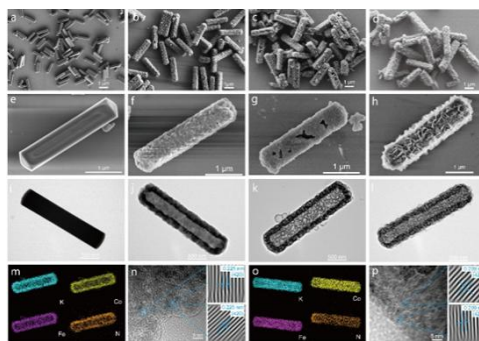


图 1 钾钴铁氰化物双空心纳米气泡棱柱 (Co-PBA DHNP) 吸附剂

关键字: 盐湖卤水; Cs^+ 吸附分离; 离子交换; 水合作用

参考文献

- [1] Gao D.; Li D.; Fan Y.; et al. *J. Salt Lake Res.* 2022, **30**: 1-11.
- [2] Liu Z.; Zhou Y.; Guo M.; et al. *J. Hazard. Mater.* 2019, **371**: 712-720.
- [3] Pan, D.; Zhang Z.; Zhou Y.; et al, *Chin. J. Chem. Eng.* 2022, **46**: 31-39.
- [4] Jing Z.; Zhou Y.; Yamaguchi T.; *J. Phys. Chem. B* 2023, **127**: 4858-4869.
- [5] Wang H.; Hu C.; D, Y.; et al. *J. Water Process Eng.* 2024, **59**: 104944.

Selective and efficient adsorption of H_3BO_3 from Salt Lake brine solution by ZIF-67-derived hollow cobalt sulfide

Yifan Shao¹, Chao Hu¹, Ruirui Liu¹, Bingxin Liu³, Yongquan Zhou^{1*},
Jianming Pan^{2**}

¹Laboratory of Comprehensive and Highly Efficient Utilization of Salt Lake Resources; Key Laboratory of Salt Lake Resources Chemistry of Qinghai Province; Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xining, Qinghai 810008, China.

²School of Chemistry & Chemical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China.

³Salt Lake Chemical Engineering Research Complex, Qinghai University; Key Laboratory of Salt Lake Chemical Material of Qinghai Province.

*E-mail: yongqzhou@163.com, **E-mail: pjmm@ujs.edu.cn

The design of adsorbents with high recognition activity, high site density and high mass transfer efficiency is the significant to the removal of specific non-metallic ions from Salt Lake brines. Here we report the fabrication of ZIF-67-derived hollow Co_3S_4 nanoadsorbent for the adsorption and separation of boron (B) in complex water from concentrated salt solutions. The adsorption experiments displayed that the B adsorption capacity of the hollow Co_3S_4 material exhibited substantial B adsorption capacity, reaching $283.3 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$, which represents an impressive 7.3-fold improvement over ZIF-67. On these grounds, a series of kinetic and thermodynamic studies were conducted, and the results revealed that the adsorption process is more consistent with the spontaneous exothermic reaction of the Langmuir adsorption isothermal model ($R^2 = 0.999$). The results of the charge density and density of states depicted that Co atoms strongly interact before and after adsorption, and that Co atoms are tend to react spontaneously with H_3BO_3 , which serves as the primary adsorption site. The interaction including electrostatic and hydrogen bonds jointly realizes in B adsorption performance with high selectivity and excellent cycle stability. This study highlighted the high adsorption performance of the hollow Co_3S_4 for boron in real water of the Salt Lake brine and provided a new idea for the design of other ZIFs derived hollow nanoadsorbent for practical applications.

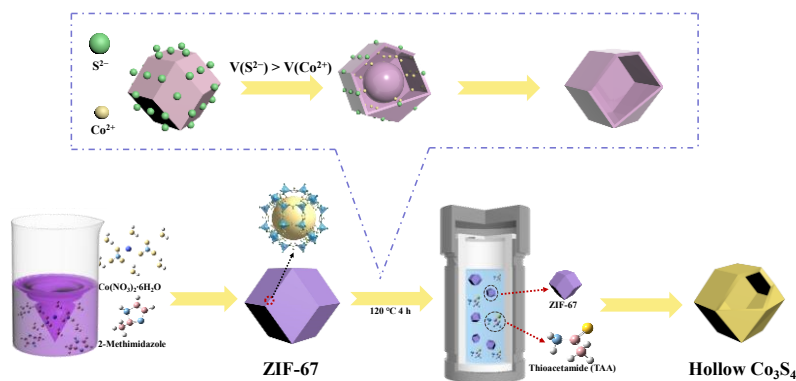


Fig. 1 Schematic illustration of the procedures to synthesize $\text{Co}_3\text{S}_4\text{-H}$.

NiCoFe-BLDH/Ni₃S₂-Fe₅Ni₄S₈/NFF 复合材料的制备及其电催化分解水性能

王文哲, 高天琦, 高焕焕, 刘志宏*

陕西省大分子科学重点实验室, 陕西师范大学化学化工学院, 西安, 710119

*Email: liuzh@snnu.edu.cn

电催化分解水中析氧反应(OER)是决定速率的半反应。因此, 制备高效、低成本的析氧催化剂至关重要^[1-3]。以具有高导电性的三维材料泡沫镍铁(NFF)为基底, 将其置于管式炉中与硫粉进行高温反应, 得到二组分异质结构的金属硫化物Ni₃S₂-Fe₅Ni₄S₈/NFF。随后将其作为纳米支撑框架结构, 通过电沉积法在其表面负载硼酸根插层NiCoFe水滑石, 制备得到NiCoFe-BLDH/Ni₃S₂-Fe₅Ni₄S₈/NFF复合材料。在制备材料的过程中, 金属硫化物Ni₃S₂-Fe₅Ni₄S₈作为支撑的框架结构方便LDH的负载, 并暴露更多的活性位点。与此同时, 异质结构可以优化电荷传输, 加快反应动力学并提升材料的整体性能。在金属硫化物表面负载LDH有利于增大材料的比表面积, 加快电子传输速率。得益于具有异质结构的金属硫化物载体和硼酸根插层水滑石的结合, 在1.0 M KOH溶液中, 当电流密度为10 mA cm⁻²时, 所制备的复合材料NiCoFe-BLDH/Ni₃S₂-Fe₅Ni₄S₈/NFF在OER/HER反应过程中的过电位为145/119 mV, 具有良好的OER/HER性能。

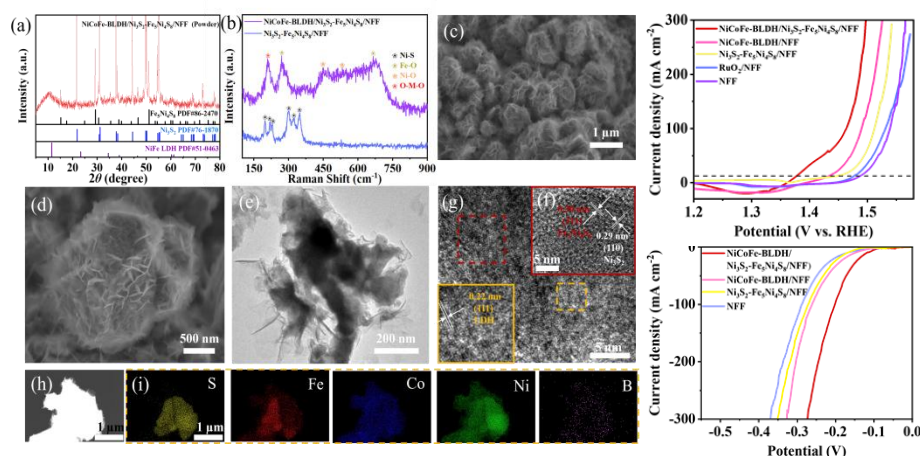


图 1 NiCoFe-BLDH/Ni₃S₂-Fe₅Ni₄S₈/NFF 的 (a) XRD 图谱, (b) 拉曼图谱, (c, d) SEM 图, (e) TEM 图, (f) HRTEM 图; (g) HRTEM 图; (h) HAADF 及 (i) EDX 元素映射图像; (j, k) LSV 曲线

关键词: 复合材料; 硼酸根插层水滑石; 电催化分解水

参考文献

- [1] Gao T. Q.; Zhou Y. Q.; Zhao X. J.; Liu Z. H.; Chen Y. *Adv. Funct. Mater.* 2024, **34**: 2315949.
- [2] Wang W. Z.; Gao T. Q.; Li X. Y.; Liu J. W.; Zhao X. J.; Liu Z. H. *ACS Appl. Nano Mater.* **2025**, **8**: 4670–4679
- [3] Wang S.; Iyyamperumal E.; Roy A.; Xue Y.; Yu D.; Dai L. *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2011, **50**: 11756.

感谢国家自然科学基金 (No. 22073061) 的资助。

手性大环膜的构筑及其用于高效对映体选择性分离研究

程诗琪^{1,*}, 孙跃^{1,**}, 刘义^{1,2,**}

¹ 天津工业大学化学学院, 纺织科学与工程学院, 先进分离膜材料国家重点实验室, 天津 300387

² 中南民族大学化学与材料科学学院, 催化材料科学湖北省重点实验室, 武汉, 430074

*Email: yiliuchem@whu.edu.cn *Email: sunyue@tiangong.edu.cn

手性在自然界无处不在, 手性分离膜具有环境友好、低能耗和连续分离的特点, 是手性分离工业应用的重要方法之一。^[1,2] 对手性分离膜的研究有利于低碳经济和医药健康领域的发展, 本工作设计了以双萘酚为基础的手性大环分子作为手性膜的构筑基元, 通过界面聚合的方法制备了手性大环膜(*R*-TMC 膜)。通过扫描电镜, 原子力显微镜, X 射线光电子能谱等表征证明了手性大环膜的成功制备。我们对所制备的 *R*-TMC 膜进行高效对映体选择性分离性质研究, 实验结果表明该手性大环膜对 1-苯乙醇、 α -苯乙胺和布洛芬等外消旋混合物展现出良好的对映体选择性分离效果。在错流过滤条件下, 该 *R*-TMC 膜对 *S*-(-)-1-苯乙醇表现出高效的对映体选择性(*ee*=92%, 通量= $1.66 \times 10^{-2} \text{ mol m}^{-2} \text{ h}^{-1}$)。此外, 该 *R*-TMC 膜对高附加值手性药物沙丁胺醇也具有良好的对映体分离效果(*ee*=97.2%)。我们对跨膜过程中 *R*-(+)-1-苯乙醇和 *S*-(-)-1-苯乙醇的阿伦尼乌斯曲线进行最小二乘拟合, 计算得到的活化能分别为 68.3 和 52.8 kJ/mol, 活化能的显著差异证明 *R*-TMC 膜对 *S*-(-)-1-苯乙醇的有效对映体选择性。此外, 密度泛函理论计算和分子动力学模拟进一步验证了高效的对映选择性分离可能归因于阻碍运输机制。本研究表明该手性大环分离膜在手性药物分离领域具有一定应用潜力, 有望为绿色化工、医药健康等可持续发展领域提供新的技术支撑。

关键词: 手性, 大环, 膜, 对映体选择性分离

参考文献

- [1] Lee H.-E.; Ahn H.-Y.; Mun J.; Lee Y. Y.; Kim M.; Cho N. H.; Chang K.; Kim W. S.; Rho J.; Nam K. T. *Nature* 2018, **556**: 360.
- [2] Cheng S.-Q.; Liu Y.; Sun Y. *Coord. Chem. Rev.* 2025, **534**: 216559.

有机聚苯胺网状包覆氧化铟实现高效制氢性能的研究

焦正旭^{1,*}, 杜建平^{1,2,**}

¹ 太原理工大学, 山西太原迎泽西大街 79 号, 030024

² 气体能源高效利用山西省重点实验室, 山西太原迎泽西大街 79 号, 030024

*Email: 2024310151@link.tyut.edu.cn, **Email: dujianping@tyut.edu.cn

“双碳”背景下, 研发高效光催化制氢技术对构建清洁能源体系具有战略意义[1, 2]。金属氧化物光催化剂因稳定性高、成本可控等优势成为研究热点, 其中 In_2O_3 因具有合适的能带结构和良好的光热效应, 被视为潜在的光催化材料。然而, 纯 In_2O_3 因光生载流子复合速率快、表面活性位点匮乏, 在光催化制氢反应中活性极低, 限制了其实际应用[3]。针对上述瓶颈问题, 本研究在 In_2O_3 纳米材料表面负载不同含量聚苯胺 (PANI) 构建有机-无机异质结。通过表征分析, 系统研究复合光催化剂的光吸收性能、电荷分离效率及光催化制氢活性。当 PANI 负载量为 15 wt% 时, 复合材料的产氢速率可达 $1137.0 \mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$, 远高于 In_2O_3 活性, 优异的性能主要归因于 PANI 与 In_2O_3 之间形成的紧密异质结结构, 优化了界面能带匹配, 极大地促进了光生电子从 PANI 向 In_2O_3 的高效转移, 有效抑制了电荷复合, 并利用 PANI 的优异空穴传输能力延长了载流子寿命, 在光催化制氢领域展现出良好的应用潜力, 为设计金属氧化物复合高效异质结光催化剂提供了新思路。

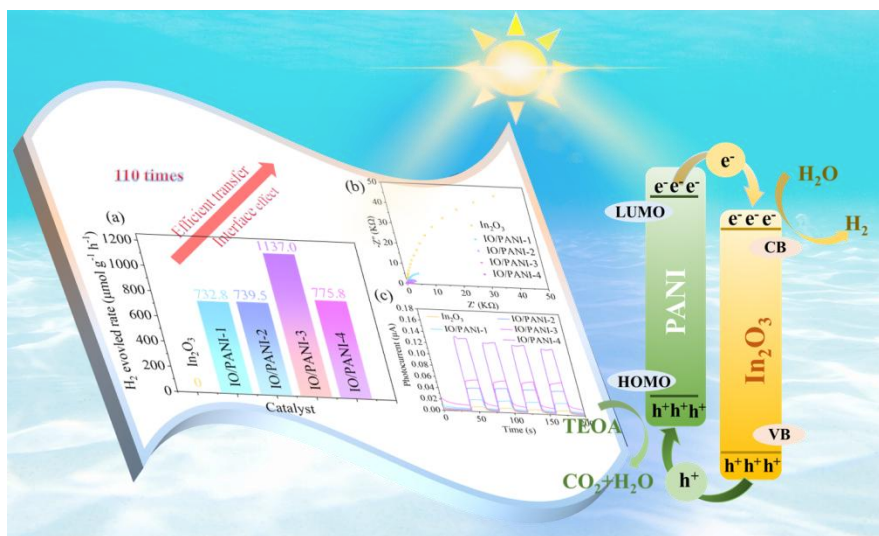


图 1 可见光下 In_2O_3 @PANI 有机-无机光催化剂制氢性能及其制氢机理

关键词: In_2O_3 @PANI, 有机-无机复合, 异质结, 光催化制氢

参考文献

- [1] Zhang H.; Zhu Z.; Yang M.; Li Y. *Nanomaterials* 2023, **13**: 401.
- [2] Lu P.; Liu K.; Liu Y.; Ji Z.; *Appl. Catal. B Environ.* 2024, **345**: 123697.
- [3] Gunawan D.; Zhang J.; Li Q.; Toe C.; Scott J.; *Adv. Mater.* 2024, **36**: 2404618.

Fe/Zn dual-sites modulated MoS₂@NC: Unlocking efficient bifunctional oxygen electrocatalysis

Jialin Li, Hao Wang, Zhengqiang Xia, Sanping Chen, Qi Yang*

Key Laboratory of Synthetic and Natural Functional Molecule of the Ministry of Education, College of Chemistry and Materials Science, Northwest University, Xi'an, Shaanxi, 710127, China.

*E-mail: yangqi@nwu.edu.cn

Amidst the global shift towards cleaner, low-carbon energy, rechargeable zinc-air batteries (RZABs) are highly promising due to their high theoretical energy density, abundant zinc, safety, and eco-friendliness. However, commercialization is hindered by sluggish oxygen reduction (ORR) and evolution (OER) kinetics. Noble metal catalysts face scarcity, high cost, and poor bifunctionality. Nitrogen-doped carbon (NC) excels at ORR but suffers from weak OER activity and stability. In contrast, molybdenum disulfide (MoS₂) possesses abundant edge active sites and good structural stability, offering potential to compensate for the OER limitations of NC materials.

This study designed a new MoS₂@NC-FeZn bifunctional catalyst. Self-synthesized MoS₂ nanospheres were encapsulated with polyaniline, co-assembled with N-rich ligands, melamine, and Fe/Zn salts, and pyrolyzed. Fe ions coordinate with MoS₂ edge S atoms, modulating its electronic structure to enhance OER intermediate adsorption. Zn ions form stable metal-N (M-N) coordination, promoting charge transfer between MoS₂ and the NC network. Electrochemical tests (Fig. 2) confirm superior bifunctionality: In O₂-saturated 0.1 M KOH, LSV (Fig. 2a) shows an ORR half-wave potential of 0.87 V (vs. RHE). OER tests (Fig. 2b) require only 261 mV overpotential at 10 mA cm⁻². This well-designed MoS₂@NC-FeZn offers an effective strategy to overcome catalyst barriers hindering practical RZABs.

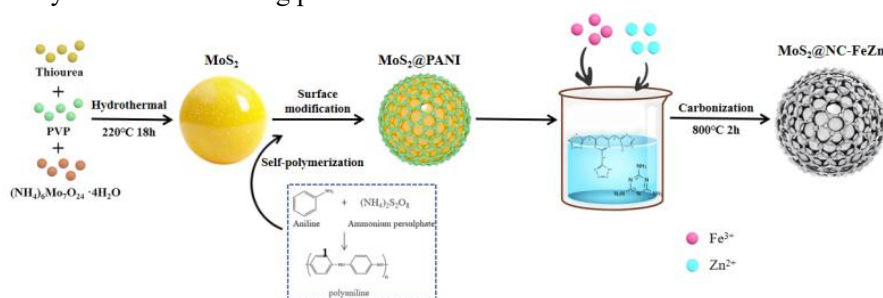


Figure 1. Schematic illustration of synthesis route to MoS₂@NC-FeZn

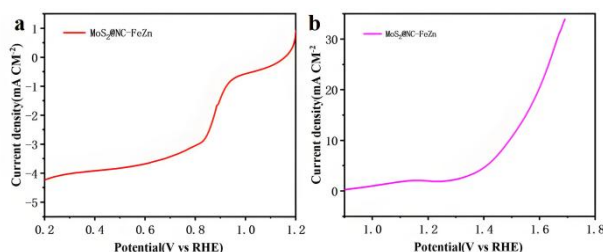


Figure 2. MoS₂@NC-FeZn: (a) ORR LSV curve (b) OER LSV curve

References

- [1] Wang Z.; Zhang Q.; Liu W.; Luo H.; Kong X.; Yang Q.; Zhang D.; Yu Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, **64**: e202425502.

离子液体膜分离气体的作用机理及分子设计

张晓春*

中国科学院过程工程研究所, 北京市海淀区中关村北二街 1 号, 100190

*Email: xchzhang@ipe.ac.cn

离子液体因其独特的物理化学性质在二氧化碳捕集领域受到广泛关注。这类室温熔融盐不仅蒸气压极低、热稳定性优异, 还能通过分子设计实现对气体的选择性吸附[1-2]。然而, 高粘度特性严重制约了其工业化应用。为解决这一技术瓶颈, 研究人员发现将离子液体与新兴的二维纳米材料相结合是极具潜力的解决方案。二维纳米材料凭借其出色的成膜性、经济性和理想的气体筛分性能, 为开发高性能复合膜提供了新思路。通过构建离子液体/二维纳米材料杂化体系, 既能实现材料间的优势互补, 又可显著改善离子液体的流动性能, 为突破气体分离膜材料的现有技术瓶颈开辟了新途径[3-5]。

本研究借助分子模拟技术深入探究离子液体/二维材料复合体系的微观作用机制及气体分离性能。通过分子动力学模拟, 重点分析了复合体系的界面相互作用、密度分布、径向分布函数、以及氢键等。同时, 基于模拟方法构建了系列超薄分离膜模型, 系统评估了其对于 CO₂、He 等气体的筛分效能, 阐明了选择性渗透的分子机制。这些模拟研究不仅从原子尺度揭示了材料结构与性能的构效关系, 更为实验开发高效离子液体基分离膜提供了重要的理论支撑和优化策略。

关键词: 离子液体; COF; 氧化石墨烯; 分离气体

参考文献

- [1] He Y.; Guo Y.; Yan F.; Yu T.; Liu L.; Zhang X.; Zheng T. *Chem. Eng. Sci.* 2021, **245**: 116946.
- [2] Yan F.; Guo Y.; Wang Z.; Zhao L.; Zhang X. *Sep. Purif. Technol.* 2022, **289**: 120736.
- [3] Xu P.; Zhang X.; Zhao L.; Wang Z.; Liu Y.; Bai L.; Liu Z. *Sep. Purif. Technol.* 2023, **311**: 123296.
- [4] Zhao L.; Guo Y.; Liu P.; Xu P.; Wang Z.; Wang Q.; Zhang X. *J. Mol. Liq.* 2023, **390**: 123044.
- [5] Wang Q.; Guo Y.; Long Y.; Liu Y.; Wang Z.; Liu Y.; Zhang X. *J. Membr. Sci.* 2024, **701**: 122766.

致谢: 国家自然科学基金面上项目 (22278399)

离子水合层演化及相互作用机制

刘亚伟^{1,*}, 徐舒婷², 尉志武²

¹中国科学院过程工程研究所, 北京, 100190

²清华大学化学系, 生命有机磷化学与化学生物学教育部重点实验室, 北京, 100084

*Email: ywliu@ipe.ac.cn

水合离子广泛存在于自然与工业体系中, 其结构具有显著的离子依赖性, 深入理解其相互作用对认识海水处理、水系电化学体系、生物离子通道等应用和自然现象至关重要。本研究通过大规模分子动力学模拟, 系统探究了水合碱金属离子 (Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 、 Cs^+ 、 Rb^+) 间的相互作用。与经典理论预测的同种电荷相斥不同, 水合离子间作用呈现复杂的离子特异性: 如 K^+ 水合离子对表现出显著的吸引力, 而 Li^+ 水合离子对则表现为排斥作用。深入分析揭示, 当水合离子相互靠近时, 其水合层中的水分子发生重排和部分脱水, 这一过程引发了离子-水作用与水-水作用的微妙竞争, 是导致离子特异性作用差异的本质原因。基于此机理, 我们通过理性设计具有“水合层孔”结构的膜材料, 利用水合离子间相互作用的差异, 实现对 Li^+ 、 Na^+ 、 K^+ 的高效选择性分离。

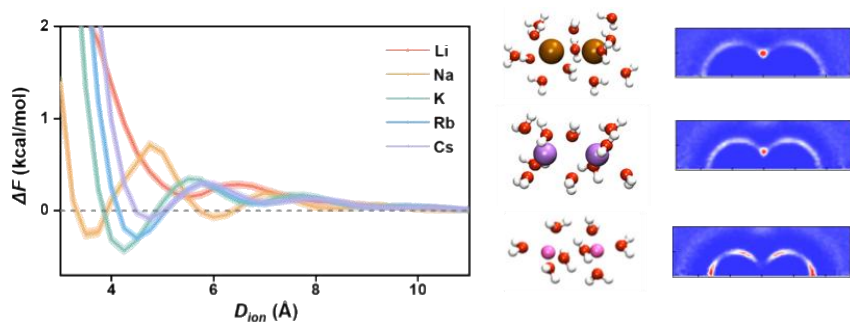


图 1 水合离子间相互作用随离子距离的变化及距离4 Å时的体系快照和水合层密度分布。

关键词: 离子水合层、相互作用、分子模拟、离子筛分、膜分离

本征柔性固-固相变材料用于人体智能热管理

寇艳, 刘汉卿, 张馨予, 史全*

中国科学院大连化学物理研究所热化学实验室, 大连, 106023

*Email: shiquan@dicp.ac.cn

目前, 人们对可穿戴电子器件和智能织物的热管理需求的快速增长, 加速了柔性热管理材料的进一步发展。在其中, 相变材料 (PCM) 凭借其在相变时近似恒温的特性在热管理领域备受人们关注, 特别是有机PCM (如聚乙二醇和石蜡), 因其具有高的储热密度, 优异的化学和热稳定性, 无毒性和优异的人体相容性而受到广泛关注。然而, 这些传统的有机相变材料存在固有的缺点, 例如固-液相变时液体泄露和刚性强, 大大阻碍了其在人体可穿戴热管理中的实际应用。基于此, 具有柔性的固固相变聚合物凭借其优异的稳定性和可纺性、可水洗性等可在可穿戴电子器件和智能热管理织物中具有重要的应用前景。

为了进一步改善固固相变聚合物自身的柔性, 我们首次通过缩聚制备了本质柔性聚氨酯聚乙二醇/4,4'-亚甲基 (环己基异氰酸酯) (PM), 并通过成膜和湿纺工艺开发了相变膜和相变纤维, 均表现出固有的固-固相变特性、具有良好的热循环稳定性 (>2000 次循环) 可调节的相变行为和出色的编织裁剪性, 所有这些都对实际可穿戴应用非常重要。此外, 固固相变聚合物可以通过直接溶解在溶剂中进行再处理来轻松回收, 从而揭示了作为热管理可持续材料的有前途的应用。固固相变聚合物为智能纺织品和可穿戴电子产品的智能热调节提供了巨大的潜力。

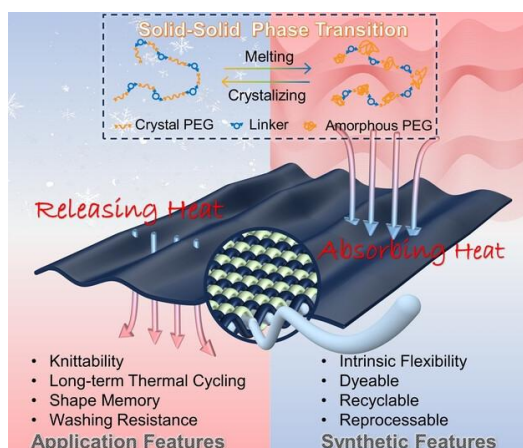


图 1 相变纤维内部结构示意图

关键词: 固固相变材料; 相变膜; 相变纤维; 热能储存; 可穿戴热管理

参考文献

- [1] Liu H.; Sun K.; Shi X.; Yang H.; Dong H.; Kou Y.; Das P.; Wu Z.-S.; Shi Q. *Energy Storage Mater.* 2021, **42**: 845.
- [2] Chen J.; Kou Y.; Zhang S.H.; Zhang X.Y.; Liu H.Q.; Yan H.M.; Shi. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, e202400759.
- [3] Zhang X.; Sun K.; Liu H.; Chen J.; Yan X.; Kou Y.; Shi Q. *Nano Energy* 2024, **121**: 109256
- [4] Deng C.; Dong H.; Sun K.; Kou Y.; Liu H.; Jian W.; Shi Q.; *Adv. Funct. Mater.* 2023, **33**: 2212259.
- [5] Liu H.; Zhou F.; Shi X.; Sun K.; Kou Y.; Das P.; Li Y.; Zhang X.; Mateti S.; Chen Y.; Wu Z.-S.; Shi Q. *Nano-Micro Letters* 2023, **15**: 29.

绝热量热法研究相变建筑材料热力学性质

罗积鹏^{*}, 傅宛鑫, 寇艳, 戴鹤男, 尹楠, 史全^{**}

中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号, 116023

^{*}Email: luojp@dicp.ac.cn, ^{**}Email: shiquan@dicp.ac.cn

相变建筑材料可在窄温区范围内大量存储或释放热能, 保障建筑物室内在一定时间内始终维持在人体舒适的温度下, 因此其受到建筑节能领域的广泛关注。准确测量研究相变建筑材料的热力学性质, 如相变焓、相变温度及热容等, 是评估与开发新型相变建筑材料的关键^[1]。相变建筑材料具有样品量大(克级以上)、样品内部均一性差的特点, 需要开发大块体材料量热表征手段才能满足其热力学性质准确测量的需求^[2, 3]。为此, 本工作基于绝热量热的原理开发了一台80-400 K适用于大块体相变建筑材料的精密量热仪器(图1), 并发展了相应的热力学函数计算方法。通过标准物质 α -氧化铝、铜及正庚烷的热容测量, 并与NIST标准数据对比, 验证仪器热容与相变焓测量误差均小于1.2%。在此基础上, 利用该仪器测量了水合盐相变材料以及掺有不同比例水合盐的相变建筑材料的热力学性质, 通过数据计算分析表明本量热仪器能够准确测得相变建筑材料的相变焓等热力学性质, 并可用于评估复合材料内相变材料的含量。本工作可为绝热量热的推广应用以及相变建筑材料热力学性质研究提供重要的参考。



图 1 80-400 K大块体绝热量热仪器

关键词: 绝热量热; 相变建筑材料; 热力学性质; 热容; 相变焓

参考文献

- [1] Song M.; Niu F.; Mao N.; Hu Y.; Deng S. *Energy and Buildings*, 2018, **158**: 776-793.
- [2] Shao C.; Wang P.; Mi J.; Jiang P.; Guo Y.; Fang W. *Energy Conversion and Management*, 2025, **341**: 120048.
- [3] Losada-Perez P.; Tripathi C. S. P.; Leys J.; Cordoyiannis G.; Glorieux C.; Thoen J. *International Journal of Thermophysics*, 2011, **32**: 913-24.

新型二茂铁基三元配合物的合成与固体推进剂燃速催化性能研究

缙卓雅^{1,*}, 赵军龙^{2,**}, 马海霞^{1,3,**}

¹ 西安市特种能源材料重点实验室, 西北大学化工学院, 陕西 西安 710127

² 西北大学医学院, 陕西 西安 710069

³ 智剑实验室, 陕西 西安, 710025

*Email:2429973982@qq.com,**Email:zhaojunlong327@163.com, **Email:mahx@nwu.edu.cn

本研究旨在通过构建双金属活性中心协同催化体系, 开发兼具高效催化性能、优异非迁移性和低挥发性的新型二茂铁基金属配合物。创新性地构建了基于二茂铁-过渡金属-胍配体的三元协同催化体系, 重点研究了其对固体推进剂关键组分的热分解的催化机制及其燃烧调控作用。以四氮唑功能化二茂铁为前驱体, 采用分步配位策略: 首先与过渡金属离子($\text{Co}^{2+}/\text{Cu}^{2+}/\text{Ni}^{2+}/\text{Zn}^{2+}$) 构筑二元配合物, 进而引入偏二甲胍或胍作为第三配体, 成功制备了一系列结构新颖的三元金属有机配合物。利用核磁共振波谱、X射线光电子能谱及红外光谱等方法对目标产物进行了结构表征。采用差示扫描量热法(DSC)系统研究了这些化合物对AP和RDX热分解行为的催化效应, 结果表明, 不同配体构建的三元体系对RDX热分解行为展现出差异化的调控效应: 1) 偏二甲胍配位体系显著提高了RDX分解的同步性, 其中钴基三元配合物使主分解峰温度最高提前至213.5°C ($\Delta T=28.3^\circ\text{C}$); 2) 水合胍配位的三元体系对RDX热分解过程表现出双向调节作用, 铜基三元配合物使分解峰温延后至247.5°C, 同时部分体系仍保持低温分解特性。值得注意的是, 所有三元体系的放热量较相应二元配合物最高提升42%, 证实多配体协同作用有效优化了RDX的分解能效。激光点火实验进一步验证了三元配合物的优异性能, 表现为燃烧火焰更明亮集中、火焰更大和燃烧速率更快, 显著增强了推进剂的燃烧。本研究为发展高效、稳定的非迁移型燃速催化剂提供了新的分子设计策略。

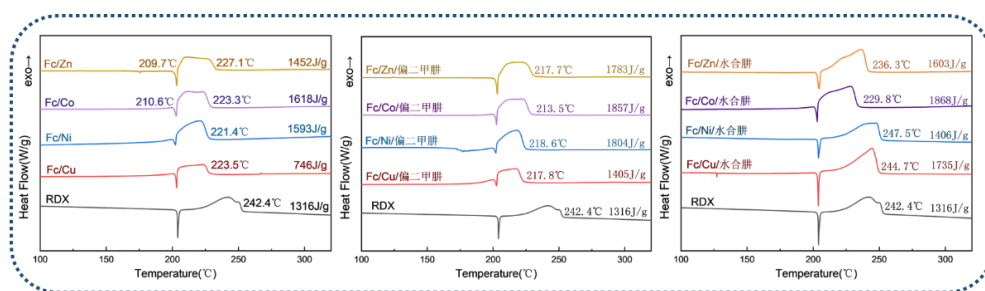


Fig. 1. DSC curves of the title composite.

关键词: 二茂铁; 配合物; 偏二甲胍; 燃速催化剂; 固体推进剂

参考文献

[1] Liu X.; Ma X.; Wang G.; et al. *Fuel*, 2024, **375**: 132440.

[2] Shi W.; Wang X.; Gao F.; et al. *Water Research*, 2024, **260**: 121915.

镁基储氢材料对 CL-20 热分解催化性能的影响

裴庆*, 高红旭, 肖立柏, 张洋, 赵凤起

西安近代化学研究所 含能材料全国重点实验室, 陕西西安, 710065

*Email: peiqing204@sohu.com

储氢材料是一种能在晶体的空隙中大量储存氢原子的材料,它是一种应用潜力很大的储氢材料,具有储氢量大,原料来源丰富,价格低廉,重量轻等特点。本文采用扫描电子显微镜 (SEM) 对镁基储氢材料M1和M2进行了表征,。将镁基储氢材料M1和M2分别与高能炸药 CL-20和HMX用研磨混合法制成混合物,用DSC对单质CL-20和HMX炸药以及镁基储氢材料/高能炸药混合物进行催化特性测试,并对样品的热分解动力学和热力学参数进行了计算和对比。结果表明,加入镁基储氢材料M1和M2后,CL-20和HMX在不同升温速率 (5、10、15、20K/min) 下的放热峰峰温、表观活化能均降低,热力学参数发生明显变化。镁基储氢材料M1和M2对高能炸药CL-20和HMX有明显的热分解催化作用。

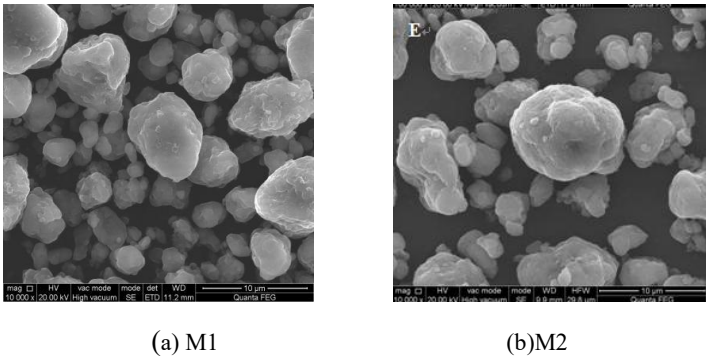


图 1 镁基储氢材料的 SEM 图

表 1 不同升温速率下 CL-20 及镁基储氢材料/CL-20 混合物的放热分解峰的动力学参数

样品	$\beta/(\text{K}\cdot\text{min}^{-1})$	T_p/K	$E/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$		$\lg(A/\text{s}^{-1})$	R			T_{p0}/K	T_b/K
			Kissinger	Ozawa	Kissinger	Kissinger	Ozawa			
CL-20	5	518.87	220.43	217.94	20.11	0.9930	0.9935	512.47	522.78	
	10	525.43								
	15	530.46								
	20	532.27								
CL-20/M1	5	513.20	203.68	201.92	18.64	0.9916	0.9923	504.53	515.37	
	10	519.39								
	15	524.01								
	20	527.97								
CL-20/M2	5	514.11	185.63	184.77	16.7	0.9975	0.9977	499.22	510.91	
	10	522.66								
	15	527.22								
	20	530.14								

关键词：CL-20；镁基储氢材料；热分解；动力学

参考文献

[1] Liao X.; Liu J.; Sun M.; Liu H.; Cheng Z. *Combust. Sci. Technol.*, 2024, **196**: 5128-5143.

构筑纳米钼钨多相界面碳化物电催化剂及其析氢性能

杜建平^{1,2}

¹ 太原理工大学 太原迎泽西大街 79 号, 030024

² 气体能源高效利用山西省重点实验室, 太原迎泽西大街 79 号, 030024

E-mail: dujp518@163.com

纳米碳化钼是一种潜在的非贵金属电催化材料之一^[1]。由于碳化钼的制备需要通过高温碳化, 因此通过设计钼前驱体结构, 可以调控粒度、分散性、结构及形貌, 以提高纳米碳化钼的催化性能^[2-3]。为此, 提出原位自组装策略合成钼钨前驱体, 得到多界面的异质结构钼钨碳化物催化剂, 利用表征技术对产物进行了分析, 探究了化合物形成机理与热解温度的依赖关系, 研究了纳米碳化物在电催化析氢过程中的催化性能, 探究了碳化物异质结构的影响, 通过计算分析了析氢热力学过程中中间体吸附自由能变。研究表明, 通过前驱体设计, 得到具有三相异质界面 Mo_2C - W_2C - WC 催化剂材料, 表现出优异的电催化析氢性能, 在 100 mA cm^{-2} 电流密度时, 表现出优于 20% Pt/C 商用催化剂的性能。DFT 计算结果表明, WC 、 W_2C 和 Mo_2C 三相界面之间存在强电子相互作用, 显著优化了 ΔG_{H^*} 和水解离能垒, 加速了 H_2O 的解离过程。通过研究, 为制备非贵金属高效催化材料提供了依据。

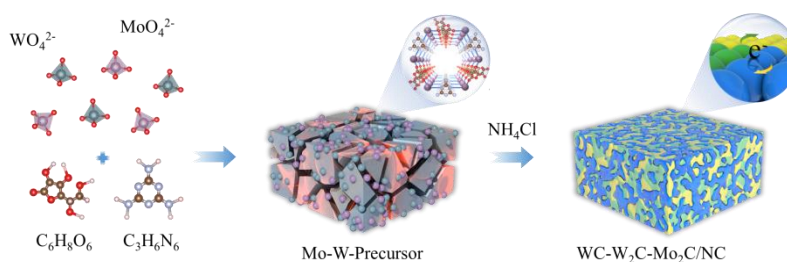


图 1 纳米钼钨碳化物多界面催化剂制备

关键词: 纳米碳化钼; 异质结面; 电子结合调控; 电催化析氢

参考文献

1. Zhao R.; Wang H.; Gao N.; Liu R.; Guo T.; Wu J.; Zhang T.; Li J.; Du J.; Asefa T. *Small Methods*, 2020, **4**: 1900597
2. Du Q.; Zhao R.; Guo T.; Liu L.; Chen X.; Zhang J.; Du J.; Li J.; Mai L.; Asefa T. *Small Methods*, 2021, **5**: 2100334
3. Liu L.; Zhang S.; Zhao R.; Liu G.; Du J. *Ceramics International*, 2024, **50**: 53091

绿色溶剂中功能化离子液体催化醇的转化研究

朱一诺, 王名媛, 苗成霞, 韩峰*

山东农业大学, 山东省泰安市岱宗大街 61#, 271018

*Email: fenghan@sda.edu.cn

溶剂在各种化工过程具有重要的作用, 不仅能够促进各种物质充分混合, 同时能够有效降低体系的粘度、稀释放热反应强度等。有机溶剂滥用会对生态环境造成不可逆的严重后果。因此, 在应对传统有机溶剂易挥发、易燃、有毒和致癌等挑战下, 发展环境友好、可持续、易于循环再利用的绿色溶剂替代传统的易挥发有机溶剂, 不仅可以解决环境污染、危害人类健康问题, 而且还可以优化反应过程^[1]。常见的绿色溶剂有水、碳酸二甲酯、乙二醇、超临界二氧化碳等, 特别地, 碳酸二甲酯 (DMC), 因其具有低毒性、低粘度、高生物降解性、环境相容性和独特的反应活性, 作为有机反应绿色和多功能溶剂备受科研工作者的关注。

离子液体 (ILs) 具有低挥发性、低熔点和离子对极性可调、可设计等优点, 广泛应用于各种领域, 例如溶剂、电解质、催化等^[2]。醇具有绿色、稳定和低毒等特点, 是重要的化工原料, 可以通过取代、偶联、环化等反应构建各种中间体化合物。从环境友好性和原子经济性的角度来看, 利用醇类化合物和各种亲核试剂通过亲核取代反应构建碳-杂键, 只产生水作为唯一副产物, 是一种高效、可持续、原子经济高的途径。目前, 实现醇的直接转化被认为是绿色化学十大重点研究领域之一^[3]。

本课题组^[4]基于在绿色溶剂中开展功能化离子液体催化醇的转化研究, 构建了 C-C、C-N、C-O、C-P 等碳杂原子键。经过机理的探究, 证明了离子液体可以活化醇羟基, 脱水后经过碳正离子历程发生反应。

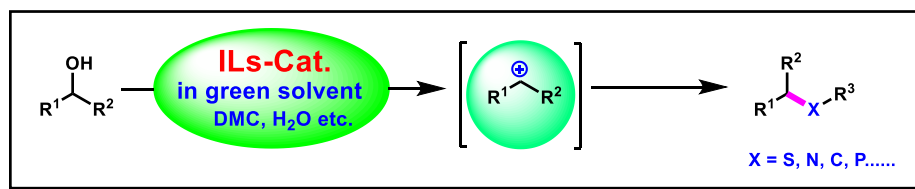


Fig. 1 绿色溶剂中离子液体催化醇的直接转化构建C-X键

关键词: 绿色溶剂; 功能化离子液体; 催化; 醇亲核取代反应

参考文献

- [1] Hessel V.; Tran N. N.; Asrami M. R.; Tran Q. D.; Van Duc Long N.; Escribà-Gelonch M.; Tejad, J. O.; Linke S.; Sundmacher K. *Green Chem.* **2022**, *24*: 410.
- [2] Amarasekara A. S. *Chem. Rev.* **2016**, *116*: 6133.
- [3] Nandakumar A.; Midya S. P.; Landge V. G.; Balaraman E. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*: 11022.
- [4] a) Zhuang H.; Miao C. *Eur. J. Org. Chem.* **2021**, *27*: 3819; b) Liu Q.; Han F.; Zhuang H.; Song Z.; Zhang J.; Zhang T.; Wang N.; Miao C. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2022**, *10*: 6784; c) Lv H.; Han F.; Wang N.; Lu N.; Song Z.; Zhang J.; Miao C. *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, *45*: e202201222; d) Wang N.; Li Z.; Hou Q.; Han F.; Yan Y.; Zhang J.; Miao C. *J. Org. Chem.* **2022**, *87*: 11669; e) Zhuang H.; Hou Q.; Han F.; Lv H.; Miao C. *Green Chem.* **2023**, *25*: 310; f) Zhuang H.; Wan P.; Miao C.; Yang Y.; Liang S.; Han F. *J. Org. Chem.* **2024**, *89*: 2397.

柔性固-固相变膜用于人体止血热损伤

刘汉卿, 张馨予, 寇艳, 史全*

中国科学院大连化学物理研究所热化学实验室, 大连, 106023

*Email: shiquan@dicp.ac.cn

过度出血是战争和外科手术中常见的死亡原因,而有效的院前急救对伤员的生命至关重要,尤其是在无法及时获得医疗救治的情况下。无机止血剂和敷料作为一类很有前途的止血方式,由于其具有促进血液凝固、不含可能引起动物过敏反应的衍生蛋白等优势,得到了广泛的研究和关注。其中,沸石被认为是一种优秀的止血材料,相关的商业产品,如HemCon®和QuikClot®,已被纳入官方指南并开发用于军事和民用。沸石由于其内部多孔结构,可以捕获血液中的水分并聚集凝血因子以促进凝血。此外,阳离子交换反应释放的 Ca^{2+} 加速凝血级联,这是沸石促进凝血的另一个重要机制。然而,大量沸石分子筛在吸收过程中释放大量的热量,阻碍了其作为理想止血材料的应用。

为了改善沸石材料在止血过程中的放热问题,我们通过静电纺丝技术设计了一种新型止血相变绷带(HPB),由5A沸石和PCM组成,用于高效止血和温度控制。此外,该策略依赖于PCM在近似恒定温度下吸收热量的固有特性来实现热防护。该止血绷带所涉及的固-固相变膜克服了传统PCM渗漏、刚性等缺点,通过调节交联密度获得了合适的相变温度。此外,柔性HPB表现出热稳定性和浸润性。在模拟实验中,HPB样品在止血过程中有效地将温度保持在 42.6°C 以下,其控温性能比纯5A高 58.3°C ,比市售沸石止血产品高 3.6°C 。该研究为消除伤口止血中的热损伤提供了一种新的策略,拓宽了PCM在医疗领域的应用前景。

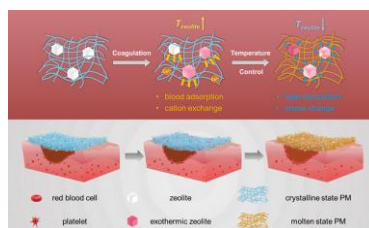


图 1 相变纤维内部结构示意图

关键词: 沸石; 相变纤维; 止血材料; 热能储存; 温度调控

参考文献

- [1] Li B.; Li H.; Chen H.; Liu Y.; Chen J.; Feng Q.; Cao X.; Dong H., *Adv. Funct. Mater.* 2023, **33**: 2302793.
- [2] Liu H.; Sun K.; Shi X.; Yang H.; Dong H.; Kou Y.; Das P.; Wu Z.-S.; Shi Q. *Energy Storage Mater.* 2021, **42**: 845.

新型膨胀石墨基三维互联多孔网络结构用于构建多功能相变复合材料，增强热导率和能量转换性能

宋领君^{*}，孙立贤^{**}，徐芬^{**}

广西电子信息材料构效关系重点实验室，广西新能源材料结构与性能协同创新中心，桂林电子科技大学材料科学与工程学院，桂林，541004

^{*}Email: Lingjuns0821@163.com, ^{**}Email: sunlx@guet.edu.cn, xufen@guet.edu.cn

传统化石能源的不断消耗，能源危机日益加剧，开发绿色、高效的可持续发展能源迫在眉睫。有机相变材料 (OPCMs) 因其化学热稳定性好、潜热高、成本低、无毒、耐腐蚀以及合适的相变温度区等优点，在太阳能热转换、工业余热回收、电子器件散热、建筑节能、生物医疗等领域被广泛研究。然而，有机相变材料的应用受到自身导热系数低、熔融过程易泄露缺陷的制约，引入具有高比表面积和高导热性的多孔载体封装OPCMs是一种解决上述问题的有效策略^[1]。Zhu 等^[2]将制备的3D多孔石墨烯支架封装PCMs，蜂窝状多孔结构能够容纳87.6 wt% PCMs，且复合相变材料导热系数从0.287 W m⁻¹ K⁻¹提高到0.831 W m⁻¹ K⁻¹。

我们采用简单的盐模板法构建了一种新型的三维互连多孔碳基网络载体 (EG/PVDF/rGO)。将 PVDF 融入三维多孔结构中，使其在 EG 层之间起粘结剂的作用，掺杂 rGO 优化了孔隙结构。这些组分之间形成的范德华力和氢键作用于十八烷 (OD)，赋予 OD@EG/PVDF/rGO 复合材料出色的热能存储性能，包括 168.93 J·g⁻¹ 的存储密度和超过 99.9% 的存储容量。当 EG 含量为 6 wt% 时，复合材料的热导率达 6.3840 W·m⁻¹·K⁻¹，与纯 OD 相比提高了 3611.63% (图1)。这种增强效果归因于 EG 的强全光谱吸收以及 rGO 连续三维多孔碳网络所实现的光子和声子的快速传输。OD@6EG/PVDF/rGO 复合材料表现出 96.3% 的光热转换效率和 74.4% 的电热转换效率，实现了有效的能量存储和转换。这些特性支持正常设备电压下自组装光-热-电能量转换系统的持续运行。这种多功能复合材料不仅展现了卓越的热管理性能，还为碳基材料在多模式发电提供了新的解决方案。

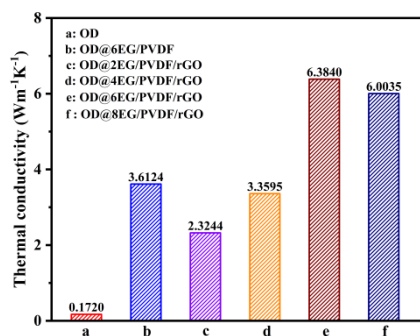


图 1 复合相变储能材料的导热系数图

关键词：相变储能；膨胀石墨；石墨烯；导热增强

参考文献

- [1] Yang X.; Li C.; Ma Y.; Chi H.; Hu Z.; Xie J. *Chem. Eng. J.* 2023, **473**: 145364.
- [2] Zhu X.; Liu J.; Yang K.; Zhang L.; Wang, S.; Liu X. *Compos Part B-Eng.* 2024, **272**: 111233.

大语言模型辅助科学研究：催化剂预测分析案例

牟天成*

中国人民大学，北京，100872

*Email: tcmu@ruc.edu.cn

本研究探讨了人工智能 (AI) 和机器学习 (ML) 在材料科学中的变革性作用，并利用 OpenAI 的 ChatGPT 等大语言模型 (LLMs)。以羟基氧化物作为析氧反应 (OER) 催化剂为重点，展示了 LLMs 如何简化数据提取，显著减少对传统耗时方法的依赖。

通过小样本训练和策略性提示，ChatGPT 实现了约 0.9 的数据提取准确率。随后，利用整理好的数据集，通过 PyCaret 库评估了各种 ML 算法来预测 OER 性能，并成功建立了一个准确率高于 0.9 的高精度 XGBoost 回归模型。

进一步使用 SHAP 和 Python 符号回归 (PySR) 进行分析，确定了关键描述符——电化双电层电容、过渡金属组成、载体材料和 d 电子数——为关键因素，这与已建立的电化学原理一致。此外，SHAP 对铜 (Cu) 和锌 (Zn) 的极端值分析表明了它们非常规的催化作用，可能与 Cu_2O 促进的 NiOOH 形成和 Zn 诱导的电子调控有关，这展示了数据驱动分析在揭示隐藏机制方面的强大能力。

为了增强基于文献的洞察力，本研究采用了微软的 GraphRAG 技术进行深入的化学信息检索。总的来说，本研究引入了一个由 ChatGPT 驱动的创新型端到端机器学习框架，旨在促进人工智能在科学研究中的更广泛应用，并弥合计算智能与实验科学之间的鸿沟。

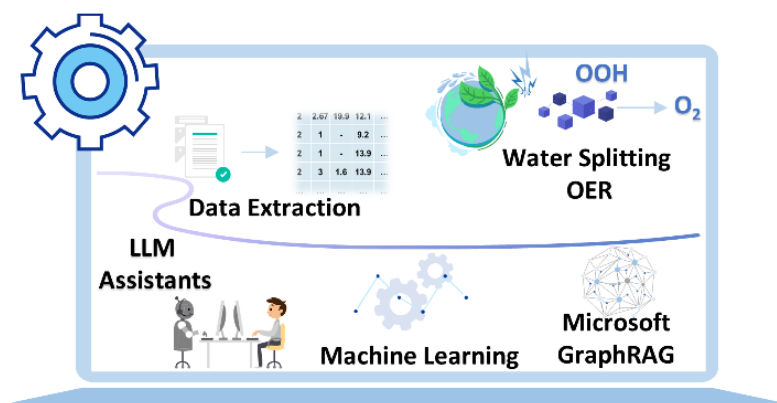


图 1 大语言模型促进电催化析氧反应，推动可持续发展。

关键词：ChatGPT；GraphRAG；机器学习；羟基氧化物

参考文献

[1] Wei C.; Mu T. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2025, **13**: 5368–5380.

基于双模态对比学习实现精准且可解释分析性质预测：从分子热力学到药物 pK_a 性质研究

吕笑云^{1,*}, 宋先雨^{1,**}, 赵双良^{2,**}, 刘洪来³

¹ 重庆三峡学院, 环境与化学工程学院, 重庆, 404130

² 广西大学人工智能学院、广西石油化工资源加工及过程强化技术重点实验室, 南宁, 530004

³ 华东理工大学化学工程联合国家重点实验室, 化学与分子工程学院, 上海, 200237

*Email: 18613596566@163.com, **Email: xianyusong@sanxiau.edu.cn,

**Email: szhao@gxu.edu.cn

准确预测酸碱解离常数 (pK_a) 是一项对药物设计、生化过程和材料开发影响深远的基础性难题。然而, 传统方法难以解决数据稀缺、分子复杂性和可解释性有限问题。在本研究, 我们提出了一种基于SMILES分子性质预测的图对比学习 (GCL) 框架。该框架通过整合分子的2D结构和3D拓扑图信息, 并采用基于注意力的特征分析方法, 实现了双模态对比学习, 从而不仅能够准确预测分子性质, 还具有良好的可解释性。通过热力学方法 ($pK_a = \Delta G_{\text{deprotonation}} / 2.303RT$) 计算得到3万个分子的 pK_a , GCL在SAMPL6~8基准测试上实现最先进的性能 ($R^2 > 0.94$), 并且在训练比率 (10%~100%) 具有卓越的数据效率。该框架具有显著的可迁移性, 可应用到多样的化学空间, 以准确预测氨基酸、胺碱基和可电离脂质的 pK_a , 涵盖15个LogP单位的广泛化学范围。GCL中的注意力机制可实现化学可解释性中的子结构分析, 从而识别关键分子特征, 如药效团、空间约束和电子效应, 进而辅助药物合理设计。本研究不仅针对 pK_a 预测, 还构建了一个基于SMILES的通用性质预测框架, 其学习到的表征在相关分子性质预测任务中表现出优秀的迁移能力。该框架通过融合热力学计算与分子性质预测, 在准确性、数据效率和可解释性方面均表现出色, 有效解决了计算化学和药物研发中的关键挑战。

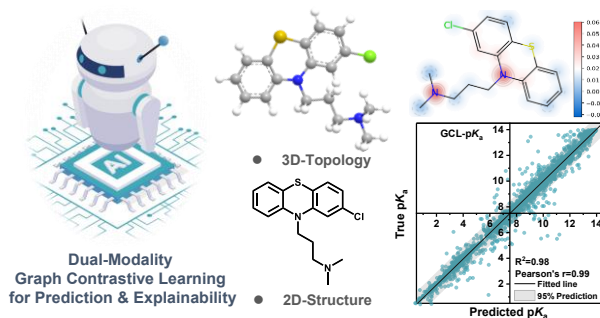


图1 基于双模态对比学习实现精准且可解释分析性质预测

关键词: 分子热力学; 去质子化/质子化; 药物设计; 机器学习; 可解释性

参考文献

- [1] Lv X.; Song X.; Wu X.; Jiang B.; Zhao S.; Liu H. Dual-Modality Graph Contrastive Learning (GCL) for Accurate and Interpretable Molecular Property Prediction: Unveiling pK_a Insights for Drug Discovery (Manuscript in Preparation).
- [2] Wu J.; Kang Y.; Pan P.; Hou T. *Drug Discovery Today* 2022, **27**: 103372.
- [3] Yue Z.; Li C.; Voth G. A.; Swanson J. M. *J. Am. Chem. Soc.* 2019, **141**: 13421-13433.

新型膨胀石墨基三维互联多孔网络结构用于构建多功能相变复合材料，增强热导率和能量转换性能

宋领君^{1,*}，孙立贤^{1,**}，徐芬^{1,**}

广西电子信息材料构效关系重点实验室，广西新能源材料结构与性能协同创新中心，桂林电子科技大学材料科学与工程学院，桂林，541004

*Email: Lingjuns0821@163.com, **Email: sunlx@guet.edu.cn, xufen@guet.edu.cn

传统化石能源的不断消耗，能源危机日益加剧，开发绿色、高效的可持续发展能源迫在眉睫。有机相变材料 (OPCMs) 因其化学热稳定性好、潜热高、成本低、无毒、耐腐蚀以及合适的相变温度区等优点，在太阳能热转换、工业余热回收、电子器件散热、建筑节能、生物医疗等领域被广泛研究。然而，有机相变材料的应用受到自身导热系数低、熔融过程易泄露缺陷的制约，引入具有高比表面积和高导热性的多孔载体封装 OPCMs 是一种解决上述问题的有效策略^[1]。Zhu 等^[2]将制备的 3D 多孔石墨烯支架封装 PCMs，蜂窝状多孔结构能够容纳 87.6 wt% PCMs，且复合相变材料导热系数从 $0.287 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 提高到 $0.831 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 。

我们采用简单的盐模板法构建了一种新型的三维互连多孔碳基网络载体(EG/PVDF/rGO)。将 PVDF 融入三维多孔结构中，使其在 EG 层之间起粘结剂的作用，掺杂 rGO 优化了孔隙结构。这些组分之间形成的范德华力和氢键作用于十八烷 (OD)，赋予 OD@EG/PVDF/rGO 复合材料出色的热能存储性能，包括 $168.93 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1}$ 的存储密度和超过 99.9% 的存储容量。当 EG 含量为 6 wt% 时，复合材料的热导率达 $6.3840 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ，与纯 OD 相比提高了 3611.63% (图 1)。这种增强效果归因于 EG 的强全光谱吸收以及 rGO 连续三维多孔碳网络所实现的光子和声子的快速传输。OD@6EG/PVDF/rGO 复合材料表现出 96.3% 的光热转换效率和 74.4% 的电热转换效率，实现了有效的能量存储和转换。这些特性支持正常设备电压下自组装光-热-电能量转换系统的持续运行。这种多功能复合材料不仅展现了卓越的热管理性能，还为碳基材料在多模式发电提供了新的解决方案。

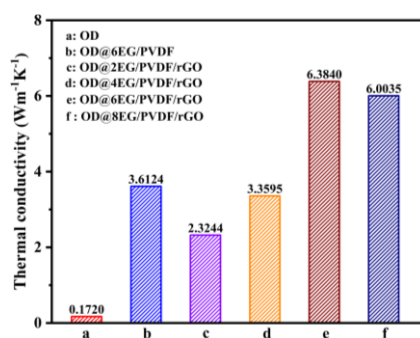


图 1 复合相变储能材料的导热系数图

关键词：相变储能；膨胀石墨；石墨烯；导热增强

参考文献

- [1] Yang, X.; Li, C.; Ma, Y.; Chi, H. Hu, Z.; Xie, J., *Chem. Eng. J.* 2023, **473**: 145364.
- [2] Zhu, X.; Liu, J.; Yang, K.; Zhang, L.; Wang, S.; Liu, X., *Compos Part B-Eng*, 2024, **272**: 111233.

含氟聚醚接枝率对 GAP 双固化的影响

刘科宇^{1,*}, 金波^{1,**}

¹ 西南科技大学, 四川省绵阳市涪城区西南科技大学, 621000

*Email: 2710405951@qq.com, **Email: jinbo0428@163.com

摘要: GAP (聚叠氮缩水甘油醚) 在固体推进剂中被广泛应用, 但其柔顺性较差, 导致玻璃化转变温度偏高^[1], 在粘结剂中引入氟元素可以提高其热稳定性、改善固体推进剂的氧平衡, 进而减少氧化剂的用量、提升含能材料的利用率及固体推进剂的能量^[2], 且聚氨酯软段上的氟可以增强硬段和软段间的相互作用, 降低微相分离程度^[3-4]。本文通过点击化学反应在 GAP_{1k} 侧链上引入含有更多羟基的含氟聚醚柔性链, 合成不同接枝率的 GAP_{1k}-g-F₃, 对其进行红外及差示扫描量热分析; 并采用多官能度端炔基固化剂 (3THD) 和异氰酸酯基固化剂 (3HDI) 对其进行双固化, 制备得到 GAP_{1k}-g-F₃-PTU; 通过单轴拉伸实验、TG (热重分析) 和 SEM (扫描电子显微镜) 等测试方法研究弹性体的力学性能、热稳定性及微观形貌。结果表明: 当含氟聚醚接枝率为 5% 时, 弹性体力学性能有所提升, 抗拉伸强度达 75.35 MPa, 断裂伸长率为 31%, 且形貌较均匀、光滑; 接枝后弹性体的初始分解温度有所提升, 均在 250 °C 以上, 且分解后样品的固体残留量有减少的趋势, 由此可知, GAP_{1k}-g-F₃-PTU 具有良好的热稳定性。

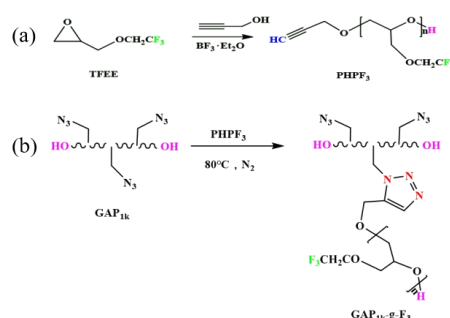


图 1 GAP_{1k}-g-F₃ 的合成路线

Fig.1 The synthetic route of GAP_{1k}-g-F₃

关键词: GAP接枝改性; 双固化工艺; 力学性能; 热稳定性

参考文献:

- [1] 申卫峰. 爆破器材, 2024, 53(06): 1-11.
- [2] Cheng, T. *Designed Monomers and Polymers*, 2019, 22(1): 54-65.
- [3] Yu, Y.; Chen, S.; Li, X.; Zhu, J. *RSC advances*, 2016, 6(24): 20034-20041.
- [4] Wang, X.; Xu, J.; Li, L.; Liu, Y. *Polymer*, 2016, 98: 311-319.

相变材料的热分析动力学研究

于惠梅^{1*}, 王晓红^{2, 3}, 滕鑫¹, 陈健壮¹, 杨晓玲¹, 庄启昕¹

¹ 材料科学与工程学院, 华东理工大学, 上海, 200237

² 西安近代化学研究所; ³ 西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710065

Tel.: 021-64252275; E-mail address: huimeiyu@ecust.edu.cn

摘要: 能源与环境是人类社会生存和可持续发展所面临两个最为严峻的问题。随着全球现代化进程的不断深入和各国之间能源竞争的日渐激烈, 节能和环保已成为时代的主题, 也是实现我国节能减排和经济发展目标并举的必然保障。在建筑领域, 主要通过窗户进行采光和能量交换, 其中来自于太阳的近红外光辐射起到了关键作用。据估计, 通过窗户的损失能量占建筑总能量消耗的一半。VO₂是一种典型的热致相变材料^[1-3], 由于其对于温度的敏感性, 在相变前后会表现出优秀的红外透射率调节的能力, 同时对于可见光的透射率基本保持不变。要最终实现金属-绝缘体相变材料体系在智能红外调控中的应用化, 核心科学问题之一是要弄清楚相变过程的物理机制和规律。研究结果表明, 每掺杂1%的钨原子升温和降温过程中相变温度下降的速度分别为11.8°C和8.7°C, 热滞回线宽度减小3.1°C。热力学上, 钨掺杂降低了VO₂相变的理论临界温度T₀, 使得相变温度向低温移动。动力学上, 钨掺杂可以提供VO₂相变异质形核的有利点位促进相变的发生降低ΔT, 由于降温相变缺乏有利的形核位置, 其对降温过程的作用更明显。对于升温过程而言, 钨掺杂在热力学和动力学上引起的变化偕同促进了VO₂相变的形核, 使得M₁相向R相转变的温度下降的很快。而降温过程中钨掺杂在热力学和动力学上引起的变化对于VO₂相变的形核是一个竞争的机制, 这个竞争的机制对于二氧化钒降温相变温度的影响是相反的, 并且热力学的因素占主导, 因而R相向M₁相转变的温度下降比较缓慢。T相的晶格常数随温度显著变化。借助热分析技术(DSC)获得固态相变动力学曲线, 结合晶核形核长大模型和等转化率相变动力学拟合得到VO₂相变的临界温度T₀和异质形核的几何因子, 最终实现对理论模型的验证。因此, 基于VO₂制备的智能窗可以实现调节进入房间的阳光透射率, 减小室内制冷制热的能耗, 以保持室内适宜的温度环境。

关键词: 二氧化钒; 热致相变; 形核长大; 动力学;

参考文献

- [1] Goodenough J B. The two components of the crystallographic transition in VO₂ [J]. Journal of Solid State Chemistry, 1971, 3(4):490-500.
- [2] Shiga D, Yang B, Hasegawa N, et al. Thickness dependence of electronic structures in VO₂ ultrathin films: Suppression of the cooperative Mott-Peierls transition[J]. Physical Review B, 2020,102(11):115114.
- [3] Maher O, Jiménez M, Delacour C, et al. A CMOS-compatible oscillation-based VO₂ Ising machine solver[J]. Nature Communications, 2024, 15(1):3334.

Single-atom Ru-doped nickel sulfide nanostructures achieve superior water splitting performance via reconstruction and adsorption optimization

Rongfang Li ^{a, 1}, Heng Zhang ^{a, *}, Wenqiang Li ^{a, *}, Xun Feng ^{1a, *}

¹ College of Chemistry and Chemical Engineering, Luoyang Normal University, Luoyang 471934, China

² College of Chemistry and Pharmaceutical Engineering, Nanyang Normal University, Nanyang 473061, China

*Email: fengx@lynu.edu.cn

The strategic design of single-atom catalysts and a detailed understanding of the synergistic interactions between metal sites and substrates are crucial for identifying the true active sites and elucidating catalytic mechanisms at the atomic level. Ruthenium single-atom-doped nickel sulfide (Ru-Ni₃S₂/NF) nanosheet arrays were purposefully engineered and directly synthesized onto nickel foam, enabling dynamic catalyst reconstruction and establishing a robust three-dimensional structure, in this study. The catalyst exhibits exceptional performance, achieving a current density of 10 mA cm⁻² with remarkably low overpotentials of 36 mV for hydrogen evolution reaction (HER) and 207 mV for oxygen evolution reaction (OER). Additionally, a custom-designed anion exchange membrane water electrolyzer (AEMWE) utilizing Ru-Ni₃S₂/NF as both the anode and cathode demonstrates superior water splitting performance, achieving a cell voltage of 1.67 V at a current density of 1 A cm⁻². Theoretical analysis reveals that Ru-Ni₃S₂ undergoes rapid structural reconstruction during the OER process, forming a highly active Ru-Ni₃S₂/NiOOH phase, optimizing the adsorption and dissociation of water molecules, which significantly enhances kinetics. This work provided a promising reconstruction strategy to improve catalytic performance by combining low-cost sulfide materials with single-atom dispersing. It also offers valuable insights for the design of advanced electrocatalysts aimed at achieving high-performance water electrolysis.

参考文献

- [1] M. Ran, H. Xu, Y. Bao, Y. Zhang, J. Zhang, M. Xing, *Angew. Chem. Int. Edit.*, **2023**, 62, e202303728.
- [2] M. Bi, Y. Zhang, X. Jiang, J. Sun, X. Wang, J. Zhu, Y. Fu, *Adv. Funct. Mater.*, **2023**, 34, 2309330.
- [3] W. Li, H. Zhang, M. Hong, L. Zhang, X. Feng, M. Shi, W. Hu, S. Mu, *Chem. Eng. J.*, **2022**, 431, 1385.

**国家自然科学基金 (No. 22371110).

凝胶推进剂蒸发与燃烧特性实验研究

吴鹏俊^{1,*}, 戴恽童¹, 陈鑫阳¹, 方文军¹, 郭永胜^{1,**}

¹浙江大学化学系, 浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号, 310058

*Email: 22337040@zju.edu.cn, **Email: wjjw@zju.edu.cn

飞行器推进系统的能量供给依赖于推进剂的高效燃烧, 其组分和性能直接影响能量释放的速率和转化效率。传统液体推进剂的蒸发和燃烧行为已得到广泛研究, 而凝胶推进剂作为一种兼具液体燃料可控性和固体燃料安全性的新型燃料, 因其复杂的多组分体系 (通常包含基础燃料、凝胶因子、金属添加剂等), 其蒸发与燃烧过程与单组份推进剂存在显著差异, 主要表现为液滴直径的动态波动特征、非稳态燃烧行为以及微爆现象等。本研究选用G1和G2两种凝胶因子, 以碳氢燃料JP-10为基础燃料, 制备了不同凝胶因子含量的推进剂样品。通过单滴燃烧实验系统, 考察了不同温度条件下的蒸发/燃烧特性。实验采用蒸发速率、液滴寿命、膨化与微爆现象发生概率等参数评价蒸发性能, 通过点火延迟时间、液滴寿命和微爆现象发生概率等指标表征燃烧性能。研究成果为凝胶推进剂的配方优化和性能调控提供了重要依据, 对提升推进系统能量效率具有指导意义。

关键词: 碳氢燃料; 凝胶; 蒸发; 燃烧; 微爆

离子液体 HMIMOAC 消除异丙醇-乙酸异丙酯二元体系共沸的相 互作用机理研究

杜秀玉, 周瑜*

青岛大学化学与化工学院, 山东省青岛市宁夏路 308 号, 266071

*Email: zhouyu@qdu.edu.cn

离子液体由于其独特的物理和化学性质, 可以作为分离共沸物的良好夹带剂。了解离子液体-共沸体系的微观结构对揭示离子液体消除共沸的分子内在原因具有重要意义。然而, 目前对于离子液体打破二元共沸物的作用机制的研究还远远不够。

本工作采用谱学方法(傅里叶变换红外光谱和超额光谱)和理论计算(量子化学计算和分子动力学模拟)相结合, 研究了HMIMOAC和异丙醇-乙酸异丙酯共沸体系的微观结构特征和相互作用机理。得出的结论如下: (1) 异丙醇-乙酸异丙酯相互作用复合物的出现是异丙醇-乙酸异丙酯体系产生共沸的原因。(2) HMIMOAC与异丙醇之间的相互作用强于乙酸异丙酯与异丙醇之间的相互作用。(3) HMIMOAC对异丙醇-乙酸异丙酯相互作用复合物的破坏是打破异丙醇-乙酸异丙酯共沸的根本原因。(4)结合超额光谱和量子化学计算对HMIMOAC-异丙醇-乙酸异丙酯三元体系中可能存在的的作用体进行了指认。

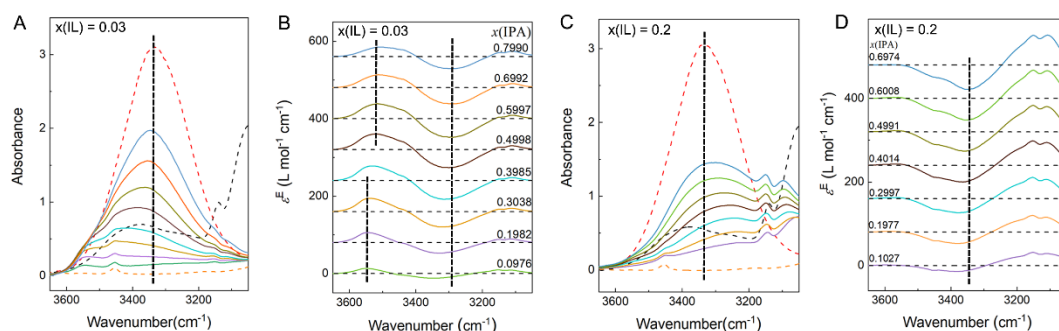


Fig. 1. FTIR spectra (A, C) and excess infrared spectra (B, D) of the IPA-IPAC-HMIMOAC systems in the $\nu(\text{O-H})$ region. The IR of pure IPA, HMIMOAC and IPAC are in the red, black and orange dashed lines, respectively.

关键词: 离子液体; 共沸; 超额红外光谱; 相互作用; 分子动力学模拟

牛奶蛋白复合物分子设计及应用研究

王天荣¹, 蔡拉拉¹, 焦清波¹, 雷群芳², 方文军², 谢湖均^{1,*}

¹浙江工商大学食品与生物工程学院, 浙江杭州, 310028

²浙江大学化学系, 浙江杭州, 310058

*Email: hjxie@zjgsu.edu.cn

牛奶蛋白质能够满足人类对蛋白质和氨基酸的大部分膳食需求, 因为它们均衡的氨基酸组合支持非必需氨基酸的合成。改变pH值可以调控乳蛋白的相态特性, 提高乳制品品质。本研究采用浊度滴定法, 测定了pH值在2.0-12.0之间变化时LF- β -LG复合物的相态, 通过多光谱实验和分子动力学模拟探讨了LF- β -LG复合物在不同相态下的相互作用机制。目前的工作有助于洞悉LF- β -LG复合物的相态变化调控机制, 为乳制品的加工与功能开发提供理论支持。

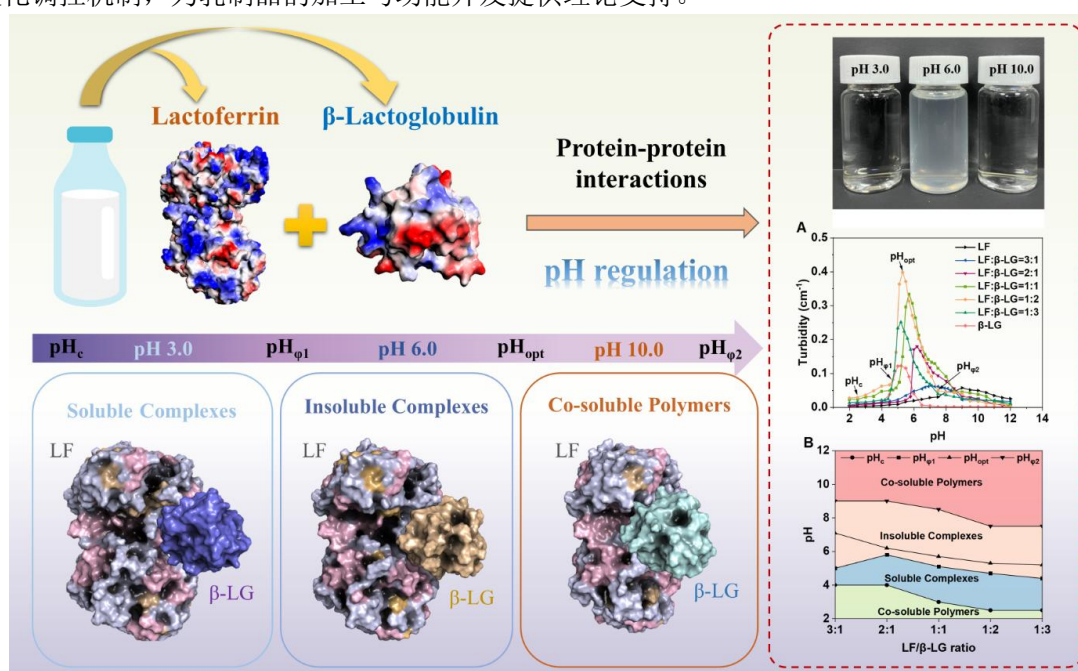


图 1 乳铁蛋白和 β -乳球蛋白复合物的相行为: 从实验和理论角度揭示机制

关键词: 牛奶蛋白; 互作机制; pH调控; 分子动力学模拟

参考文献

- [1] Hujun Xie*. *Food Hydrocolloids*. **2024**, 149, 109654.
- [2] Hujun Xie*. *Food Hydrocolloids*. **2025**, 167, 111398.
- [3] Hujun Xie*. *Food Hydrocolloids*. **2025**, 160, 110760.
- [4] Hujun Xie*. *Food Hydrocolloids*. **2025**, 158, 110696.
- [5] Hujun Xie*. *Food Hydrocolloids*. **2025**, 158, 110605.

双(间苄基铵)硼酸作为单糖识别溶至酸性受体的研究

赵文琦¹, 刘慧丹¹, 姚美焕¹, 白光月^{1,*}, 王玉洁^{2,**}

¹ 河南师范大学化学化工学院, 新乡, 453007

² 河南科技学院化学化工学院, 新乡, 453003

*Email: baiguangyue@htu.cn, **Email: yujiewang2001@163.com

单糖是构成各种功能性碳水化合物的基元分子, 因此寻找对密切相关的结构类似物具有高选择性的单糖识别受体至关重要。^[1-2]然而, 所有单糖分子都含有许多具有不同空间取向的羟基, 这使得准确识别单糖变得更加困难。因此, 构建对单糖具有高选择性的人工识别系统仍然是相关科学领域的一个重要挑战。芳基硼酸能够与1,2-二醇或1,3-二醇分子形成具有环酯结构的可逆共价复合物, 基于硼酸衍生物的结构多样性可提供更专一性的单糖受体。^[3-4]在芳基硼酸家族中, 二芳基硼酸在糖或其他多羟基分子的识别、反应和功能交联方面最引人注目, 但应进一步努力优化二芳基硼酸受体的结构和性质使其更适合单糖结合。

在本研究中, 我们设计了一种带有乙基间隔基的双(间苄基铵)硼酸(BTEAB)。不同于其他具有刚性荧光基团间隔基的二芳基硼酸分子, BTEAB具有一个柔性乙基间隔基并且在水溶液中具有良好的pH响应的荧光性质。偶联的季铵盐和短间隔基使得BTEAB在水溶液中具有优异的溶解性, 并具有低于苯硼酸母体的pK_a值。有趣的是, 研究发现BTEAB可以自我结合并表现出溶至酸性增强。在此基础上, 研究了BTEAB聚集体与三种典型单糖(果糖、葡萄糖和半乳糖)的相互作用机制, 这可以为二芳基硼酸基单糖识别受体的应用提供更加深入的认识。

参考文献

- [1] Williams, G.; Kedge, J.; Fossey, J. *ACS Sensors*, 2021, **6**: 1508.
- [2] Nan, K.; Jiang, Y.; Li, M.; Wang, B. *Biosensors*, 2023, **13**: 618.
- [3] Hansen, J.; Christensen, J.; Petersen, J. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2012, **161**: 45.
- [4] Fang, G.; Wang, H.; Bian, Z.; Sun, J. *RSC Advances*, 2018, **8**: 29400.

关键词: 芳基硼酸; 结合常数; 酸离解常数; 溶至酸性受体; 单糖识别

致谢: 感谢国家自然科学基金(基金编号: 22173027; 21773059)的经费支持。感谢河南师范大学绿色化学介质与反应教育部重点实验室和河南省精细化学品绿色制造协同创新中心的支持。