

## 中文概要

2023 年第 53 卷第 6 期

**diaCEST MRI 在肿瘤成像中的最新进展**余骏, 余子安, 杨丽娇, 袁月<sup>✉</sup>

(中国科学技术大学化学系, 安徽合肥 230026)

<sup>✉</sup>通讯作者: 袁月, E-mail: yueyuan@ustc.edu.cn

**摘要:** 化学交换饱和转移(CEST)磁共振成像(MRI)是一种先进的成像方法,用于探测自由水质子和可交换溶质质子之间的化学交换。这种化学交换降低了水质子的 MR 信号,并以高灵敏度和空间分辨率揭示了某些内源性生物分子或外源造影剂在生物体中的分布和浓度。CEST 信号不仅取决于 CEST 造影剂的浓度和外部磁场,还取决于造影剂的周围环境,如 pH 和温度,从而使 CEST MRI 能够监测体内的 pH、温度、代谢水平和酶活性。在这篇综述中,我们讨论了 CEST MRI 的原理,并主要总结了抗磁性 CEST (diaCEST)造影剂在肿瘤成像、诊断和疗效评估方面的最新进展。

**关键词:** 化学交换饱和转移; 磁共振成像; diaCEST 造影剂; 肿瘤成像

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(6): 0601

**锂氧电池中过氧化锂生成路径之谜**张卓君, 肖旭, 谈鹏<sup>✉</sup>

(中国科学技术大学热科学和能源工程系, 安徽合肥 230026)

<sup>✉</sup>通讯作者: 谈鹏, E-mail: pengtan@ustc.edu.cn

**摘要:** 固态放电产物过氧化锂(Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)与锂氧电池的性能密切相关, Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 会加剧浓差极化和电荷转移阻力,导致电压突降和较差可逆性。尽管先前的 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 生成理论有助于指导电池设计,但却难以解释 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 的全部行为,特别是那些非常规形态的 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub>。因此, Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 的生成路径仍然是一个谜。本文回顾了近二十年来对 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 生成的认识过程,包括 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 形貌的变化、导致不同形貌的反应路径以及相应的反应界面。本文认为由于溶液路径与表面路径的动态耦合,一些 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 颗粒对电极表面具有强烈的依赖性,并基于实验结果和理论提出了一种可能的机制,以期开发更先进的表征技术来揭示 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 复杂的生成路径,并指引锂氧电池的发展。

**关键词:** 锂氧电池; 过氧化锂形态; 生成路径; 反应界面

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(6): 0602

**丙硫醇辅助合成石墨化碳载 Pt 纳米颗粒以提高燃料电池启停性能**杨倩倩, 宋天威, 李帅, 张乐, 马修远, 童磊<sup>✉</sup>, 梁海伟<sup>✉</sup>

(中国科学技术大学化学系, 合肥微尺度物质科学国家研究中心, 安徽合肥 230026)

<sup>✉</sup>通讯作者: 童磊, E-mail: ltong17@mail.ustc.edu.cn; 梁海伟, E-mail: hwliang@ustc.edu.cn

**摘要:** 石墨化碳作为质子交换膜燃料电池的阴极催化剂载体,虽然在增强催化剂抗腐蚀性方面具有显著优势,但由于其孔隙率低,缺乏缺陷结构,在石墨化碳载体上制备小尺寸 Pt 纳米颗粒依然面临挑战。本文报道了一种使用丙硫醇辅助浸渍法,来实现石墨化碳上 Pt 纳米颗粒的尺寸控制。研究表明,丙硫醇在浸渍过程中与 Pt 配位形成的配位络合物,在随后的热还原过程转化为硫掺杂碳涂层,从而保证了石墨化碳上小尺寸 Pt 纳米颗粒的合成。由于有效的尺寸控制,相比于传统浸渍法,此方法所制备的阴极催化剂具有更高的燃料电池性能。我们使用美国能源部(DOE)推荐的耐久性测试方案对所合成的催化剂进行了加速应力测试。在 1.0–1.5 V 电压区间循环 5000 圈后,所制备催化剂在 1.5 A·cm<sup>-2</sup> 电流密度处的电压损失仅为 10 mV,可以忽略不计,达到了 DOE 载体耐久性目标 (30 mV)。

**关键词:** 质子交换膜燃料电池; 催化剂载体耐久性; 石墨化碳; 铂; 启停性能

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(6): 0603

**磁性修饰的钬系上转换纳米晶体应用于指纹信息识别**毕亚飞<sup>1,2,\*</sup>, 章富<sup>1,\*</sup>, 柏彧<sup>1</sup>, 王瑶<sup>1</sup>, 郑楠<sup>1</sup>, 王胜<sup>1</sup>, 张宁<sup>1,3,✉</sup>, 龙冉<sup>1,✉</sup>, 龚兴龙<sup>1</sup>, 熊宇杰<sup>1,2,✉</sup>

(1. 中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 化学与材料科学学院, 环境科学与工程系, 工程与材料科学实验中心, 近代力学系, 中国科学院材料力学行为与设计重点实验室, 安徽合肥 230026; 2. 合肥国家综合科学中心能源研究院, 安徽合肥 230031; 3. 中国科学技术大学苏州高等研究院, 江苏苏州 215123)

\*共同第一作者  
<sup>✉</sup>通讯作者: 张宁, E-mail: zhangning18@ustc.edu.cn; 龙冉, E-mail: longran@ustc.edu.cn; 熊宇杰, E-mail:

yjxiong@ustc.edu.cn

**摘要:** 新型磁性荧光材料的开发对鉴定和刑事侦查具有重要意义。由于传统相机中使用的光敏元件在 500 ~ 700 nm 范围内表现出最高的量子效率, 因此以 507 ~ 533 nm、533 ~ 568 nm 和 637 ~ 683 nm 为主发射峰的镧系上转换纳米粒子 (UCNPs) 适合用于构建磁性荧光材料。本文通过配体连接的方法证实了一种磁性上转换纳米颗粒— $\text{NaGdF}_4\text{:Yb,Er-Fe}_3\text{O}_4$ 。在优化反应参数后, 复合颗粒获得了优异的磁性能和上转换荧光强度, 并且可在各种基底上实现高对比度的潜在指纹识别。得益于上转换发光与磁性的结合, 指纹识别具有了高灵敏度与通用性。

**关键词:** 镧系上转换纳米晶体; 磁性改性; 荧光发光; 指纹识别

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(6): 0604

### 非晶二氧化钛超薄纳米片用于稳定的高倍率锂储存

陈忠达, 詹文奇, 刘智豪, 王航, 吴靓, 孙志欣, 周敏<sup>✉</sup>

(中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心, 安徽合肥 230026)

<sup>✉</sup>通讯作者: 周敏, E-mail: mzchem@ustc.edu.cn

**摘要:** 嵌入型金属氧化物由于降低了低电压下锂沉积风险, 作为负极材料在可充电锂离子电池中广泛使用。然而, 这类电极材料较低的能量密度、功率密度及循环稳定性差限制了其快充的能力。我们设计合成了一种具备良好电化学循环稳定性的非晶二氧化钛纳米片, 在  $500 \text{ mA} \cdot \text{g}^{-1}$  的电流密度下循环 200 圈后具有  $231 \text{ mA} \cdot \text{h} \cdot \text{g}^{-1}$  的比容量, 在  $6 \text{ A} \cdot \text{g}^{-1}$  的高电流密度下经过 1000 圈循环后保持了  $156.7 \text{ mA} \cdot \text{h} \cdot \text{g}^{-1}$  的比容量。非晶二氧化钛纳米片高倍率性能的提升归因于开放的高度各向同性的结构特性, 降低了离子迁移能垒, 确保了离子可用性, 降低了嵌入后材料的体积变化。本研究表明非晶化是一种有望开发具有高倍率性能的传统金属氧化物电极材料的策略。

**关键词:** 非晶化; 二氧化钛; 超薄纳米片; 锂离子电池; 硬模板法

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(6): 0605

### 镍催化支链 1,3-二烯的氢烷基化反应机理探究

刘明强<sup>1</sup>, 刘德光<sup>1</sup>, 许哲远<sup>1</sup>, 于海珠<sup>2</sup><sup>✉</sup>, 傅尧<sup>1</sup><sup>✉</sup>

(1. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心, 中国科学院城市污染物转化重点实验室, 安徽省生物质洁净能源重点实验室, 能源材料化学协同创新中心 (iChEM), 安徽合肥 230026; 2. 安徽大学化学系, 先进材料原子工程研究中心, 安徽省无机/有机杂化功能材料化学重点实验室, 安徽合肥 230601)

<sup>✉</sup>通讯作者: 于海珠, E-mail: yuhaizhu@ahu.edu.cn; 傅尧, E-mail: fuyao@ustc.edu.cn

**摘要:** 随着算法和理论化学的发展, 量子化学计算已被用于解释和预测各种化学实验。镍催化共轭烯烃的氢烷基化反应是一类重要的有机化学反应, 其机理一直是有机化学家关注的焦点。本文利用密度泛函理论 (DFT) 对 Mazet 课题组开发的一个氢烷基化反应进行了详细的研究, 得到了该反应可能的机理模型。在此背景下, 对反应的极具吸引力的区域选择性进行了探讨和合理解释。

**关键词:** DFT; 氢烷基化反应; 1,3-二烯; 镍催化; 机理

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(6): 0606

### 聚合小分子染料为根除癌细胞提供具有稳定光敏性的纳米颗粒

陈旭, 高峰<sup>✉</sup>, 阳丽华<sup>✉</sup>

(中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心, 中国科学院软物质化学重点实验室, 化学与材料科学学院, 安徽合肥 230026)

<sup>✉</sup>通讯作者: 高峰, E-mail: gf199203@mail.ustc.edu.cn; 阳丽华, E-mail: lhyang@ustc.edu.cn

**摘要:** 为了使基于小分子光敏剂的纳米粒子是光稳定的, 我们通过乳液聚合来制备负载光敏剂的纳米粒子。所得纳米粒子在近红外区显示出对激发波长的持续吸收, 在用近红外激光重复照射时产生稳定的光热和光动力效应, 并且在使用激光照射预处理后也能有效地根除癌细胞。

**关键词:** 光敏剂; 近红外; 光热; 光动力; 癌细胞

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(6): 0607