附件

# 2024年度重庆市科学技术奖公示表

（自然科学奖）

1. **项目名称**

超常配位键理论与电子计量谱学

1. **提名等级**

重庆市自然科学奖三等奖

**三、提名者**

重庆市涪陵区人民政府

**四、主要完成单位**

长江师范学院、东莞理工学院

**五、主要完成人**

薄茂林、周勇、孙长庆、姚闯、黄忠凯

**六、项目简介**

在材料科学领域，低配位体系（如表面、缺陷及纳米结构）展现出一系列独特特性。例如，纳米材料具有独特的光学和电学性质，且表面原子的化学反应活性远高于体相原子。此外，冰-水溶液也表现出诸多反常行为，例如水在 4℃ 时密度达到最大值，冰的密度低于液态水等。这些现象难以通过常规物理学理论合理解释。面对低配位体系的奇异特性及冰-水溶液的反常行为，我们提出的超常配位键理论突破传统研究范式，从物质哈密尔顿量的多场微扰视角切入，提供了新的研究思路。

电子计量谱学是一项复杂的系统工程。 一方面，它涉及数据采集、物理建模、理论解析和数值处理等多个环节，任何一处偏差都可能影响解谱结果的准确性。另一方面，该领域要求研究者融会贯通物理、化学、数学及生命科学等多学科知识。

通过创新性地融合超常配位键原理与电子计量谱学技术，我们开辟了一条全新的研究路径。借助这一前沿方法，我们能够精准获取一系列关键的基本因子信息，包括键长、键能、单原子能级、成键电子局域钉扎、非键电子极化、原子结合能、结合能密度以及德拜温度等。这些参数对于确定物质的物理性质至关重要。在此基础上，我们还能够揭示物质的行为规律，实现对物质性能及相关反应过程的有效调控，为材料科学的发展提供坚实的理论与技术支持。本项目的主要研究成果包括如下两部分：

（1）固体表面化学吸附及键弛豫动力学。本研究专注于固体表面化学吸附的成键、断键及键弛豫动力学行为，并建立化学键、能带和势垒之间的内在联系。通过将键弛豫理论与多种表面表征技术相结合，我们系统地论证了：氧、氮、碳等基本元素的原子在与固体表面原子反应时，会发生传统认为不可能的轨道杂化，形成类似水、氨和烷烃的四面体构型，从而调控固体表面的晶体结构、形貌、势垒、能带结构及物理化学性能；通过价带态密度（成键电子对、非键电子孤对、反键偶极子及电子空穴）和单原子价态关联演变动力学方法，可统一描述氧在铜、银、钴、镍、钒、钯、铂、铑、钌、金刚石表面，以及氮、碳在镍表面的化学成键动力学。

（2）原子配位降低对键弛豫的影响。本研究致力于探讨原子配位降低所引发的普遍键弛豫现象，并阐明键序、键长及键能之间的内在关联，以揭示纳米材料与宏观块体材料的本质区别。系统研究表明：低配位会导致化学键自发收缩和强化；键收缩使成键电子局域化增强，势阱加深，并引发成键电子与芯电子能级的整体下移和量子化；这些高密度局域成键电子会极化处于高能态的非键电子（如悬键），从而形成端态、边界态及狄拉克-费米极化子，进而影响高温超导及拓扑绝缘体的载流子行为。

超常配位键理论的提出，以及键弛豫理论与电子计量谱学数值计算方法的持续优化（特别是配位分辨和多场计量谱学等实验技术的逐步完善），为探索物质的微观世界提供了强有力的工具。依托这些前沿理论与先进技术，我们深入研究了石墨烯、纳米硅、氧化锌、水与冰、欠配位及混配位体系中的一系列反常行为，并获得了系统性认知。

值得一提的是，超常配位键理论曾于 2012 年荣获第 25 届夸瑞兹密科学一等奖。与键弛豫理论及电子计量谱学相关的研究已在 Chemical Reviews、Coordination Chemistry Reviews 等顶级期刊发表论文 400 余篇，出版专著 2 部，受邀报告 30 余次，论文总引用量超过 10,000 次。

**七、主要知识产权和标准规范等目录**

**（一）项目**

1. 二维石墨烯纳米带非常规化学键的电子计量能谱学研究，国家自然科学基金项目(11747005)

2. 硝基炸药分子间与分子内耦合作用机制及其声子谱学特征，国家自然科学基金项目(21875024)

3. 分子尺度探究有机发光二极管中蓝色磷光材料的结构稳定性，国家自然科学基金项目(11804033)

4. 基于波函数分析方法探究Ir(III)配合物（FIrpic）在分子尺度下的结构稳定性，国家自然科学基金项目(11747043)

5. 耗散可调多量子比特的量子电动力学系统的非平衡态动力学，国家自然科学基金项目(11947021)

6. 基于QM/MM理论分子尺度探究柔性电致发光器件中主体材料的稳定性及寿命，重庆市自然科学基金项目（cstc2017jcyjAX0274）

7. 电路QED量子模拟器中受外场调控的Holstein模型的极化子动力学的研究，重庆市自然科学基金项目（cstc2020jcyj-msxmX0003）

**（二）论文**

1. Liu, X.; Zhang, X.; Bo, M.; Li, L.; Tian, H.; Nie, Y.; Sun, Y.; Xu, S.; Wang, Y.; Zheng, W., Sun, C. Q. Coordination-resolved electron spectrometrics. Chemical reviews 2015, 115 (14), 6746-6810.

2. Bo, M.; Lei, L.; Yao, C.; Huang, Z.; Peng, C.; Sun, C. Q., Electronic and magnetic behaviour of 2D metal structures of Y on Li (1 1 0) surface. Applied Surface Science 2019, 471, 1005-1010.

3. Zhou, Y.; Zhong, Y.; Gong, Y.; Zhang, X.; Ma, Z.; Huang, Y.; Sun, C. Q., Unprecedented thermal stability of water supersolid skin. Journal of Molecular Liquids 2016, 220, 865-869.

4. Bo, M.; Li, L.; Guo, Y.; Yao, C.; Peng, C.; Sun, C. Q., Atomic configuration of hydrogenated and clean tantalum (111) surfaces: Bond relaxation, energy entrapment and electron polarization. Applied Surface Science 2018, 427, 1182-1188.

5. Zhao, X., Bo, M., Huang, Z., Zhou, J., Peng, C., Li, L. . Heterojunction bond relaxation and electronic reconfiguration of WS2-and MoS2-based 2D materials using BOLS and DFT. Applied Surface Science 2018, 462, 508-516.

6. Zhou, Y.; Huang, Y.; Ma, Z.; Gong, Y.; Zhang, X.; Sun, Y.; Sun, C. Q., Water molecular structure-order in the NaX hydration shells (X= F, Cl, Br, I). Journal of Molecular Liquids 2016, 221, 788-797.

7. Bo, M.; Li, H.; Deng, A.; Li, L.; Yao, C.; Huang, Z.; Peng, C., Bond states, moiré patterns, and bandgap modulation of two-dimensional BN/SiC van der Waals heterostructures. Materials Advances 2020, 1 (5), 1186-1192

8. Bo, M.; Li, H.; Huang, Z.; Li, L.; Yao, C., Bond relaxation and electronic properties of two-dimensional Sb/MoSe2 and Sb/MoTe2 van der Waals heterostructures. AIP Advances 2020, 10 (1).

9. Zhou, Y.; Zhong, Y.; Liu, X.; Huang, Y.; Zhang, X.; Sun, C. Q., NaX solvation bonding dynamics: hydrogen bond and surface stress transition (X= HSO4, NO3, ClO4, SCN). Journal of Molecular Liquids 2017, 248, 432-438.

10. Feng, Y.; Zhou, F.; Bo, M.; Huang, Y.; Deng, Q.; Peng, C., Enabling high dielectric response in PVDF/V2C MXene–TiO2 composites based on nontypical V–F–Ti bonding and fermi-level overlapping mechanisms. The Journal of Physical Chemistry C 2020, 124 (50), 27780-27789.

11. Deng, Q.; Chen, B.; Bo, M.; Feng, Y.; Huang, Y.; Zhou, J., Interfacial fluorine migration-induced low leakage conduction in PVA based high-k composites with V2C MXene-SWCNT switchboard-like ceramic via ab initio MD simulations. Journal of Materials Chemistry C 2021, 9 (3), 1051-1061.

12. Zhou, Y.; Wu, D.; Gong, Y.; Ma, Z.; Huang, Y.; Zhang, X.; Sun, C. Q., Base-hydration-resolved hydrogen-bond networking dynamics: Quantum point compression. Journal of Molecular Liquids 2016, 223, 1277-1283.

13. Zhou, Y., Gong, Y., Huang, Y., Ma, Z., Zhang, X., Sun, C. Q., Fraction and stiffness transition from the HO vibrational mode of ordinary water to the HI, NaI, and NaOH hydration states. Journal of Molecular Liquids 2017, 244, 415-421.

14. Zhou, Y., Li, L., Huang, Y., Ou, J., Li, W., Sun, C. Q., Perturbative vibration of the coupled hydrogen-bond (O: H–O) in water. Advances in Colloid and Interface Science 2022, 310, 102809.

15. Liu, Y., Bo, M., Yang, X., Zhang, P., Sun, C. Q., Huang, Y., Size modulation electronic and optical properties of phosphorene nanoribbons: DFT–BOLS approximation. Physical Chemistry Chemical Physics 2017, 19(7), 5304-5309.

16. Huang, Y., Zhang, X., Ma, Z., Zhou, Y., Zheng, W., Zhou, J., Sun, C. Q., Hydrogen-bond relaxation dynamics: resolving mysteries of water ice. Coordination Chemistry Reviews 2015, 285, 109-165.

17. Zhang, X., Sun, P., Yan, T., Huang, Y., Ma, Z., Zou, B. Zheng, W. Zhou, J. Gong, Y., Sun, C. Q., Water's phase diagram: from the notion of thermodynamics to hydrogen-bond cooperativity. Progress in Solid State Chemistry 2015, 43(3), 71-81.

1. Liu, B., Liu, X., Liu, J., Feng, C., Li, Z., Li, C., Gong, Y., Pan, L., Xu, S., Sun, C. Q., Efficient charge separation between UiO-66 and ZnIn2S4 flowerlike 3D microspheres for photoelectronchemical properties. Applied Catalysis B: Environmental 2018, 226, 234-241.

**（三）专著**

1. 孙长庆，黄勇力，王艳著. 化学键的驰豫[M]. 北京:高等教育出版社, 2017

2. 孙长庆，黄勇力，张希著. 氢键规则六十条[M]. 北京:高等教育出版社, 2019