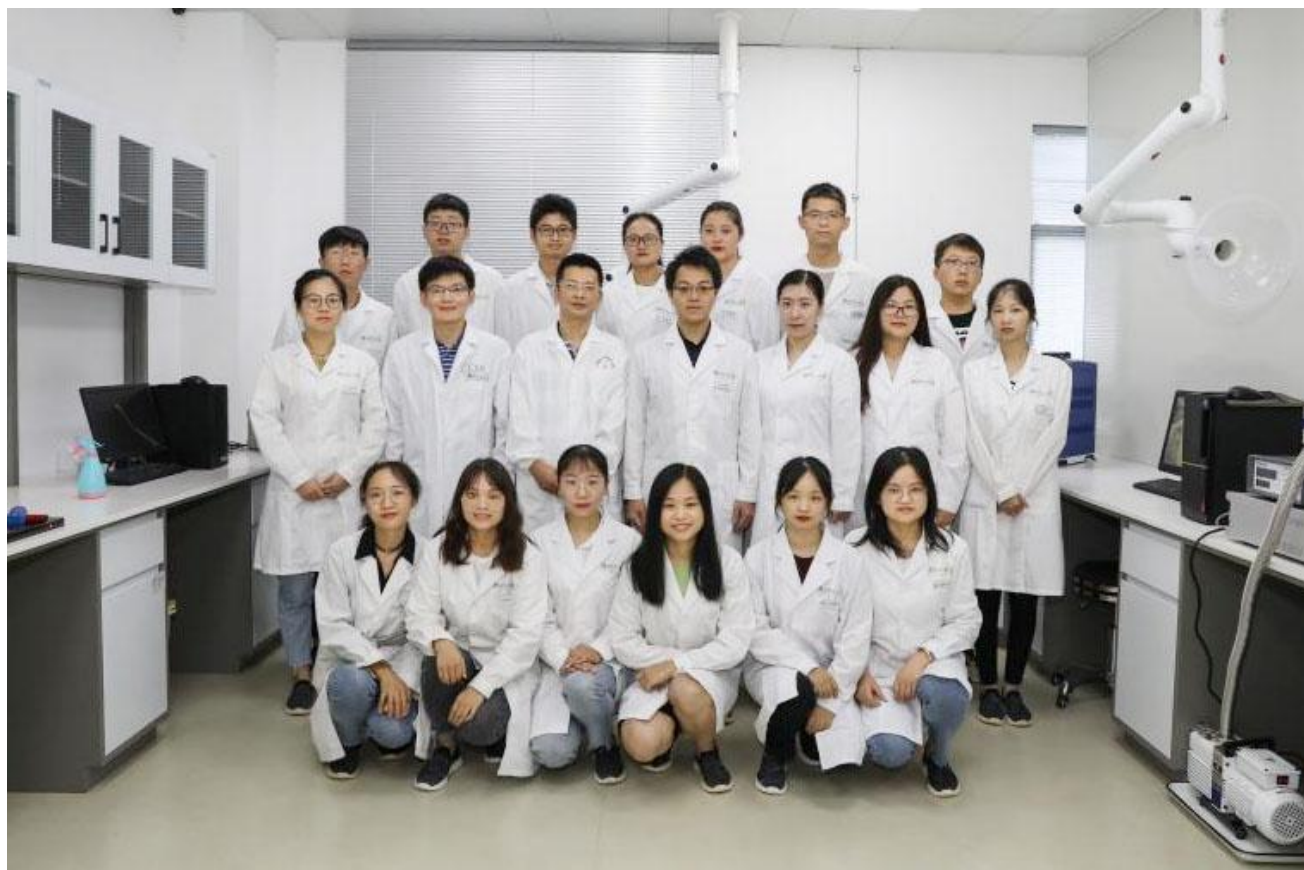
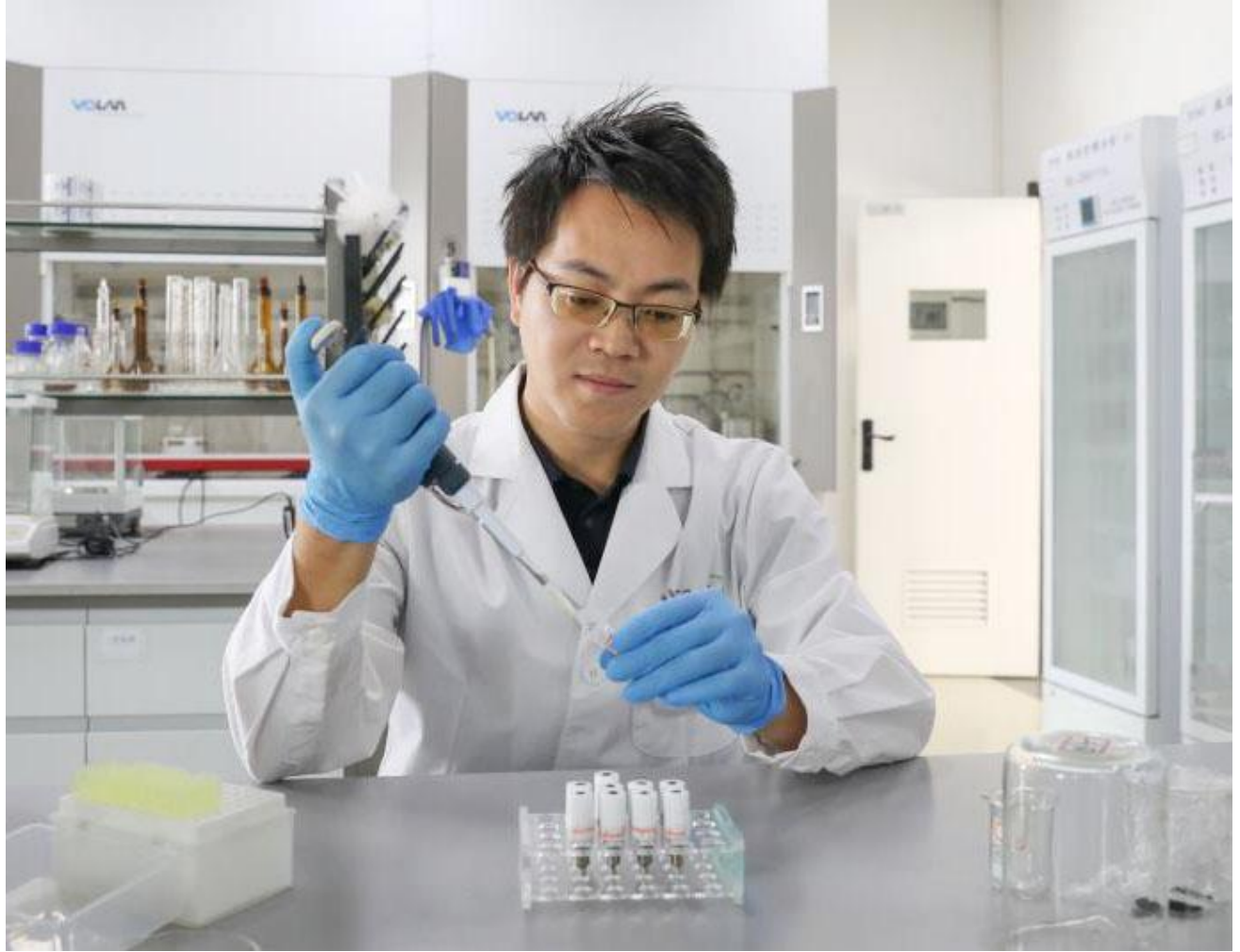
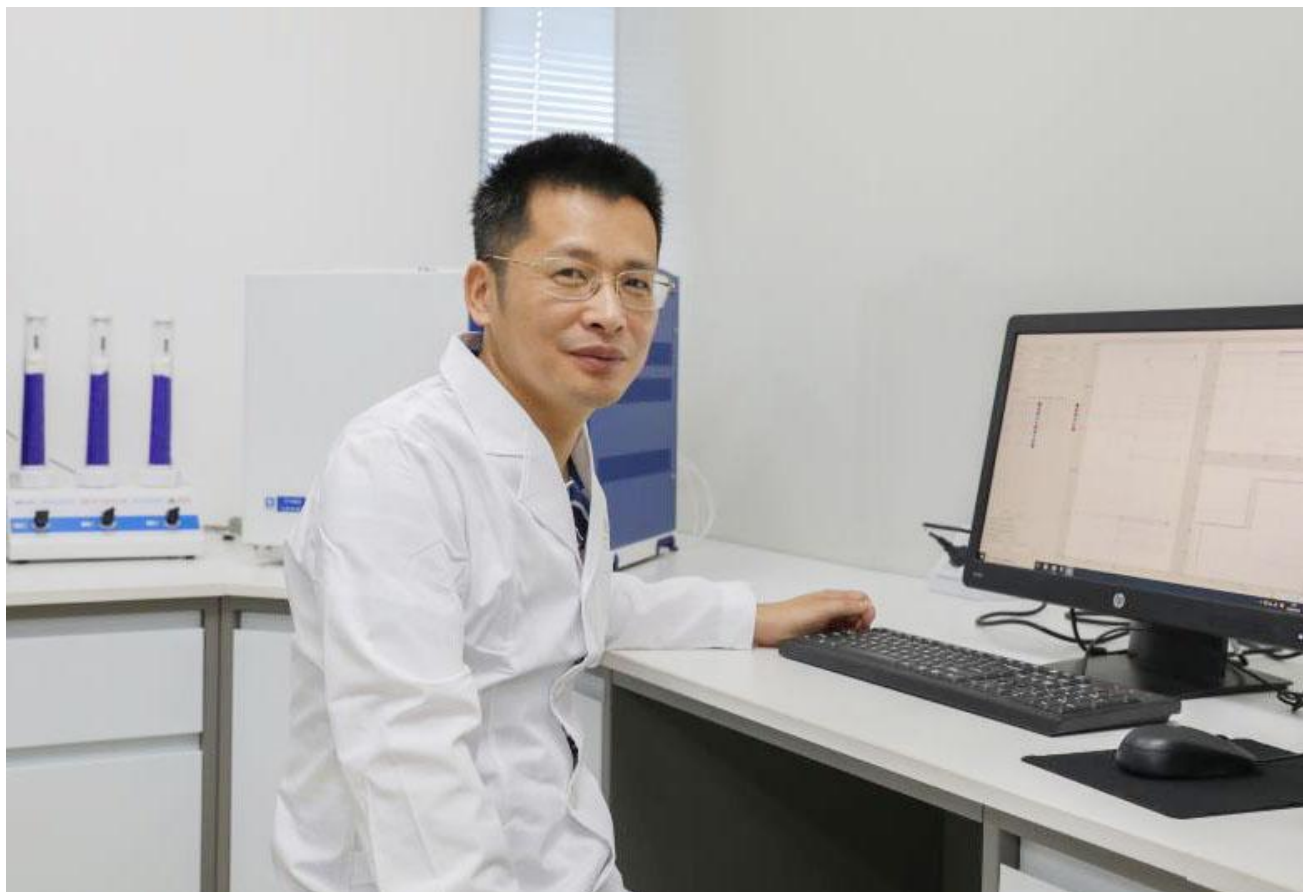


我校首次以第一完成单位在 Nature Communications 上发表论文

近日，化学化工学院何纯挺教授、杜恣毅教授团队最新研究成果以“江西师范大学”为第一单位发表于国际顶级期刊 Nature Communications 上，这是我校首次以第一完成单位在 Nature Communications 上发表论文。



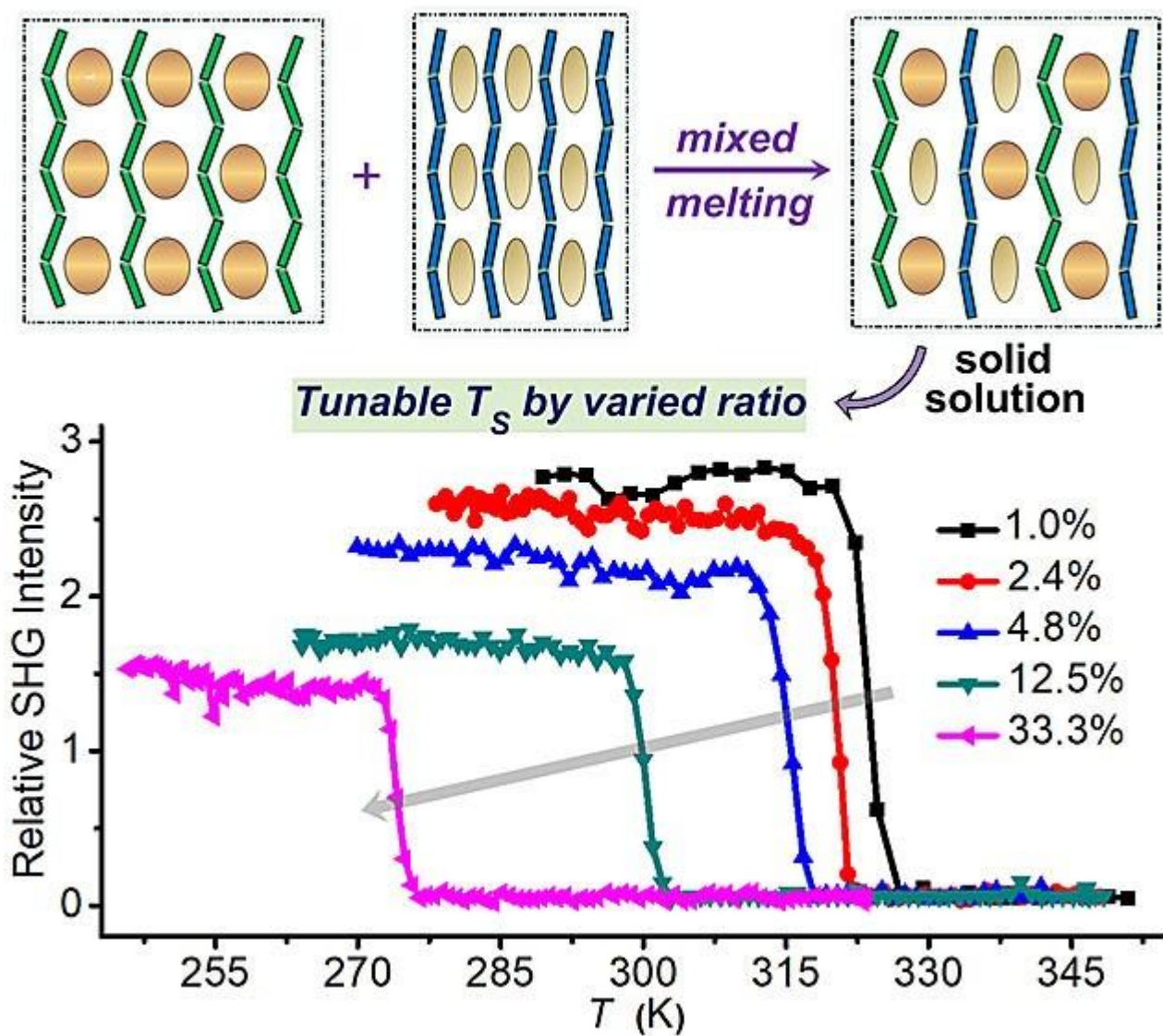




该研究针对“开/关”转换温度（尤其是室温附近）的精准调控问题提出了新的解决方案：利用组分置换固溶化策略，构筑系列分子基固溶体，从而在室温附近的宽幅温区内实现了倍频效应“开/关”温度的可调控性。

团队利用温度的变化来实现非线性光学信号，即倍频效应“开/关”状态的可逆转换，在光电子和智能材料领域具有重要的应用前景。目前面临的一个重要挑战难题是对“开/关”转换温度（尤其是室温附近）的精准调控。该团队研究人员通过调控有机铵阳离子的结构，构筑出两种结构相似的可熔化配位聚合物 $(i\text{-PrNHMe}_2)[\text{Cd}(\text{SCN})_3]$ (**1**) 和 $(\text{MeNHEt}_2)[\text{Cd}(\text{SCN})_3]$ (**2**)。其中化合物 **1** 表现出高信噪比的倍频效应“开/关”功能而 **2** 没有倍频效应。基于这二者特点，团队利用协同的双组分置换固溶化方法，将 **1** 和 **2** 进行熔融退火处理得到系列分子基固溶体 $\{1_x-2_{1-x}\}$ 。变温倍频测试表明，仅仅通过改变两种化合物的组成比例，就可以获得“开/关”温度在 273-328 K 范围内可调的分子基固溶体。

<!--[if !vml]--><!--[endif]-->



1 组分置换固溶化策略及其对倍频效应开关转化温度的调控

团队进一步通过变温单晶结构分析和分子动力学模拟详细研究了化合物 1 的倍频效应“开/关”功能的内在机制。另外，利用原位变温的同步辐射 X 射线吸收精细结构 (XAFS) 分析，证实了熔化过程中配位键并没有发生断裂，并且发现熔融状态下的 Cd - S 键相比于固态中的键长发生了明显缩短，并推测该现象与阴离子链 $[\text{Cd}(\text{SCN})_2]_n^-$ 在熔化状态下发生的张力收缩有密切关系。

该论文通讯作者为我校何纯挺教授、杜恣毅教授和中山大学张伟雄教授；张世勇、舒霞和曾莹为论文共同第一作者。该研究工作得到了陈小明院士的大力支持，以及国家自然科学基金、江西省主要学科学术和技术带头人、广东省珠江人才计划和中国科协“青年人才托举工程”等项目的资助。