

批准立项年份	2003
通过验收年份	2007, 2012, 2018

教育部重点实验室年度报告

(2018 年 1 月——2018 年 12 月)

实验室名称：有机光电子与分子工程教育部重点实验室

实验室主任：段炼

实验室联系人/联系电话：010-62779988

E-mail 地址：duanl@tsinghua.edu.cn

依托单位名称：清华大学

依托单位联系人/联系电话：张东东 010-62782917

2019 年 5 月 23 日填报

填写说明

一、年度报告中各项指标只统计当年产生的数据，起止时间为1月1日至12月31日。年度报告的表格行数可据实调整，不设附件，请做好相关成果支撑材料的存档工作。年度报告经依托高校考核通过后，于次年3月31日前在实验室网站公开。

二、“**研究水平与贡献**”栏中，各项统计数据均为本年度由实验室人员在本实验室完成的重大科研成果，以及通过国内外合作研究取得的重要成果。其中：

1.“**论文与专著**”栏中，成果署名须有实验室。专著指正式出版的学术著作，不包括译著、论文集等。未正式发表的论文、专著不得统计。

2.“**奖励**”栏中，取奖项排名最靠前的实验室人员，按照其排名计算系数。系数计算方式为： $1/\text{实验室最靠前人员排名}$ 。例如：在某奖项的获奖人员中，排名最靠前的实验室人员为第一完成人，则系数为1；若排名最靠前的为第二完成人，则系数为 $1/2=0.5$ 。实验室在年度内获某项奖励多次的，系数累加计算。部委（省）级奖指部委（省）级对应国家科学技术奖相应系列奖。一个成果若获两级奖励，填报最高级者。未正式批准的奖励不统计。

3.“**承担任务研究经费**”指本年度内实验室实际到账的研究经费、运行补助费和设备更新费。

4.“**发明专利与成果转化**”栏中，某些行业批准的具有知识产权意义的国家级证书（如：新医药、新农药、新软件证书等）视同发明专利填报。国内外同内容专利不得重复统计。

5.“**标准与规范**”指参与制定国家标准、行业/地方标准的数量。

三、“**研究队伍建设**”栏中：

1.除特别说明统计年度数据外，均统计相关类型人员总数。固定人员指高等学校聘用的聘期2年以上的全职人员；流动人员指访问学者、博士后研究人员等。

2.“**40岁以下**”是指截至当年年底，不超过40周岁。

3.“**科技人才**”和“**国际学术机构任职**”栏，只统计固定人员。

4.“**国际学术机构任职**”指在国际学术组织和学术刊物任职情况。

四、“**开放与运行管理**”栏中：

1.“**承办学术会议**”包括国际学术会议和国内学术会议。其中，国内学术会议是指由主管部门或全国性一级学会批准的学术会议。

2.“**国际合作项目**”包括实验室承担的自然科学基金委、科技部、外专局等部门主管的国际科技合作项目，参与的国际重大科技合作计划/工程（如：ITER、CERN等）项目研究，以及双方单位之间正式签订协议书的国际合作项目。

一、简表

实验室名称		有机光电子与分子工程教育部重点实验室				
研究方向 (据实增删)		研究方向 1	有机光电功能材料与有机发光显示			
		研究方向 2	激发态理论与光电材料性质预测			
		研究方向 3	分子催化与定向转化			
		研究方向 4	超分子组装体的构筑、调控与功能			
实验室主任	姓名	段炼	研究方向	有机光电材料与器件		
	出生日期	1975 年 10 月 19 日	职称	教授	任职时间	2019 年 1 月
实验室副主任 (据实增删)	姓名	王朝晖	研究方向	有机功能材料化学		
	出生日期	1970 年 6 月 22 日	职称	教授	任职时间	2019 年 1 月
	姓名	刘冬生	研究方向	DNA 纳米技术		
	出生日期	1970 年 12 月 17 日	职称	教授	任职时间	2019 年 1 月
	姓名	许华平	研究方向	高分子化学与物理		
	出生日期	1978 年 11 月 5 日	职称	教授	任职时间	2019 年 1 月
学术委员会主任	姓名	程津培	研究方向	物理有机化学		
	出生日期	1948 年 6 月 1 日	职称	教授	任职时间	2013 年 7 月
研究水平 与贡献	论文与专著	发表论文	SCI	138 篇	EI	0 篇
		科技专著	国内出版	0 部	国外出版	0 部
	奖励	国家自然科学奖	一等奖	0 项	二等奖	0 项
		国家技术发明奖	一等奖	0 项	二等奖	0 项
		国家科学技术进步奖	一等奖	0 项	二等奖	0 项
		省、部级科技奖励	一等奖	0 项	二等奖	0 项
	项目到账总经费	4353 万元	纵向经费	4049 万元	横向经费	304 万元
	发明专利与成果转化	发明专利	申请数	16 项	授权数	16 项

		成果转化		转化数	1 项	转化总经费	0 万元		
	标准与规范	国家标准		0 项		行业/地方标准	0 项		
研究队伍 建设	科技人才	实验室固定人员		30 人	实验室流动人员		48 人		
		院士		2 人	千人计划		长期 0 人 短期 0 人		
		长江学者		特聘 8 人 讲座 0 人	国家杰出青年基金		12 人		
		青年长江		1 人	国家优秀青年基金		2 人		
		青年千人计划		1 人	其他国家、省部级人才计划		3 人		
		自然科学基金委创新群体		2 个	科技部重点领域创新团队		0 个		
	国际学术 机构任职 (据实增删)	姓名		任职机构或组织			职务		
		王训		Nano Research			Editorial Board Member（2014-）		
				Advanced Materials			Editorial Board Member（2017-）		
				Materials Horizons			Scientific Editor, Editorial Board Member（2016-）		
				Science China Materials			Associate Editor（2014-）		
		许华平		美国化学会 Biomaterials of Science & Engineering			副主编（2017-）		
		徐柏庆		美国化学会 ACS Catalysis			副主编(2014--)		
		帅志刚		国际量子分子科学院			副院长		
				比利时皇家科学院			外籍院士		
				国际纯粹与应用化学联合会 (IUPAC) 物理化学委员会			协联委员		
				J. Mater. Chem. A			副主编		
		邱新平		Fuel Cells 杂志			编委（2011-）		
		访问学者	国内		2 人	国外		0 人	
		博士后	进站博士后		18 人	出站博士后		16 人	
学科发展	依托学科 (据实增删)	学科 1	有机光电子		学科 2	理论化学	学科 3	物理化学	

与人才培养		学科 4	超分子化学				
	研究生培养	在读博士生		159 人	在读硕士生		14 人
	承担本科课程	643 学时			承担研究生课程		234 学时
	大专院校教材	0 部					
开放与运行管理	承办学术会议	国际	1 次		国内 (含港澳台)	0 次	
	年度新增国际合作项目				1 项		
	实验室面积		3100 M ²	实验室网址	http://www.oome.tsinghua.edu.cn		
	主管部门年度经费投入		(直属高校不填)万元	依托单位年度经费投入		150 万元	

二、研究水平与贡献

1、主要研究成果与贡献

结合研究方向，简要概述本年度实验室取得的重要研究成果与进展，包括论文和专著、标准和规范、发明专利、仪器研发方法创新、政策咨询、基础性工作等。总结实验室对国家战略需求、地方经济社会发展、行业产业科技创新的贡献，以及产生的社会影响和效益。

本年度，我们围绕 4 个既定研究方向开展研究工作，主要进展如下：

一、新型有机光电功能材料与有机发光显示

OLED 在国内目前已有 16 条生产线，国内市场对材料的需求很大。TADF（热活化延迟荧光材料）作为第三代发光材料应用于 OLED 领域以后广受关注。段炼老师组首次提出以 TADF 材料为主体敏化传统染料发光，将上转换和发光功能分开，有利于分子设计。搭配荧光染料做客体的 TADF+F 被称为是第四代发光材料，为避免主体到客体的 Dexter 能量传递和载流子在染料上直接复合导致的不发光，从而减少能量损耗，提出加入惰性基团，减少分子间电子云碰撞，这样减少了 Dexter 能量传递和载流子在染料上复合，最终实现了高效发光，并且抑制了大电流密度下的效率滚降。另外荧光染料的引入还减小了半峰宽，避免了 TADF 发光具有半峰宽太宽的缺点，实现了显示上的高色纯。另外，研究了 TADF+TADF 的体系，TADF 的引入使三线态激子更快地回到基态，避免累积以后影响器件寿命和效率。减小了三线态激子对器件寿命的影响，在高效率的同时实现了长寿命，引起了相关领域专家的跟踪工作。除此以外，对一系列嘧啶类 TADF 分子进行研究发现相同的复合机制下，三线态能级的降低有利于器件寿命的增加。并且 Langevin 复合能够实现主体负责载流子捕获和传输、客体负责发光，有利于器件设计，因此应作为优选的复合方式。基于此，设计了三线态能级较低的 TADF 主体通过 Langevin 复合的器件，与同方向国内外研究相比，在色坐标更蓝的情况下，实现了相当的效率和寿命。另外，在高亮度水平下保持高效率是热激活延迟荧光有机发光二极管的现实应用的迫切挑战。在这里，多功能吡啶并咪唑 - 异构体衍生物被作为染料和 TADF-OLED 的理想主体，以减轻效率滚降。通过改变吡啶并咪唑异构体可以很好地调节这些化合物的光物理和电子性质。在 5000cdm^{-2} 的亮度水平下，仅具有 3.74V 的电压，分别实现了 26.2% 与 69.71lm W^{-1} 的最高外量子效率和功率效率，相关工作发表在 *Advanced Materials*, 2018, 30(7): 1705406。在实现全荧光 TSF-OLED 方面，段炼老师组通过引入大位阻惰性基团，抑制竞争性失活过程：一方面，引入电子惰性终端取代物，以保护活性核心，抑制主体与染料之间的 Dexter 能量传递；另一方面，通过染料上的位阻基团抑制激子在染料上进行复合，提出“能量漏斗”理论。因此，最终器件结果高达 24% 的最大外部量子效率与 71.4lm W^{-1} 的功率效率，即使在 5000cd m^{-2} 的高亮度下也保持在 22.6%/52.3 lm W^{-1} 。结果发表在 *Advanced Materials*, 2018, 30(6): 1705250 上。在材料稳定性方面，本实验室乔娟老师对蓝光材料的稳定性的机制进行了研究，并提出了分子设计策略。蓝光材料因为其具有带隙宽、激发态能量高（大于 2.8 eV）、发光涉及高能态的特点，一直具有稳定差的特点。为打断共轭、提升激发能，引入碳杂原子，关注键能。通过理论计算和实验相结合发现，之前广受关注的膦氧类材料的碳氮键和碳磷键的键能较小，与激发态能量相近，所以发光时容易断裂，结合表征分析，的确发生断裂产生了分子离子峰。另外，对二苯硫分和二苯并硫分进行研究后提出了提高稳定性的策略—

—关环有利于键能的提升，从而提高蓝光材料的稳定性。以上研究为分子设计提供了思路，在理论计算后比较最弱键能和激发态能量的大小，就可以预测蓝光材料的稳定性。除此以外，还研究了邻位效应对 TADF 分子激发态稳定性的影响，将典型的给受体基团放在一起研究邻位取代对键结合能的影响，从而实现对键能的理性调控。

在钙钛矿材料方面，本实验室王立铎老师提出了基于全无机卤素钙钛矿体系的二维新材料和非铅宽带太阳电池，探索 Cs_2PbX_4 ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 体系，合成首个全无机二维卤素钙钛矿 $\text{Cs}_2\text{PbI}_2\text{Cl}_2$ ，制备大尺寸晶体并拓展辐射探测应用方向（参见 *J. Am. Chem. Soc.*, 2018, 140, 11085）；拓展二维锡基钙钛矿，探索 $\text{AxSnCl}_y\text{I}_z$ ($\text{A}=\text{Cs}, \text{Rb}$) 材料体系，提升锡基钙钛矿稳定性（参见 *Chem. Mater.*, 2018, 30, 4847）；基于 $\text{CsPb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{IBr}_2$ 组分制备非铅宽带隙钙钛矿太阳能电池，实现 1.64eV 至 2.04eV 的带隙范围，器件 PCE 最高可达 11.53%，开路电压可达 1.21V（参见 *Adv. Energy Mater.* 2018, 1800525）。关于钙钛矿太阳能电池电荷传输层和界面研究，该组利用干燥空气制备 NiO 层产生有效掺杂效应，降低 NiO 费米能级改善能级匹配关系，得到 19.17% 的器件效率，热稳定性明显改善（参见 *J. Mater. Chem. A*, 2018, 6, 4721）；在低温制备的 SnO_2 溶胶-凝胶中掺杂 Nb^{5+} 提高 SnO_2 电子传输层导电率，有效促进电子注入，器件效率由 18.06% 提升至 19.38%（参见 *Sci China Mater*, 2019, 62 173）；应用 Cs_4SnO_4 调控层有效抑制界面缺陷，消除回滞并调节 SnO_2 /钙钛矿能带位置，提升器件光电转化效率的同时提升其光辐射稳定性（参见 *J. Mater. Chem. A*, 2018, 6, 23797）。此外，本实验室王立铎、王冬老师联合美国西北大学的 Mercuri G. Kanatzidis 课题组在 Cs_2PbX_4 ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 模型体系中开创性地合成出首个具有单层 RP 结构的全无机二维钙钛矿 $\text{Cs}_2\text{PbI}_2\text{Cl}_2$ ，填补了这一材料体系的空白。 $\text{Cs}_2\text{PbI}_2\text{Cl}_2$ 采用 Cl 离子在面内、I 离子在面外的方式构建独特的 $[\text{PbI}_2\text{Cl}_4]$ 八面体单元，DFT 理论计算证明该结构是 Cs_2PbX_4 体系中唯一存在的热力学稳定产物，和实验结果一致。该工作系统地探索了 RP 结构的全无机二维钙钛矿体系，丰富了卤素钙钛矿低维结构，并为拓展钙钛矿材料的应用提供了新的思路。这一成果发表在 *Journal of American Chemistry Society* (2018, 140, 11085–11090) 上。与此同时，本实验室的董桂芳老师通过钙钛矿薄膜的制备工艺及生长机理的分析总结，制备了高性能的有机-无机杂化钙钛矿薄膜并应用于高传输性能的光电耦合器中，耦合器包含了 OLED 和钙钛矿探测单元，通过纳米发电机产生的电流脉冲信号控制 OLED，通过太阳能电池产生的电能驱动钙钛矿光电探测器，实现了在 2000 V 高压下具有压力信号传输能力的一种新型自驱动有机可见光通信系统。系统的电流传输效率 CTR 达到了 30 %，并且，利用两种不同面积的纳米发电机，控制 OLED 产生的脉冲信号并进行编程。最终实现了通过不同的按压方式，对信号 ‘0101’，‘0010’ 等的生成和传输。已申请专利 1 项。（201810026530. I，一种传感器系统）。除此之外，本实验室对有机/无机杂化钙钛矿稳定性问题进行了研究。钙钛矿具有对水、氧、紫外光敏感以及易热分解、相转变、离子迁移的缺点，针对这些问题，本实验室乔娟老师组提出了阳离子- π 相互作用大幅抑制离子迁移的方法，通过加入红荧烯形成阳离子- π 相互作用，甲胺离子的离子迁移被抑制，从而实现了效率大幅提升和稳定性的改善；另外，还提出了形成异相结的方法来增强钙钛矿薄膜稳定性和近红外发光特性，通过控制前驱体比例，得到了 $\alpha-\delta$ 异相结，在空气的水氧作用下都十分稳定，而且实现了高效的近红外发光。

在材料基础研究方面，本实验室王朝晖课题组在传输材料方面有较大突破。其中并苯类传输材料由于其独特的光电性质和大的共轭体系，具有很好的电荷传输特性，在有机发光二极管、太阳能电池、有

机场效应晶体管等方面具有广泛的应用前景。从易于制备的四溴萘酰亚胺原料出发,利用交叉偶联反应,一步法简单高效地制备了并六苯二酰亚胺衍生物。对其构型进行优化发现,虽然两个酰亚胺基团与并六苯骨架之间有一个小的夹角(大约9度左右),但整个并六苯骨架保持着非常好的平面性,有利于分子之间通过骨架间 $\pi-\pi$ 相互作用形成紧密的堆叠。通过对酰亚胺基团引入不同长度的叉链烷基链调控其溶解性,并进而构筑了微纳晶场效应晶体管,发现该类分子在空气中表现出了很好的双极性性质,既能高效地传输电子又能传输空穴,这是对并苯类分子表现出双极性电荷传输行为的首次报道,开辟了该类材料在双极性光电材料领域的新应用,结果发表于 *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 12175–12180, 并选为封面文章。随后其合成方法被 Synfacts 重点评述 (Synfacts, 2018, 14, 1139)。另外该组借鉴萘酰亚胺类分子设计原则,提出三萘嵌苯酰亚胺(TDI)母核的 bay 上引入四个给电子基团如苯基或噻吩基团的设计思路。发现其在固态薄膜中表现出良好的分子堆积形貌,明显提升了双极性传输性能。其中 ph-TDI 的电子和空穴迁移率分别提高到 0.028 和 0.023 $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ 。当采用非卤、低毒性溶剂邻二甲苯为主溶剂时,基于 PBDB-T:ph-TDI 和 PBDB-T:th-TDI 的电池器件分别获得了 5.10%和 4.12%的光电转换效率。表明这种具有窄带隙的分子骨架作为电子受体构筑单元在太阳能电池领域具有较大的应用潜力和发展空间,结果发表于 *J. Mater. Chem. A* 2018, 6, 18808–18812。此外,本实验室董桂芳课题组还探索方酸材料的分子结构与有机光敏材料的吸收波谱之间的关系,实验发现非对称方酸材料的激发态重组能很小,吸收光谱更多地集中在两个能级差对应的能量上,因而材料具有窄的吸收光谱,基于此,设计合成非对称有机光敏方酸材料 **UPSQ**,制备了 ITO/PEDOT:PSS/UPSQ/Al 器件,在 2 V 电压下,暗电流只有 30 nA/cm^2 ,在 500 nm 处探测率超过 2×10^{11} Jones, EQE 达到了 16%,吸收光谱半高宽 90 nm,显示出良好的蓝绿光窄光谱响应特性。已申请专利 1 项(201810924884.8,一种非对称方酸菁材料及其制备方法和应用)。

二、激发态理论与光电材料性质预测

帅志刚课题组发展了基于含时密度矩阵重整化群的实时非绝热量子动力学新方法来计算分子聚集体的无论是在零温下面还是在有限温度下面的吸收、发射光谱。该方法发表于 *J. Chem. Theory Comput.*, 2018, 14, 5027–5039。而且该组针对材料的发光、传输性能等进行了多项基础理论研究,包括:通过对一系列不同波段发光的 Ir(III)的金属配合物的计算,探究了有机金属配合物发光效率的影响因素并发表于 *J. Phys. Chem. C*, 2018, 122, 6340–6347.; 基于第一性原理计算、量子核隧穿模型和动态蒙特卡洛方法,研究了小分子混合晶体中的电荷输运行为,该工作发表于 *J. Photonics Energy*, 2018, 8, 032204.; 基于超交换原理,探究了给受体聚合物体系中的电子结构以及输运性质随着给体链长的变化规律,工作发表于 *J. Mater. Chem. A*, 2018, 6, 11985–11993.; 该组研究了稠环四硫酚合镍配位聚合物的电子结构和热电输运性质随苯环数量的变化,工作发表于 *J. Comput. Chem.*, 2018, 39, 2582–2588.; 该组通过第一性原理分子动力学方法探究了第五主族磷化砷单层的热输运性质,工作发表于 *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20(20), 14024–14030; 针对双面过渡金属化合物探究其在二维相变材料领域的应用前景,工作发表于 *Nanoscale*, 2018, 10, 21629。

除此之外该组开发出了完全自有知识产权的分子材料性能预测程序 MOMAP,自 2014 年在网上发布以来,被包括哈佛、斯坦福、剑桥等知名大学在内的研究人员下载 3000 余次。课题组与上海鸿之微科技有限

公司合作，将该程序实现了商业化。自 2017 年 4 月商业发布以来，已经拥有 57 个正式用户和 400 多个测试版用户。该软件的介绍文章发表于 *Molecular Physics*, 2018, 116, 1078–1090。

本年度实验室在国内外关注密切的材料的发光效率寿命、电荷传输、热电性能等基础领域取得多项前沿性成果；在理论化学方法以及应用程序开发方面我们也做出多项突出贡献，为材料设计提供了十分有利的工具。

三、分子催化与定向转化

本实验室贺德华课题组围绕资源综合利用和能源高效清洁转化的方向，开展天然气、二氧化碳、生物质甘油综合利用的研究。本年度主要进行了二氧化碳重整甲烷制氢、酯交换合成丙三醇碳酸酯、以及从二氧化碳和生物质甘油合成丙三醇碳酸酯催化剂的研究。探究了 Ni-Co 催化剂在二氧化碳重整甲烷高压反应中的抗积碳性能和机制；发明了适用于酯交换合成丙三醇碳酸酯的 Li-La₂O₃ 催化剂、和适用于二氧化碳和生物质甘油制丙三醇碳酸酯的 ZnWO₄-ZnO 催化剂，相关的研究成果发表于 *Applied Catalysis A-General*, 2018, 564, 234-242、*Journal of CO₂ Utilization*, 2018, 26, 370-379、*Biomass & Bioenergy*, 2018, 118, 74-83，申请了中国发明专利（申请号 201810064763.、201811217180.3）。

四、超分子组装体的构筑、调控与功能

本实验室张希老师组在超分子体系的构筑、调控与功能研究方面取得新的进展，主要成果包括：基于葫芦[8]脲的超分子催化体系，建立了超分子催化聚合的新方法；通过主客体作用调控反应中间体的活性与稳定性，构建了高效的两相催化氧化反应体系；利用对微环境敏感的电荷反转两亲分子，实现了对癌细胞的选择性破膜杀伤；将超分子化疗与聚合物疗法相结合，开拓了聚合物超分子化疗的新方向。

此外本实验许华平课题组还对波长控制的动态化学：二硒和二硫键的交换反应进行了深入的研究：二硫键的键能为 240 KJ/mol，根据鲍林方程计算得出硒硫键的键能为 203 KJ/mol，而二硒键的键能为 172 KJ/mol。可以用不同能量的光（对应于不同波长的光）对这几个化学键进行选择的打断。据此，我们率先发展了一种利用二硒键二硫键的不同键能，通过光波长调控两种分子动态交换的方法。在高能量紫外光的照射下，二硒和二硫分子能够发生交换反应生成硒硫键连接的产物。而在能量较低的可见光照射下，键能高的二硫键不能够发生反应，键能低的二硒键和硒硫键交换产物会进行交换反应重新转化为最初的反应物。研究表明反应的转化率和反应速度具有光波长依赖性，通过对不同光照下二硒键、二硫键产生的自由基进行检测，反应的自由基机理也被进一步证实。此外，该交换反应也可在还原剂的催化下进行，且反应速率受到溶液酸碱环境的控制，通过调整酸碱度和特定波长光照的强度，该体系有可能成为利用光作为能量输入的耗散反应体系。这一化学还被引入到聚合物材料中，从而实现了利用光波长调控聚合物弹性体机械性能的目的。参见 *Angew. Chem. Int. Ed.* 2018, 57, 16426.

在高弹性导电高分子材料，本实验室王朝课题组今年有所突破：一般来说，优秀的电学性质和力学自适应性难以兼得，例如橡胶和传统电学高分子。因此本领域的目标和挑战是使高分子同时具有优秀的电学性质和力学自适应性。实现力学自适应性需要分子链能够在应力下滑移，而电学性质需要共轭高分子的 pi-pi 堆积。为解决这一问题，本实验室提出在聚合物体系内引入超分子增加单位面积内的能量耗散，从而实现良好的力学自适应性。根据一系列设计原则（结合常数适中、常温下动态可逆、多向性），

选择了能够通过氢键进行多向打开和断裂的脲基，结合无机电学颗粒，实现了柔性和自修复，可应用于电子皮肤和锂电池。另外，还利用配位键能够可逆地打开和断裂，研究了基于强弱结合配位键的超拉伸自修复弹性体。同时，设计了具有多重离子-偶极相互作用的体系，这一体系具有超拉伸、自修复、水下稳定、良好离子导体等优点，已应用于水下自修复透明触摸屏。

在超分子催化方面，在实际应用中不论是利用模拟酶、还是分子笼或大环主体，都面临着一个重要挑战——产物抑制效应，也就是产物与大环的结合比较强，在大环内部难以脱附，占据了大环的活性位点，从而导致大环或分子笼的加入量很大。本实验室徐江飞课题组设计了一个超分子体系，只需要加入百分之一当量的大环体系，就能够实现催化光化聚环的发生。在葫芦脲的促进作用下发生光化聚团，生成二聚产物以后，因为葫芦脲与产物的结合较弱，所以可以竞争脱附、离开空腔，进行下一个催化反应，实现整个聚合的反应发生。同时葫芦脲具有稳定性、刚性、易于制备、生物相容性较好、有水溶性的优点，对反应进行更加有利。本研究建立了催化量大环主体加速反应的超分子催化体系，并从连续二聚到聚合，建立了超分子催化聚合新方法。

2、承担科研任务

概述实验室本年度科研任务总体情况。

2018 年重点实验室共承担科研项目 110 项，当年到款约 4353 万元；其中：科技部，基金委等项目 66 项，3960 万元；军工项目 5 项，89 万元；海外项目 7 项，41 万元；横向开发项目 31 项，263 万元。

请选择本年度内主要重点任务填写以下信息：

序号	项目名称(中文)	编号	项目负责人	起止时间		经费 (万元)	类别
1	甲烷和二氧化碳催化转化及外场耦合化学键精准重构	2017YFA0700100	王训	2018/5/18	2023/4/30	2810	项目牵头
2	有机发光材料和器件的稳定性及老化机理研究	2016YFB0401003	乔娟	2016/7/1	2020/6/30	745	课题牵头—项目 由外单位牵头
3	外场耦合催化导向的催化剂精准设计合成	2017YFA0700101	王训	2018/5/18	2023/4/30	675	课题牵头—项目 由清华大学牵头
4	微环境响应型自组装生物纳米材料的纳米表面/界面调控及其功效关系研究	2018YFA0208901	许华平	2018/5/1	2023/4/30	643	课题牵头—项目 由外单位牵头

5	新型有机光子学材料的设计合成	2017YFA0204501	李广涛	2017/7/1	2022/6/30	615	课题牵头一项目 由外单位牵头
6	大面积照明器件关键技术研究	2016YFB0400702	张德强	2016/7/6	2020/6/30	308	子课题
7	新型储能单体及模块的性能衰减机理分析与寿命预测	2016YFB0901703	邱新平	2016/7/1	2020/4/30	150	子课题
8	印刷 TFT 的结构设计与界面工程方法	2016YFB0401103	董桂芳	2016/7/1	2020/6/1	90	子课题
9	石墨烯玻璃的制备科学和关键应用	2016YFA0200103	张莹莹	2016/6/1	2018/5/31	85.446	子课题
10	长寿命电池与相关柔性技术	2015CB251104	邱新平	2015/1/1	2016/12/31	256	国家 973 计划
11	高性能蒸镀型小分子发光材料	2015CB655002	段炼	2015/1/1	2019/12/31	533	国家 973 计划
12	分子聚集发光	21788102	帅志刚	2018/1/1	2022/12/31	1250	科学中心
13	功能体系的超分子调控基础	21821001	刘冬生	2019/1/1	2024/12/31	1050	国家自然科学基金委 创新研究群体
14	有机发光材料与器件	51525304	段炼	2016/1/1	2020/12/31	400	国家自然科学基金委 杰出青年(2016年前)
15	含硒高分子自组装	21425416	许华平	2015/1/1	2019/12/31	400	国家自然科学基金委 杰出青年(2016年前)
16	柔性 OFET 驱动电路与 OLED 屏体集成	61890942	段炼	2019/1/1	2023/12/31	550	国家自然科学基金委 重大项目
17	共价与非共价协同的超分子聚合与功能体系	21890731	刘冬生	2019/1/1	2023/12/31	600	国家自然科学基金委 重大项目
18	稀土元素 4f5d 电子结构与催化物性关联的实验与理论化学研究	21590792	李隽	2016/1/1	2020/12/31	397.6	国家自然科学基金委 重大项目
19	甲烷无氧直接转化催化剂的设计及动态机	91645203	李隽	2017/1/1	2020/12/31	320	国家自然科学基金委 重大研究计划-

	理研究						重点
20	晶态诱导的有机室温磷光和激子声子耦合的多体理论	91622121	帅志刚	2017/1/1	2018/12/31	80	国家自然科学基金委 重大研究计划- 培育
21	高效率钙钛矿型太阳能电池的稳定性及其调控若干基础问题的研究	91433205	王立铎	2015/1/1	2018/12/31	150	国家自然科学基金委 重大研究计划- 重点
22	含硒动态共价化学	21734006	许华平	2018/1/1	2022/12/31	300	国家自然科学基金委 重点项目
23	炔保护金纳米团簇的结构与性能研究	21631007	王泉明	2017/1/1	2021/12/31	290	国家自然科学基金委 重点项目
24	光学各向同性液晶材料及其在 2D/3D 兼容显示应用中的关键技术	61535007	梁晓	2016/1/1	2020/12/31	90	国家自然科学基金委 重点项目
25	生物质衍生物“平台分子”增值转化的多相催化研究	21533004	徐柏庆	2016/1/1	2020/12/31	366	国家自然科学基金委 重点项目
26	基于核酸组装的超分子水凝胶结构与性能	21534007	刘冬生	2016/1/1	2020/12/31	356	国家自然科学基金委 重点项目
27	可控超分子聚合	21434004	张希	2015/1/1	2019/12/31	400	国家自然科学基金委 重点项目
28	超细纳米异质结构化学控制合成及性质调控	21431003	王训	2015/1/1	2019/12/31	350	国家自然科学基金委 重点项目
29	重元素化学中的谱学新方法研究	21433005	李隽	2015/1/1	2019/12/31	380	国家自然科学基金委 重点项目
30	二维过渡金属碲化物的控制合成与超导特性研究	21875127	焦丽颖	2019/1/1	2022/12/31	68	国家自然科学基金委 面上项目
31	主客体相互作用调控的聚合诱导自组装	21871162	袁金颖	2019/1/1	2022/12/31	65	国家自然科学基金委 面上项目
32	固液界面超小水滴的制备与表征	21872078	杨忠强	2019/1/1	2022/12/31	66	国家自然科学基金委 面上项目

33	基于 AIE 掺杂的聚离子液体反蛋白石结构构建用于多组分鉴别分析的单光子微球传感体系	21773135	李广涛	2018/1/1	2021/12/31	65	国家自然科学基金委面上项目
34	新型高效深红/近红外有机荧光材料的设计制备及其器件研究	51773109	乔娟	2018/1/1	2021/12/31	63	国家自然科学基金委面上项目
35	生物质基低维碳材料的控制制备及其在柔性器件中的应用研究	51672153	张莹莹	2017/1/1	2020/12/31	62	国家自然科学基金委面上项目
36	面向有机和复合热电材料的计算方法与应用	21673123	王冬	2017/1/1	2020/12/31	65	国家自然科学基金委面上项目
37	二维过渡金属硫族化合物层间异质结构的控制合成与性质研究	21573125	焦丽颖	2016/1/1	2019/12/31	78.8	国家自然科学基金委面上项目
38	利用耦合反应从丙三醇和二氧化碳合成丙三醇碳酸酯	21573120	贺德华	2016/1/1	2019/12/31	80	国家自然科学基金委面上项目
39	电化学刺激响应聚合物对材料表面修饰与表面性能的智能调控	51573086	袁金颖	2016/1/1	2019/12/31	76.8	国家自然科学基金委面上项目
40	后修饰法在团簇功能化中的应用	21473139	王泉明	2015/1/1	2018/12/31	96	国家自然科学基金委面上项目
41	Anderson 型多酸的不对称修饰及可控组装研究	21471087	魏永革	2015/1/1	2018/12/31	90	国家自然科学基金委面上项目
42	2018 万人计划-领军人才	SQ2016RA20130006	许华平	2018/1/1	2020/12/31	80	领军人才
43	2018 万人计划-领军人才	SQ2016RA2TMP0331	王训	2018/1/1	2020/12/31	80	领军人才
44	第二批万人计划科技创新领军人才项目		刘冬生	2016/1/1	2018/12/31	80	领军人才
45	超分子界面聚合	21704056	徐江飞	2018/1/1	2020/12/31	25	青年科学基金

46	国家万人计划 青年拔尖经费		张莹莹	2018/7/1	2021/7/1	170	青年拔尖
47	中墨纳米科技双边会	21881220657	李隽	2018/10/1	2018/12/31	1.5	国际（地区）学术会议项目
48	采用高导电性钛金属配合物提高溶液加工有机太阳能电池的效率	51711530040	乔娟	2017/1/1	2019/12/31	39.78	国际（地区）合作交流项目
49	多层次的分子组装体：结构、动态与功能	21661132006	刘冬生	2017/1/1	2020/12/31	340	国际（地区）合作交流项目
50	第三届中俄创新对话支撑及中俄创新合作平台建设	20193440001	王治强	2019/3/1	2019/12/31	48	其他项目(如学会、协会)-海外
51	锂离子电池安全性：电池热失控机理研究	20143000185	邱新平	2014/6/6	2017/6/6	150	清华大学国际科技合作项目
52	电动汽车先进电源系统及相关能源材料的应用基础研究	20123010014	邱新平	2012/7/1	2015/6/30	200	科技部国际科技合作项目
53	高能量密度锂离子电池富锂锰基正极材料应用基础研究	20123000314	邱新平	2012/11/5	2014/11/5	125	清华大学国际科技合作项目
54	聚合物转变控制技术	20083000387	袁金颖	2008/5/16	2018/5/15	4	清华大学国际科技合作项目
55	基于热活化延迟荧光敏化材料的类太阳光有机发光二极管	20193080014	段炼	2019/1/1	2020/12/31	4	自主科研国际合作专项
56	基于超分子微凝胶的重金属离子传感器（清华-阿尔伯特）	20183080017	张希	2018/7/1	2019/12/31	15	自主科研国际合作专项
57	精准化学的研究动态与对策		张希	2017/5/24	2019/4/30	60	其他部委科技项目(项目部)
58	有源驱动柔性印刷彩色显示材料与器件	U1601651	段炼	2017/1/1	2020/12/13	228	联合资助基金
59	硅碳负极复合材料及电化学界面特性的研究	U1664256	邱新平	2017/1/1	2020/12/31	234	联合资助基金

60	负极材料	20184810091	邱新平	2018/9/14	2019/12/31	20	481
61	2018 年海关用油	20184810054	赵福群	2018/1/1	2019/12/31	29	481
62	冠醚	20174810081	李隽	2017/8/15	2018/8/15	28.2	481
63	长寿命和低成本钠离子电池电解质研究	Z181100004718006	邱新平	2018/4/1	2020/3/31	400	北京市科技计划
64	石墨烯单晶薄膜自动化无损转移技术及装备开发	Z161100002116030	焦丽颖	2016/12/1	2018/12/31	250	北京市科技计划
65	纳米生物机器人编程重构与动态调控技术研究	Z161100002116005	刘冬生	2016/6/1	2018/5/31	200	北京市科技计划
66	超强导电	20184242086	张莹莹	2018/10/1	2020/12/31	50	创新特区项目—清华大学牵头
67	超强导电	20174242076	张莹莹	2017/9/1	2018/8/31	50	创新特区项目—清华大学牵头
68	高性能的顶发光 OLED 材料及器件研究	2016SZ0205	张德强	2016/12/1	2019/11/30	317	苏州-清华创新引领行动专项
69	抗菌超分子材料		张希	2018/1/1	2018/12/31	100	自主科研计划
70	高铁列车车厢噪声识别与声学复合材料研究-Z01 交叉专项	2015Z01006	王治强	2016/1/1	2018/12/31	150	自主科研计划
71	前瞻钙钛矿型光敏及光电耦合器件	2015Z09002	王立铎	2016/1/1	2018/12/31	100	自主科研计划
72	DNA 水凝胶用于体外诱导血管三维生成的研究	2015Z01002	刘冬生	2016/1/1	2018/12/31	110	自主科研计划
73	高效深红/近红外 OLED 发光新材料、新机理以及器件研究	2015Z09003	张德强	2016/1/1	2018/12/31	100	自主科研计划
74	基于低色温 OLED 的无“蓝害”拟自然光源研究	2015Z23007	段炼	2016/1/1	2018/12/31	40	自主科研计划

75	基于稠环芳酰亚胺受体的高效聚合物太阳能电池的制备及机理探究		王朝晖	2019/1/1	2020/12/31	5	重点实验室开放基金（机构办）
76	多酸作为添加剂促进蛋白结晶及提高蛋白晶体X射线衍射分辨率的研究		魏永革	2018/7/21	2020/7/20	5	重点实验室开放基金（机构办）
77	固液界面微米水滴的形成与应用探究	LSL-1613	杨忠强	2017/1/1	2019/12/31	3	重点实验室开放基金（机构办）
78	聚合诱导自组装备功能纳米组装体的研究		袁金颖	2016/3/1	2018/2/28	5	重点实验室开放基金（机构办）

注：请依次以国家重大科技专项、“973”计划（973）、“863”计划（863）、国家自然科学基金（面上、重点和重大、创新研究群体计划、杰出青年基金、重大科研计划）、国家科技（攻关）、国防重大、国际合作、省部重大科技计划、重大横向合作等为序填写，并在类别栏中注明。只统计项目/课题负责人是实验室人员的任务信息。只填写所牵头负责的项目或课题。**若该项目或课题为某项目的子课题或子任务，请在名称后加*号标注。**

三、研究队伍建设

1. 各研究方向及研究队伍

研究方向	学术带头人	主要骨干
1、新型有机光电功能材料与有机发光显示	邱勇	段炼、王立铎、华瑞茂、乔娟、董桂芳
2、激发态理论与光电材料性质预测	帅志刚、李隽	王冬、王溢磊
3、分子催化与定向转化	徐柏庆	邱新平、贺德华、焦丽颖
4、超分子组装体的构筑、调控与功能	张希	刘冬生，许华平，李广涛，王治强，袁金颖，杨忠强

2. 本年度固定人员情况

序号	姓名	类型	性别	学位	职称	年龄	在实验室工作年限
1.	邱 勇	研究	男	博士	教授	54	2013.1-2018.12
2.	张希	研究	男	博士	教授	53	2013.1-2018.12
3.	王 训	研究	男	博士	教授	42	2014.1-2018.12
4.	刘冬生	研究	男	博士	教授	48	2013.1-2018.12
5.	徐柏庆	研究	男	博士	教授	57	2013.1-2018.12

序号	姓名	类型	性别	学位	职称	年龄	在实验室工作年限
6.	李隼	研究	男	博士	教授	56	2013.1-2018.12
7.	帅志刚	研究	男	博士	教授	56	2013.1-2018.12
8.	李广涛	研究	男	博士	教授	53	2013.1-2018.12
9.	王泉明	研究	男	博士	教授	51	2015.6-2018.12
10.	段 炼	研究	男	博士	教授	43	2013.1-2018.12
11.	许华平	研究	男	博士	教授	40	2013.1-2018.12
12.	魏永革	研究	男	博士	教授	51	2013.1-2018.12
13.	王治强	研究	男	博士	教授	54	2013.1-2018.12
14.	华瑞茂	研究	男	博士	教授	54	2013.1-2018.12
15.	贺德华	研究	男	博士	教授	63	2013.1-2018.12
16.	王立铎	研究	男	博士	教授	62	2013.1-2018.12
17.	邱新平	研究	男	博士	教授	52	2013.1-2018.12
18.	袁金颖	研究	女	博士	教授	53	2013.1-2018.12
19.	张德强	研究	男	博士	副教授	46	2013.1-2018.12
20.	唐 洪	研究	男	博士	副教授	54	2013.1-2018.12
21.	李展平	研究	男	博士	副教授	54	2013.1-2018.12
22.	董桂芳	研究	女	博士	副教授	50	2013.1-2018.12
23.	焦丽颖	研究	女	博士	副教授	37	2013.1-2018.12
24.	王冬	研究	女	博士	副教授	44	2013.1-2018.12
25.	乔娟	研究	女	博士	副教授	43	2013.1-2018.12
26.	杨忠强	研究	女	博士	副教授	39	2013.1-2018.12
27.	张莹莹	研究	女	博士	副教授	39	2015.1-2018.12
28.	赵福群	研究	男	硕士	讲师	56	2013.1-2018.12
29.	梁 瑜	技术	男	本科	工程师	48	2013.1-2018.12
30.	徐江飞	研究	男	博士	助研	30	2016.7-2018.12

注：（1）固定人员包括研究人员、技术人员、管理人员三种类型，应为所在高等学校聘用的聘期2年以上的全职人员。（2）“在实验室工作年限”栏中填写实验室工作的聘期。

3. 本年度流动人员情况

序号	姓名	类型	性别	年龄	职称	国别	工作单位	在实验室工作期限
1.	刘 雷	博士后	男	36	博士后	中国	清华大学	2015.9-2018.9
2.	王佳琦	博士后	女	31	博士后	中国	清华大学	2016.4-2018.4
3.	雷振	博士后	男	31	博士后	中国	清华大学	2016.4-2018.7
4.	龙勇	博士后	男	33	博士后	中国	清华大学	2016.7-2018.7
5.	贺非非	博士后	女	31	助编	中国	曼迪匹矣(北京)科技有限公司	2016.7-2018.7
6.	马雪璐	博士后	女	31	讲师	中国	北京矿业大学化学与环境工程学院	2016.7-2018.7
7.	董笑	博士后	男	30	助研	中国	中科院上海高等研究院	2016.7-2018.7
8.	黄根茂	博士后	男	30	博士后	中国	清华大学	2016.7-2018.7
9.	严波	博士后	男	37	副研究员	中国	浙江省化工研究院有限公司	2016.7-2018.7
10.	陈浩	博士后	男	29	中级	中国	清华大学	2016.8-2018.8
11.	常银成	博士后	男	28	中级	中国	清华大学	2016.8-2018.8
12.	朱智超	博士后	女	29	中级	中国	清华大学	2016.9-2018.9
13.	刘静静	博士后	女	32	中级	中国	清华大学	2017.3-2019.3
14.	高世乾	博士后	男	31	中级	中国	清华大学	2017.4-2019.4
15.	刘源	博士后	男	32	中级	中国	清华大学	2017.6-2019.6
16.	鲁王东	博士后	女	32	中级	中国	清华大学	2017.7-2019.7
17.	袁斌	博士后	男	27	中级	中国	清华大学	2017.7-2019.7
18.	李治	博士后	男	27	中级	中国	清华大学	2017.7-2019.7
19.	王义亮	博士后	男	30	中级	中国	清华大学	2017.7-2019.7
20.	赵冰心	博士后	女	28	中级	中国	清华大学	2017.7-2019.7
21.	康岳桐	博士后	男	29	中级	中国	清华大学	2017.7-2019.7
22.	赵丽娟	博士后	女	32	中级	中国	清华大学	2017.9-2019.9
23.	赵重阳	博士后	男	31	中级	中国	清华大学	2017.9-2019.9
24.	蒋亚飞	博士后	男	29	中级	中国	清华大学	2017.9-2019.9

序号	姓名	类型	性别	年龄	职称	国别	工作单位	在实验室工作期限
25.	张磊	博士后	男	31	中级	中国	清华大学	2017.11-2019.11
26.	杨丹	博士后	女	29	中级	中国	清华大学	2018.3-2020.3
27.	冯嘉靖	博士后	女	27	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
28.	胡德平	博士后	男	29	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
29.	梁宁宁	博士后	女	30	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
30.	孙孟娜	博士后	女	31	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
31.	王华	博士后	男	30	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
32.	薛杰	博士后	男	28	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
33.	杨纪春	博士后	男	30	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
34.	袁尚富	博士后	男	29	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
35.	张安东	博士后	男	31	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
36.	张峰	博士后	男	30	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
37.	夏继业	博士后	男	27	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
38.	张跃威	博士后	男	28	中级	中国	清华大学	2018.7-2020.7
39.	卢洋	博士后	男	28	中级	中国	清华大学	2018.10-2020.10
40.	周越	博士后	女	29	中级	中国	清华大学	2018.10-2020.10
41.	BASHIR BEENISH	博士后	女	36	中级	中国	清华大学	2018.11-2020.11
42.	姚志博	博士后	男	28	中级	中国	清华大学	2018.11-2020.11
43.	张志国	博士后	男	31	中级	中国	清华大学	2018.11-2020.11
44.	李小军	访问学者	男	37	副教授	中国	西安文理学院	2017.9-2018.7
45.	姚文志	访问学者	女	36	副教授	中国	华北水利水电大学	2017.9-2018.7
46.	杨小敏	访问学者	女	44	副教授	中国	华东交通大学	2017.9-2018.7
47.	金具涛	访问学者	男	35	副高级	中国	东莞理工学院	2018.9-2019.9
48.	赵建波	访问学者	男	42	副高级	中国	郑州轻工业学院	2018.9-2019.9

注：（1）流动人员包括“博士后研究人员、访问学者、其他”三种类型，请按照以上三种类型进行人员排序。（2）在“实验室工作期限”在实验室工作的协议起止时间。

四、学科发展与人才培养

1、学科发展

简述实验室所依托学科的年度发展情况，包括科学研究对学科建设的支撑作用，以及推动学科交叉与新兴学科建设的情况。

实验室本年度在新型有机发光材料与显示、分子催化以及超分子组装体的构筑、调控与功能等方向上的科研都取得了显著进展，一大批研究结果发表在国际知名期刊上，引起了广泛关注，部分研究成果已经投入工业应用，取得了良好的社会和经济效益。此外，实验室还通过理论研究与实验的合作，将研究成果系统化、理论化，推动了相关学科的发展。同时，实验室注重学科交叉，在推动功能材料在生物医学中的应用方面取得了具有重要影响的进展，为实验室的后续良性发展奠定了坚实基础。

2、科教融合推动教学发展

简要介绍实验室人员承担依托单位教学任务情况，主要包括开设主讲课程、编写教材、教改项目、教学成果等，以及将本领域前沿研究情况、实验室科研成果转化为教学资源的情况。

2018 年实验室徐柏庆、帅志刚、董桂芳、许华平等老师继续担任本科生《物理化学》、《结构化学》、《有机电子学》、《高分子化学导论》等十余门课程的教授工作。授课对象包括理学院化学系、药学院等多个院系。这些课程的教授帮助学生掌握了扎实的化学基础知识和理论，拓宽了学生的国际视野。

3、人才培养

(1) 人才培养总体情况

简述实验室人才培养的代表性举措和效果，包括跨学科、跨院系的人才交流和培养，与国内、国际科研机构或企业联合培养创新人才等。

鼓励学生跨院系参加学术交流，如参加相关院系组织的“博士生论坛”等。组织研究生“午间学术论坛”，邀请优秀研究生如特奖、国奖获得者与同学们分享学术心得。18 年共培养博士毕业生 29 名，硕士毕业生 4 名。

(2) 研究生代表性成果（列举不超过 3 项）

简述研究生在实验室平台的锻炼中，取得的代表性科研成果，包括高水平论文发表、国际学术会议大会发言、挑战杯获奖、国际竞赛获奖等。

一、发表高水平文章

- (1) 硕士生宋晓增提出了新的 TSF-OLED 的主体分子结构与材料体系设计策略，实现了国际领先的器件效率，为 OLED 进一步商业应用铺平了道路。相关工作发表在 *Advanced Materials*, 2018, 30(7): 1705406. 与 *Advanced Materials*, 2018, 30(6): 1705250 上。
- (2) 博士生李江伟报告了一种全无机 RP 相铅卤化物钙钛矿，并发现了一个独特的有序相

的热力学稳定特性。相关工作发表在 J. Am. Chem. Soc., 2018, 140, 11085 与 Chem. Mater., 2018, 30, 4847 上;
(3) 博士生李楠通过一步反溶剂方法证明了一系列 CsPb _{1-x} Sn _x IBr ₂ 钙钛矿合金, 为设计和合成新型无机卤化物钙钛矿提供了作为下一代光伏材料的可能性。相关工作发表在 Adv. Energy Mater. 2018, 1800525;
(4) 博士生焦阳通过主客体相互作用自适应地调控反应中间体的活性与稳定性, 构建了高效的两相催化氧化反应体系。相关工作发表在 Angew. Chem. Int. Ed., 2018, 57, 6077-6081.
(5) 博士生汤孝妍基于葫芦[8]脲的超分子光催化体系, 建立了超分子催化聚合的新方法, 可用于水溶液中聚阳离子的可控制备。相关工作发表在 Angew. Chem. Int. Ed., 2018, 57, 8545-8549.
二、获得奖项
姬少博的博士论文获清华大学优秀学位论文一等奖, 清华大学优秀博士毕业生。
三、相关专利
博士生郭航申请有机光电子方向专利三项, 其中包括:
(1) 一种传感器系统, 申请号 201810026530. I, 申请日: 2018 1 月 11 日, 发明人: 董桂芳, 郭航, 王立铎, 董庆顺。 申请人: 清华大学
(2) 一种触觉存储电子器件及电子设备. 申请日 20180411, 申请号 201810319746.7, 发明人: 董桂芳, 郭航。 申请人: 清华大学
(3) 一种非对称方酸菁材料及其制备方法和应用. 申请日期 20180814, 申请号 201810924884.8 发明人: 董桂芳, 郭航, 席婵娟。 申请人: 清华大学

(3) 研究生参加国际会议情况 (列举 5 项以内)

序号	参加会议形式	学生姓名	硕士/博士	参加会议名称及会议主办方	导师
1	特邀报告	黄毅超	博士	第 43 届配位化学国际会议	魏永革
2	口头报告	贾昊旻	博士	明斯特大学	刘冬生
3	论文张贴	宋晓增	硕士	2018-国际合成金属科学技术大会	段炼
4	口头报告	马福生	博士	材料研究大会	乔娟
5	论文张贴	魏鹏程	博士	第 10 届亚洲有机电子学会议	董桂芳
6	口头报告	刘佳雄、李亚晋	博士	美国化学会第 255 届年会 (255th ACS National Meeting, New Orleans, USA, American Chemical Society, March 18-22, 2018)	贺德华

注: 请依次以参加会议形式为大会发言、口头报告、发表会议论文、其他为序分别填报。**所有研究生的导师必须是实验室固定研究人员。**

五、开放交流与运行管理

1、开放交流

(1) 开放课题设置情况

简述实验室在本年度内设置开放课题概况。

开放课题的承担人员为实验室依托单位以外（包括国际）的研究人员。开放课题采用了发布指南，自由申请，专家评审，实验室学术委员会审批等方式进行管理。

建立访问学者制度，设置开放课题，是指国内外科研机构或高等院校的科研人员，教师，博士研究生及博士后，均可在本实验室开放课题指南范围内提出课题申请。实验室为申请者提供了良好的科研条件和学术环境，申请获批者，既可在原单位，也可到实验室开展独立或合作研究。

2018 年开放课题的申请明细如下表：

序号	课题名称	经费额度	承担人	职称	承担人单位	课题起止时间
1	有机小分子燃料电池中金属纳米催化剂的研制(II)	15000	袁强	教授	贵州大学化学与化工学院	2018-2019
2	二维石墨炔的合成及其光电学性质的研究	15000	黎明	副教授	湖北大学化学化工学院	2018-2019
3	储氢材料 B-N-H 化合物的高温高压研究	15000	杨新一	博士	吉林大学超硬材料国家重点实验室	2018-2019

注：职称一栏，请在职人员填写职称，学生填写博士/硕士。

(2) 主办或承办大型学术会议情况

序号	会议名称	主办单位名称	会议主席	召开时间	参加人数	类别
1	第二届单原子催化国际会议	清华大学化学系	李隽	2018.06.15	244	全球性

注：请按全球性、地区性、双边性、全国性等类别排序，并在类别栏中注明。

(3) 国内外学术交流与合作情况

请列出实验室在本年度内参加国内外学术交流与合作的概况，包括与国外研究机构共建实验室、承担重大国际合作项目或机构建设、参与国际重大科研计划、在国际重要学术会议做特邀报告的情况。请按国内合作与国际合作分类填写。

2018 年重点室成员有 20 人先后参加国际会议 60 次，做大会特邀报告 41 次，口头报告 11 次和论文张贴 3 次。与国外高等学校院系学术交流和研讨 14 次。有 15 人先后邀请国外著名大学等重要机构 80 余人来访，进行学术交流及洽谈合作。

(4) 科学传播

简述实验室本年度在科学传播方面的举措和效果。

为了给有志于未来在化学领域成就一番事业的高中化学学子提供近距离了解当代化学前沿和热点的机会,激发中学生的科研兴趣,搭建高中化学和大学化学之间的桥梁,依托有机光电子与分子工程教育部重点实验室,清华大学化学系于每年10月举办“全国优秀中学生诚志化学体验营”。此外,还举办了面向全国优秀高中生的“化学前沿体验营”活动。为了提高高中生的化学基础理论水平和实验操作技能的结合,化学系还举办了“全国中学生化学实验营”,对高中生进行基础化学实验培训,以培养他们学习化学的兴趣和创造精神;化学系还举办了“重点中学化学教师培训班”,为清华大学化学系和重点中学化学教师搭建了全新的桥梁,有利于双方加强了解,提升教学内驱力。

为了给全国高校优秀大学生提供走进清华园、全面了解清华大学化学学科的机会,促进高校间优秀大学生的沟通和交流,激发学生的科研兴趣,清华大学化学系于每年七月举办“全国优秀大学生夏令营”。

此外,重点实验室成员还上百次赴全国知名中学如人大附中、成都七中、衡水中学、西安高新中等做“i-Tsinghua”学堂、“神奇的高分子”等科普报告。

2、运行管理

(1) 学术委员会成员

序号	姓名	性别	职称	年龄	工作单位	是否外籍
1.	程津培	男	教授	70	清华大学	否
2.	张希	男	教授	53	清华大学	否
3.	姚建年	男	教授	65	中科院化学研究所	否
4.	田禾	男	教授	56	华东理工大学	否
5.	李亚栋	男	教授	54	清华大学	否
6.	陶绪堂	男	教授	56	山东大学	否
7.	帅志刚	男	教授	56	清华大学	否
8.	陈红征	男	教授	51	浙江大学	否
9.	高毅勤	男	教授	46	北京大学	否
10.	刘世勇	男	教授	46	中国科学技术大学	否
11.	黄飞	男	教授	39	华南理工大学	否
12.	樊春海	男	教授	44	上海交通大学	否
13.	唐智勇	男	教授	47	国家纳米中心	否

(2) 学术委员会工作情况

请简要介绍本年度召开的学术委员会情况，包括召开时间、地点、出席人员、缺席人员，以及会议纪要。

2018 年 12 月 10 日上午 9:00，清华大学化学系“有机光电子与分子工程教育部重点实验室”第二届学术委员会第三次会议在清华大学甲所第三会议室顺利举行。

会议由化学系基础分子科学中心程津培院士主持，化学系党委书记梁琼麟致欢迎辞。化学系主任、重点实验室主任王训教授做实验室年度工作报告。国家自然科学基金委副主任姚建年院士，张希院士，陈红征教授，陶绪堂教授，刘世勇教授，黄飞教授，樊春海研究员，帅志刚教授，段炼教授许华平教授以及学校科研院机构办相关负责人和实验室部分老师约 40 人出席了本次会议。

具体内容如下：

1、梁琼麟致辞

本次是有机光电子与分子工程学教育部重点实验室评估的第三次会议，之前的每次会议都定期召开，专家定期提出了重要意见，所以本实验室取得了重要进步，离不开专家的精心指导、支持和帮助。过去一年里，学科评估取得了 A+ 的成绩，人才队伍的建设有了新的发展，有超过 10 位校友入选青千，国强楼的奠基也为实验室条件保障有了改善，对人才培养有了保证。接下来，我们将继续建设学科，加强学科布局规划，平衡学科发展，增加原创性，扩大学科的国际影响力，实现从规模到内涵的发展，期待跨越新高峰。而这一切都离不开专家的建议和指导。

2、王训做 2018 年实验室年度报告

根据 2018 年教育部评估情况，本实验室以基础研究为定位，以发展新型有机光电材料和器件为目标，以有机光电子与分子工程的发展为目标。过去五年的队伍建设有了进步，引进了新的青年人才，共发表了 500 多篇文章；在产业上有积极推动，建立了大陆第一条 AMOLED 生产线，且 PMOLED 市场占有率世界第一；在柔性显示上，实现向实用化的推动，拥有有自主知识产权的专利，并有了实际应用方面的推广。

根据之前的专家评估，本实验室进一步凝练科研方向，并且积极推动有机电子学和分子工程学交叉学科的发展。在过去一年里，本实验室在人才引进方面有了新的青年人才；在硬件投入方面，本实验室获得每年校投的 150 万重点实验室经费、双一流学科经费，并有了四分之一的生命科学馆和国强楼的实验室扩展，另外还建立了清华化学系-诚志联合实验室，为人才引进提供了支撑。本实验室通过理论计算、光电材料和器件、分子设计与催化、分子组装相结合，在 2018 年共发表 256 篇文章，影响因子 10 以上的文章有 38 篇。

3、六位老师的科研成果展示

王朝晖

王朝晖的研究是针对纳米碳芳酰亚胺的精准合成与应用。根据纳米碳的特性，精准合成、拓扑结构和手性构型都是其研究的重点。设计了从传统光电材料并五苯拓展出的芳酰亚胺骨架的系列材料，通过设计引入多发色团，控制拓扑结构，提高了结晶性，从而实现了聚集态的控制，并对合成进行优化，实现了高效合成，同时可以实现对手性构型的控制。

段炼

OLED 在国内目前已有 16 条生产线，国内市场对材料的需求很大。TADF（热活化延迟荧光材料）作为第三代发光材料应用于 OLED 领域以后广受关注。首次提出以 TADF 材料为主体敏化传统染料发光，将上转换和发光功能分开，有利于分子设计。

搭配荧光染料做客体的 TADF+F 被称为是第四代发光材料，为避免主体到客体的 Dexter 能量传递和载流子在染料上直接复合导致的不发光，从而减少能量损耗，提出加入惰性基团，减少分子间电子云碰撞，这样减少了 Dexter 能量传递和载流子在染料上复合，最终实现了高效发光，并且抑制了大电流密度下的效率滚降。另外荧光染料的引入还减小了半峰宽，避免了 TADF 发光具有半峰宽太宽的缺点，实现了显示上的高色纯。

另外，研究了 TADF+TADF 的体系，TADF 的引入使三线态激子更快地回到基态，避免累积以后影响器件寿命和效率。减小了三线态激子对器件寿命的影响，在高效率的同时实现了长寿命，引起了相关领域专家的跟踪工作。

除此以外，对一系列嘧啶类 TADF 分子进行研究发现相同的复合机制下，三线态能级的降低有利于器件寿命的增加。并且 Langevin 复合能够实现主体负责载流子捕获和传输、客体负责发光，有利于器件设计，因此应作为优选的复合方式。基于此，设计了三线态能级较低的 TADF 主体通过 Langevin 复合的器件，与同方向国内外研究相比，在色坐标更蓝的情况下，实现了相当的效率和寿命。

专家针对的研究提出问题：第五代发光材料可能是什么，以及可能的光电转换新途径是什么？认为发展既高效但不延迟的荧光材料可能成为接下来的研究热点。

王冬

王冬的研究是关于新型材料中的电热磁，包括以下几个方面。

RP 相全无机 2D 铅卤钙钛矿的稳定性和电子结构

RP 相的引入可以有效改善钙钛矿的稳定性和钙钛矿 LED 的发光效率，但目前报导的 RP 相是具有长链氨基的有机分子，在合成上受限制。通过热力学稳定性计算和电学性质（迁移率等）的计算筛选出了一种 $\text{CsPbI}_2\text{Cl}_2$ ，并得到了它的结构。该材料既具有稳定性，又具有紫外光响应性。这是首次设计出 RP 相全无机 2D 铅卤钙钛矿，填补了这一方面的空白。

n 型金属配位聚合物的热电性能

最近，国内外在 n 型和 p 型热电材料都有了重要进展。n 掺杂的研究较少。研究了 n 掺杂对 PEDOT 的热电性质的影响。构建模型，发现掺杂以后聚合物链的键长、配位性、共轭性、极化子带、极化子大小等方面都有了明显变化；在热电性质上，如电荷局域化程度、电导率、热电功率因子，掺杂后也呈现大幅变化。同时 也做了输运性质的温度关系研究，提出了双带运输模型，解释了实验中观察到的迁移率和电导率对温度具有非单调的依赖关系的现象。

全 Sp² 碳共轭 COF 体系的电学性质

2017 年，全 Sp² 碳共轭的 COF 体系被首次提出。提出通过化学调控的方法，在对迁移率和有效质量进行计算的基础上，改变取代基能够有效改善 COF 的空穴传输性质。而且这一 COF 体系还具有注入电子有高迁移率、注入空穴有铁磁相变的特点，对研究电子、空穴及其相互作用来说非常理想。

专家针对 的研究提出以下问题：光电材料领域中理论计算的挑战和难点是什么？认为，

激发态计算方法的准确性还存在问题，难以得到具有普适性的方法。

徐江飞

徐江飞的研究是关于超分子催化。在超分子催化中，不论是利用模拟酶、还是分子笼或大环主体，都面临着一个重要挑战——产物抑制效应，也就是产物与大环的结合比较强，在大环内部难以脱附，占据了大环的活性位点，从而导致大环或分子笼的加入量很大。设计了一个超分子体系，只需要加入百分之一当量的大环体系，就能够实现催化光化聚环的发生。在葫芦脲的促进作用下发生光化聚团，生成二聚产物以后，因为葫芦脲与产物的结合较弱，所以可以竞争脱附、离开空腔，进行下一个催化反应，实现整个聚合的反应发生。同时葫芦脲具有稳定性、刚性、易于制备、生物相容性较好、有水溶性的优点，对反应进行更加有利。本研究建立了催化量大环主体加速反应的超分子催化体系，并从连续二聚到聚合，建立了超分子催化聚合新方法。

王朝

王朝的研究是关于力学自适应型电学高分子。

一般来说，优秀的电学性质和力学自适应性难以兼得，例如橡胶和传统电学高分子。因此本领域的目标和挑战是使高分子同时具有优秀的电学性质和力学自适应性。实现力学自适应性需要分子链能够在应力下滑移，而电学性质需要共轭高分子的 π - π 堆积。为解决这一问题，提出了以下两个思路。

基于非共价键的应力耗散体系

提出在分子体系内引入超分子增加单位面积内的能量耗散，从而实现良好的力学自适应性。根据一系列设计原则（结合常数适中、常温下动态可逆、多向性），选择了能够通过氢键进行多向打开和断裂的脲基，结合无机电学颗粒，实现了柔性和自修复，可应用于电子皮肤和锂电池。另外，还利用配位键能够可逆地打开和断裂，研究了基于强弱结合配位键的超拉伸自修复弹性体。同时，设计了具有多重离子-偶极相互作用的体系，这一体系具有超拉伸、自修复、水下稳定、良好离子导体等优点，已应用于水下自修复透明触摸屏。

基于自组装的电荷传输体系

对具有半导体性质和电荷耗散能量的高分子体系进行自组装，形成电荷传输和良好力学性质的两个通路，实现了高迁移率和 100% 拉伸，此研究正在进行。

专家提出是否可以通过高分子侧链实现超分子设计，以此避免掺杂的不利影响？认为的可以通过高分子侧链的自组装形成相分离，从而实现优秀的电学性质和力学自适应性的兼得。

乔娟

乔娟的研究是关于有机光电材料的稳定性及其老化机理。从有机光电材料的关键基础科学问题出发，对蓝光材料的稳定性的机制进行了研究，并提出了分子设计策略。

蓝光材料因为其具有带隙宽、激发态能量高（大于 2.8 eV）、发光涉及高能态的特点，一直具有稳定差的特点。为打断共轭、提升激发能，引入碳杂原子，关注键能。通过理论计算和实验相结合，发现，之前广受关注的膦氧类材料的碳氮键和碳磷键的键能较小，与激发态能量相近，所以发光时容易断裂，结合表征分析，的确发生断裂产生了分子离子峰。另外，对二苯硫分和二苯并硫分进行研究后提出了提高稳定性的策略——关环有利于键能的提升，从而提高蓝光材料的稳定性。以上研究为分子设计提供了思路，在理论计算后比较最弱键能和激发态能

量的大小，就可以预测蓝光材料的稳定性。除此以外，还研究了邻位效应对 TADF 分子激发态稳定性的影响，将典型的给受体基团放在一起研究邻位取代对键结合能的影响，从而实现对键能的理性调控。

还对有机/无机杂化钙钛矿稳定性问题进行了研究。钙钛矿具有对水、氧、紫外光敏感以及易热分解、相转变、离子迁移的缺点，针对这些问题，提出了阳离子- π 相互作用大幅抑制离子迁移的方法，通过加入红荧烯形成阳离子- π 相互作用，甲胺离子的离子迁移被抑制，从而实现了效率大幅提升和稳定性的改善；另外，还提出了形成异相结的方法来增强钙钛矿薄膜稳定性和近红外发光特性，通过控制前驱体比例，得到了 α - δ 异相结，在空气的水氧作用下都十分稳定，而且实现了高效的近红外发光。

4、根据上述汇报，专家给出如下建议

(1) 研究应更多地从原理出发，加强对光电领域的基础科学问题的强调，深入进行具有原创性和创新性的研究。

(2) 研究应着眼于国家重大需求，在基础研究的基础上加强实际应用，解决实际问题。

(3) 实验室目前的方向较多，应注意各方向之间的关联性，而且应该凝练出一个符合发展目标的方向，聚焦一处，形成实验室特色。并实现学科的交叉融合与合作，使多位老师共同参与合作完成。

(3) 主管部门和依托单位支持情况

简述主管部门和依托单位本年度为实验室提供实验室建设和基本运行经费、相对集中的科研场所和仪器设备等条件保障的情况，在学科建设、人才引进、团队建设、研究生培养指标、自主选题研究等方面给予优先支持的情况。

实验室自成立以来，在学科建设，人才引进，团队建设，研究生培养指标及自主选题研究等方面，得到了学校的大力支持，在 2018 年，对实验室建设和基本运行费等方面给予了经费支持约 800 余万元。在实验室空间建设上，学校克服困难为实验室增加面积约 200 平米，兼顾了科研场所与大型仪器设备安置地点的相对集中，为科学研究及测试分析提供了方便、高效的优越条件。

随着实验室内优秀人才的不断增加及国家重大科技项目的逐渐增多，研究生培养指标成了实验室快速发展的瓶颈，为此，学校鼓励实验室招收联合培养的学生，与国内外高水平科研院所合作，共同培养优秀人才。

同时，学校每年通过审计运行费，提交年度报告等方式，对实验室进行考核。

3、仪器设备

简述本年度实验室大型仪器设备的使用、开放共享情况，研制新设备和升级改造旧设备等方面的情况。

到 2018 年 12 月底，实验室拥有设备总资产约 1.2 亿元，其中大于 10 万元以上仪器设备价值 6000 余万元。

目前实验室的所有仪器设备处于稳定运行状态，随时为实验室的课题研究及项目实施提供高水平的技术支持。大型仪器设备如飞行时间二次离子质谱仪(TOF-SIMS)、X 射线光电子能谱仪(XPS)、纳米扫描俄歇电子能谱仪(AES)、原子力显微镜(AFM)、扫描隧道显微镜(STM)、色谱-红外光谱分析仪、化学吸附仪(CI)等近 20 种仪器的机时数年均达到 3000~3600 小时，使用效率超过 80%。与此同时，在保证实验室的科研与教学工作顺利进行的情况下，对 XPS 和 AES、TOF-SIMS、AFM 和 CI 等设备对外开放，开放的机时数占总机时数分别为 90%以上、70%以上和 50%左右。总对外共享率 80%以上。

大型仪器设备的使用采取专人管理、共享开放、有偿使用、加强维护保养的原则，确保仪器高效率运转。针对研究的特殊需要，对个别大型仪器设备进行技术革新，开发了新功能，为开展高水平的研究工作提供了保障。还改造了个别超期使用的设备，做到物尽其用。

为培养研究生的动手能力，要求在经过严格培训后独自操作使用大型仪器设备。

六、审核意见

1、实验室负责人意见

实验室承诺所填内容属实，数据准确可靠。

数据审核人: 李永红
实验室主任: 李永红
(单位公章)
2019年6月
化学系
7101081164919

2、依托高校意见

依托单位年度考核意见:

(需明确是否通过本年度考核, 并提及下一步对实验室的支持。)

依托单位负责人签字:

(单位公章)

年 月 日



Handwritten signature in red ink.