**项目公示（单位提名）**

一、项目名称：钛氧团簇的设计合成与功能应用

二、提名奖种：福建省自然科学奖

三、提名单位：中国科学院福建物质结构研究所

四、项目简介：

二氧化钛材料被广泛应用于催化领域，对开发清洁能源及降低环境污染等具有重要研究意义。作为二氧化钛材料的结构与性能模型分子，钛氧团簇已经成为国际化学与材料领域的研究热点之一。本项目成功构建了钛氧团簇的结构设计策略；进而发展了有效的合成方法，实现了钛氧簇的簇核结构与表面结构的精确调控，拓展了其催化应用，建立起明确的结构-性能关系规律。在“钛氧团簇”研究领域取得了世界领先的研究成果：

**（1）提出了“配位延迟水解（CDH）”合成策略，解决了氧化钛材料形成过程中成簇结晶难题：利用有机配体的保护作用抑制钛离子的快速无序水解，实现了钛氧簇的可控晶体生长，成功合成系列结构新颖的钛氧簇，包括首例同分异构的Ti20氧簇，首例类富勒烯型Ti42氧簇和目前最高核Ti52氧簇（代表性论文1、2），极大促进了钛氧簇合成化学的发展。**

**（2）发展了钛氧簇的结构调控策略，奠定了钛氧簇的功能应用基础：利用活性配位点思想，系统研究了不同功能有机配体对钛氧簇表面的化学修饰，实现了其能带结构和催化活性的调控与优化；利用共轭配体修饰获得了可见光驱动催化活性（代表性论文3）。**以钛氧簇为功能基元，成功构筑具有协同效应的复合功能材料，实现了无贵金属助催化剂条件下的高效可见光驱动分解水产氢**（代表性论文4和5）。**

本项目在国内外重要刊物发表10篇高水平研究论文，其中5篇代表性论文他引456次，单篇最高他引137次；5篇其它论文他引554次，单篇最高他引202次。第一完成人2014年获国家杰出青年基金资助；2018年获得中国化学会-赢创化学创新奖；2019年入选万人计划“领军人才”。第二完成人2019年获国家优秀青年基金资助。

五、主要完成单位及其贡献：

主要完成单位：中国科学院福建物质结构研究所。贡献：(1)为项目研究提供经费支撑; (2)为项目研究提供测试所需的各类型仪器设备; (3)为项目研究提供理论计算所需的软件; (4)为项目研究提供测试和分析服务; (5)提供网络信息服务、网络技术及应用的支持; (6)提供文献传递服务，等等。

六、主要完成人及其贡献：

**张 健**，项目负责人。对创新点1、2有主要贡献。提出研究总体思路、计划与方案，组织实施项目研究工作。提出本项目的关键学术思想与研究思路，指导项目组成员开展钛氧团簇研究。完成论文学术思想方面的撰写、是全部发现点的主要完成人，对全部发现点均做出创造性贡献，是所有代表性论文的通讯作者。投入本项目的工作量占本人工作量90%。

**张 磊**，项目第二完成人。对创新点1、2有主要贡献，是代表性论文1、2、3、4的共同通讯作者。参与项目学术思想、研究方向的讨论确定，研究内容、实验方案的设计规划，以及结果分析、论文写作等方面的工作。对全部发现点均做出重要贡献。发展了利用酯化反应控制体系水量的方法，实现了钛氧簇的簇核结构与表面结构的精确调控。在该项目研究中的工作量占本人工作量的90％。

**方伟慧**，项目第三完成人。对创新点1有主要贡献。参与实验设计与操作、数据结果分析、论文写作等方面的工作，是代表性论文2的第一作者。制备了目前最高核Ti52氧簇，簇核尺寸达到3.6 nm。在该项目研究中的工作量占本人工作量的90％。

**何燕萍**，项目第四完成人。对创新点2有主要贡献。参与实验设计与操作、数据结果分析、论文写作等方面的工作，是代表性论文3的第一作者。合成了首例可溶于水、超稳定且具有配位组装功能的钛-有机四面体。在该项目研究中的工作量占本人工作量的90％。

**刘雅洁**，项目第五完成人。对创新点2有主要贡献。参与实验设计和操作、数据分析、研究结果总结、论文写作等方面的工作。是代表性论文5的第一作者。实现了钛氧簇材料在无贵金属助催化剂条件下的高效可见光驱动分解水产氢。在该项目研究中的工作量占本人工作量的90％。

七、主要知识产权及代表性论文专著等支撑材料目录：

**代表性论文专著目录：**

1. Mei-Yan Gao, Fei Wang, Zhi-Gang Gu, De-Xiang Zhang, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang**\*, “Fullerene-Like Polyoxotitanium Cage with High Solution Stability”, ***J. Am. Chem. Soc.*** **2016**,*138*, 2556–2559.
2. Wei-Hui Fang, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang\***, “A 3.6 nm Ti52-Oxo Nanocluster with Precise Atomic Structure”, ***J. Am. Chem. Soc.*** **2016**, *138*, 7480–7483.
3. Yan-Ping He,Lv-Bing Yuan, Guang-Hui Chen, Qi-Pu Lin, Fei Wang, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang**\*, “Water-Soluble and Ultrastable Ti4L6 Tetrahedron with Coordination Assembly Function”, ***J. Am. Chem. Soc.*** **2017**, *139*, 16845–16851.
4. Zhiqiang Jiang, Jinxiu Liu, Meiyan Gao, Xi Fan, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang**\*, “Assembling Polyoxo-Titanium Clusters and CdS Nanoparticles to a Porous Matrix for Efficient and Tunable H2-Evolution Activities with Visible Light”, ***Adv. Mater.*****2017**, *29*, 1603369.
5. Ya-Jie Liu, Lin Geng, Yao Kang, **Wei-Hui Fang\***, **Jian Zhang**\*, “Odd-membered cyclic hetero-polyoxotitanate nanoclusters with high stability and photocatalytic H2 evolution activity”, ***Chin. J. Catal.* 2021**, *42*, 1332–1337.

**其它论文：**

1. Wei-Hui Fang, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang**\*, “Synthetic strategies, diverse structures and tuneable properties of polyoxo-titanium clusters”, ***Chem. Soc. Rev.* 2018**, *47*, 404–421.
2. Jin-Xiu Liu, Mei-Yan Gao, Wei-Hui Fang, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang\***, “Bandgap Engineering of Titanium-Oxo Clusters: Labile Surface Sites Used for Ligand Substitution and Metal Incorporation”, ***Angew. Chem. Int. Ed.*****2016,** *55*, 5160–5165.
3. Shuai Chen, Wei-Hui Fang, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang**\*, “Atomically Precise Multimetallic Semiconductive Nanoclusters with Optical Limiting Effects”, ***Angew. Chem. Int. Ed.* 2018**, *57*, 11252–11256.
4. Xi Fan, Junhui Wang, Kaifeng Wu\*, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang**\*, “Isomerism in Titanium-Oxo Clusters: Molecular Anatase Model with Atomic Structure and Improved Photocatalytic Activity”, ***Angew. Chem. Int. Ed.* 2019**, *58*, 1320–1323.
5. Shuai Chen+, Zhe-Ning Chen+, Wei-Hui Fang, Wei Zhuang\*, **Lei Zhang\***, **Jian Zhang**\*, “Ag10Ti28‐Oxo Cluster Containing Single‐Atom Silver Sites: Atomic Structure and Synergistic Electronic Properties”, ***Angew.Chem. Int. Ed.* 2019**, *58*, 10932–10935. (+ Co-first authors)