

新聞稿

即時發放

港大化學研究團隊破解無機化學謎題  
首次發現廣泛應用在光電材料上的嗜金屬相互作用具排斥性  
為製造新型超分子材料提供新觀點

2021 年 1 月 17 日

由香港大學理學院化學研究部及化學系支志明教授及楊軍博士率領的研究團隊，破解了一個困擾無機化學界多年的難題——閉殼層金屬-金屬之間的相互作用。該研究成果現已在期刊《美國國家科學院院刊》(PNAS) 發表。

金屬-金屬閉殼相互作用（又稱嗜金屬相互作用），在多個化學領域如超分子化學和有機金屬化學等均具有巨大的影響。關於嗜金屬相互作用的研究可追溯至 1970 年代的文獻，許多世界知名的理論化學家都曾在該領域作出貢獻，包括 Roald Hoffmann 教授（1981 年諾貝爾化學獎得主）及 Pekka Pyykkö 教授等。嗜金屬相互作用在過渡金屬配合物的自組裝過程中相當重要，其在有機半導體、生物傳感和功能性光電材料中有着廣泛的應用。

### 挑戰傳統觀念的發現

嗜金屬相互作用的理論源於歐洲，早被化學家廣泛用作分子設計的指導原則，以及對過渡金屬配合物光譜性質作出理論化的解釋。到目前為止，學術界對嗜金屬作用的普遍共識是「相互吸引的」，其作用原理被認為是由軌道雜化或重金屬原子（如金或鉑）的相對論效應所導致。支志明教授、楊軍博士率領的研究團隊挑戰了配位化學家的傳統觀點，他們發現金屬-金屬之間具有強烈的泡利排斥（ $M-M'$  Pauli repulsion）作用，導致嗜金屬作用在本質上互相排斥，而非傳統認為的互相吸引。他們對嗜金屬性進行了理論和實驗相結合的研究，並觀察到具有閉殼電子構型的有機金屬配合物中，有着很強的金屬-金屬泡利排斥作用。這項發現對於閉殼層金屬配合物相關的研究具有長遠的影響，並為製造可替代貴重金屬的新型超分子材料（例如鈮、銀或鎳的過渡金屬配合物）提供理論支持，這也是一項讓化學研究人員更加了解分子間弱相互作用（weak intermolecular interactions）的重要成就。

## 研究背景與主要發現

微觀世界中包含多種不同的相互作用，而嗜金屬作用向來用作解釋金屬原子之間的閉殼電子層裏存在的相互作用。早在 1970 年代初期，化學家觀察到一個有趣的現象，即兩個閉殼金屬原子之間會形成較短的金屬-金屬距離。有無機化學家提出：在兩個金屬原子之間存在一種特殊的「吸引力」，從而令兩個金屬原子相互接近。許多理論化學家亦提出了各式各樣的理論模型來解釋這現象，例如推論此現象是由軌道雜化模型或重金屬的相對論效應等導致。可是，這些理論模型長期以來都與一些實驗觀察結果互相違背，例如在晶體結構中，金-金之間的距離比銀-銀之間的距離要長。這些問題無法用現有的理論模型來解釋，因而一直是無機和理論化學界的懸題。

支教授和楊博士所率領的研究團隊，運用了精密的計算方法和實驗技術來解開這個難題，引證了金屬-金屬之間強烈的泡利排斥作用導致嗜金屬具排斥性。據保守估計，至今已有超過 5 千多篇論文進行過和「嗜金屬相互作用」相關的研究，而學術界對此現象的普遍共識皆是「具吸引力的」。研究團隊在 PNAS 期刊中首次提出：「嗜金屬相互作用」其實是具有相互排斥性，而軌道雜化和相對論效應會增強金屬-金屬之間的泡利排斥作用，而分子間的色散力和靜電相互作用將抵消金屬與金屬之間的排斥力，從而導致金屬與金屬之間相互接近，這正好解釋為何銀-銀之間的距離比金-金之間的距離要短。這項研究亦獲得沃爾夫化學獎（化學界最高榮譽獎項之一）2004 年得獎人、加州理工大學 Harry Gray 教授的高度評價和推崇。

## 關於研究團隊

這項研究由化學研究部及化學系支志明教授和楊軍博士所率領的團隊完成。萬晴雲博士是第一作者，她與楊博士和支教授皆為共同通訊作者。支教授團隊的研究助理教授杜偉邦博士亦有份參與研究。研究得到香港研究資助局、香港大學合成化學國家重點實驗室，以及港大資訊科技服務的支持。團隊亦感謝深圳市基礎研究計劃和廣東省基礎研究與應用研究重大計劃的支持。

## 關於支志明教授

支志明教授，1982 年師承潘宗光教授，於港大化學系獲得博士學位。1980 年到 1983 年間，他在加利福尼亞理工 Harry B Gray 教授的研究室從事博士後研究工作。其後，他回到港大回饋母校，並於 1992 年晉升為化學系講座教授。支教授於 1999 年及 2016 年，分別被任命為許慧嫻化學講座教授及周光召自然科學教授。

多年來支教授獲得了許多獎項及殊榮。在 38 歲的時候，他當選為中國科學院院士，成為第一個獲得此榮譽的香港科學家，也是當時最年輕的中國科學院院士。2007 年獲得中國國家自然科學獎一等獎，2013 年當選為美國國家科學院外籍院士，2016 年獲得由亞洲化學學會頒發的 Ryoji Noyori ACES 獎，同年獲得中國化學會黃耀曾金屬有機化學終身成就獎。他的研究興趣包括無機和有機合成、金屬-配體多重鍵的反應活性、金屬有機催化、有機金屬配合物的光化學和光物理、發光材料以及無機藥物化學。自 2016 年以來，他一直擔任香港大學化學系主任，他在國際化學期刊上發表近 1000 篇論文，現時他的 H 指數為 120。

有關支教授及其研究團隊更多資料，請瀏覽以下網址：<https://cmche-hku.weebly.com/prof-c-m-che.html>

#### 關於楊軍博士

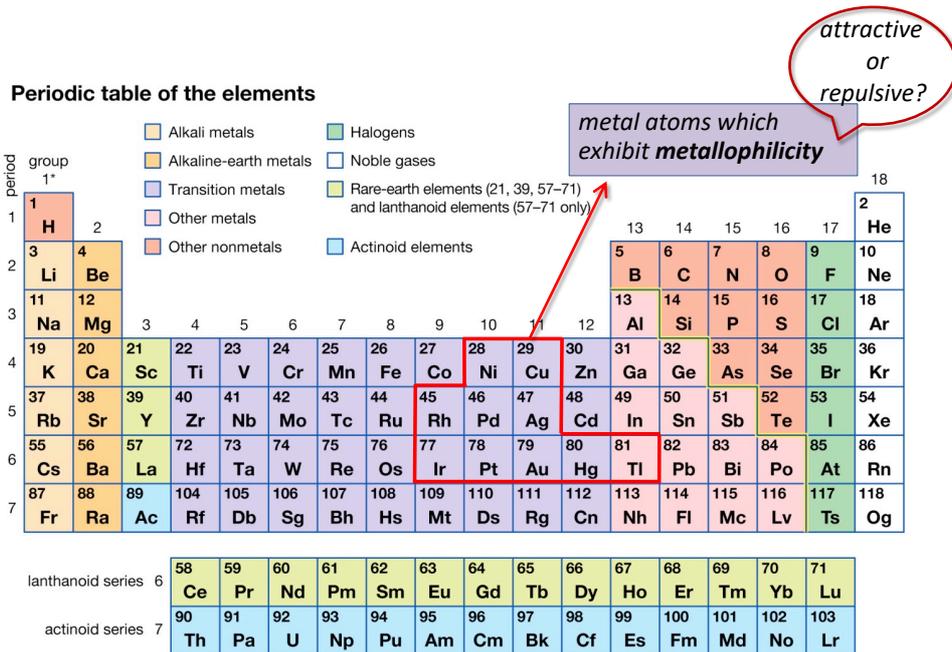
楊軍博士，港大化學系助理教授，主要從事量子化學理論、算法和應用研究，研究方向包括發展複雜體系波函數電子相關理論、分子激發態計算方法及應用、電子-振動耦合方案、OLED 能源材料的理論研究等。理論化學博士師從德國科隆大學 Michael Dolg 教授，2009 年起在康奈爾大學和普林斯頓大學 Garnet Chan 教授課題組從事博士後工作，期間於第 50 屆美國 Sanibel Symposium 會議上獲理論化學 IBM-Löwdin 獎，2013-16 擔任普林斯頓大學化學系物理化學課程講師，2016 年起任職港大化學系助理教授。獲得香港研資局傑出青年學者獎，並主持兩項香港研資局優配研究金計劃，參與香港創新局 AIR@InnoHK 人工智能項目等。至今研究工作發表在 Science、PNAS、Angew. Chem.、JACS 和 Chem. Sci. 等知名期刊，以及 JCTC 和 JCP 等理論化學頂刊。有關楊博士及其研究團隊更多資料：

<https://www.junyanglab.com>

#### 關於萬晴雲博士

萬晴雲博士於 2014 年在中國科學技術大學獲得材料物理學學士學位，並在中科院理化技術研究所的吳驪珠教授和佟振合教授的指導下完成了本科畢業設計。2014 年，她加入支志明教授的團隊修讀化學博士學位，並於 2019 年畢業。2018 年，她前往麻省理工大學進行了半年的交流學習，師從 Christopher C Cummins 教授。她的研究興趣包括基於有機金屬配合物的超分子材料的合成和應用，以及計算化學。萬博士已發表了 16 篇經同行評審的文章，包括了 5 篇第一作者或通訊作者的論文：Chem (1)、JACS (1)、ACIE (2) 及 PNAS (1)。

有關是次於 PNAS 刊登的研究論文請見：<https://www.pnas.org/content/118/1/e2019265118.short>



\*Numbering system adopted by the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). © Encyclopædia Britannica, Inc.

圖 1. 元素周期表中具有嗜金屬相互作用的金屬元素。

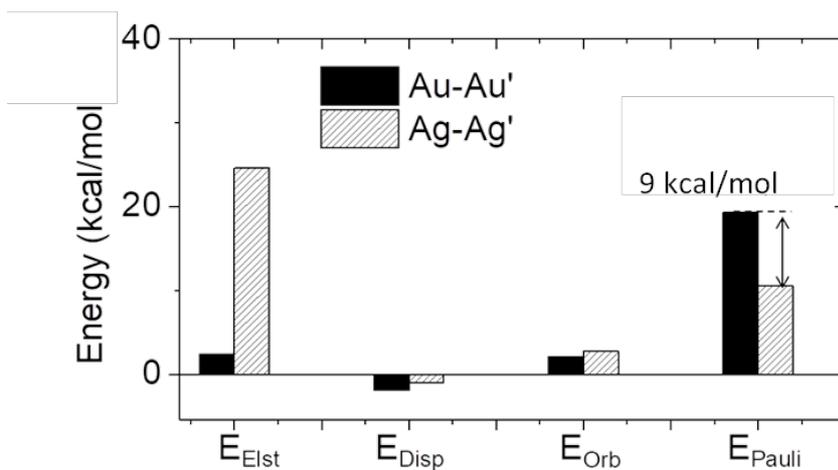
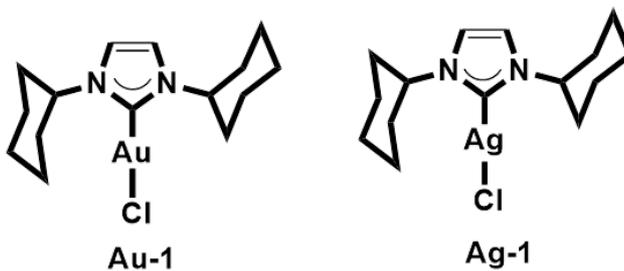


圖 2. Au 和 Ag 配合物的化學結構，計算結果表明，Au-Au 之間的泡利排斥作用比 Ag-Ag 之間的泡利排斥力強。



圖三. 左起：萬晴雲博士、楊軍博士、支志明教授，以及杜偉邦博士。