

一种新型蒽基二维共价有机框架纳米片 用于单线态氧的快速捕获和可控释放

安 静¹, 苗 波², 赵桐依², 宋佳隆¹, 张文娱¹, 袁碧贞¹,
刘耀祖², 钟 恬³, 方千荣²

(1. 珠海科技学院生命科学学院, 珠海 519040; 2. 吉林大学化学学院, 长春 130012;
3. 澳门科技大学医学院, 澳门 999078)

摘要 单线态氧(¹O₂)是一种高度活泼的物质, 具有强氧化性, 在光动力治疗、有机合成和材料科学等领域具有重要应用价值. 然而, ¹O₂的短寿命和高反应性使其实际应用面临挑战. 为克服这些挑战, 开发可用于¹O₂的高效捕获与可控释放的材料已引起了广泛关注. 共价有机框架(COFs)具有独特的晶体结构、高孔隙度和优异的稳定性的, 是理想的¹O₂存储和传输材料. 本文设计并合成了以蒽为核心单元的二维COF(2D An COF), 并进一步通过剥离得到纳米片(2D An COF-nanosheet), 以提高其性能. 荧光光谱分析表明, 与块体2D An COF相比, 2D An COF-nanosheet表现出更高的¹O₂捕获速率, 这归因于其更多暴露的活性位点. 2D An COF及其剥离后的纳米片在外部热或光刺激下, ¹O₂释放过程表现出优异的可逆性, 且经过多次循环后性能无显著衰退. 研究结果突显了二维COF材料, 特别是纳米片形态的二维COF材料, 在¹O₂存储和释放中的高效和稳定性. 本研究为设计基于二维共价有机框架的¹O₂存储与释放材料提供了新的思路, 并为其在光动力治疗和光催化等领域的应用奠定了理论基础.

关键词 多孔材料; 共价有机框架; 纳米片; 蒽基单元; 单线态氧捕获与释放

中图分类号 O611; TB34 文献标志码 A doi: 10.7503/cjcu20250117

A Novel Anthracene-based Two-dimensional Covalent Organic Framework Nanosheet for Rapid Singlet Oxygen Capture and Controllable Release

AN Jing¹, MIAO Bo², ZHAO Tongyi², SONG Jialong¹, ZHANG Wenyu¹,
YUAN Bizhen¹, LIU Yaozu^{2*}, ZHONG Tian³, FANG Qianrong²

(1. School of Life Science, Zhuhai College of Science and Technology, Zhuhai 519040, China;

2. College of Chemistry, Jilin University, Changchun 130012, China;

3. Faculty of Medicine, Macau University of Science and Technology, Macau 999078, China)

收稿日期: 2025-04-18. 网络首发日期: 2025-10-17.

联系人简介: 刘耀祖, 男, 博士, 助理研究员, 主要从事共价有机框架材料的合成与性能方面的研究. E-mail: yaozuli@jlu.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金(批准号: 22025504, 21621001, 202401108 和 22105082)、中国博士后科学基金项目(批准号: BX20230143, 2024M751078)、国家重点研发计划项目(批准号: 2022YFB3704900, 2021YFF0500500)、广东省教育厅重点领域项目(批准号: 2024ZDZX3004)、广东省教育厅教学改革项目(批准号: 2023011)、广东省重点科研平台和项目(批准号: 2025KTSCX233)和珠海科技学院“多层次”人才建设项目资助.

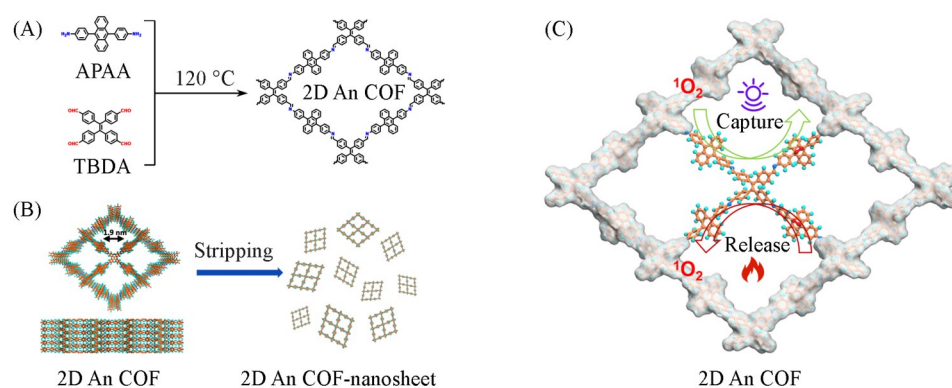
Supported by the National Natural Science Foundation of China(Nos.22025504, 21621001, 202401108, 22105082), the China Postdoctoral Science Foundation(Nos. BX20230143, 2024M751078), the National Key Research and Development Program of China(Nos. 2022YFB3704900, 2021YFF0500500), the Key Area Project of Guangdong Provincial Department of Education, China(No.2024ZDZX3004), the Teaching Reform Project of Guangdong Provincial Department of Education, China(No.2023011), the Key Science-technology Research Platforms and Projects of Guangdong Province, China(No. 2025KTSCX233) and the “Three Levels” Talent Construction Project of Zhuhai College of Science and Technology, China.

Abstract Singlet oxygen ($^1\text{O}_2$) is a highly reactive species with strong oxidizing properties, making it valuable in various applications, including photodynamic therapy, organic synthesis and material science. However, its short lifetime and high reactivity present significant challenges in its practical use. To overcome these challenges, the development of efficient materials for $^1\text{O}_2$ capture and controlled release has attracted considerable attention. Covalent organic frameworks (COFs), with their unique crystalline structure, high porosity and exceptional stability, have emerged as ideal candidates for $^1\text{O}_2$ storage and transfer. In this study, we designed and synthesized a two-dimensional anthracene-based COF (2D An COF), which was further exfoliated into nanosheet (2D An COF-nanosheet) to enhance its performance. Fluorescence spectroscopy analysis demonstrated that the 2D An COF-nanosheet exhibited a significantly higher $^1\text{O}_2$ capture rate compared to the bulk COF, which can be attributed to their more exposed active sites. Both the 2D An COF and its exfoliated nanosheet showed excellent reversibility in $^1\text{O}_2$ release when exposed to external thermal or light stimuli, with no significant degradation in performance after multiple cycles. The results highlight the potential of 2D COF materials, particularly in nanosheet form, as efficient and stable platforms for $^1\text{O}_2$ storage and release. This work provides new theoretical insights into the design of $^1\text{O}_2$ -responsive materials and opens new avenues for applications in photodynamic therapy, photocatalysis and other fields requiring precise control over reactive oxygen species.

Keywords Porous material; Covalent organic framework; Nanosheet; Anthracene unit; Singlet oxygen capture and release

单线态氧($^1\text{O}_2$)具有强氧化性,能够氧化多种有机和生物化合物,被广泛应用于光动力治疗(PDT)、有机物合成及材料科学等领域^[1-4].然而,由于 $^1\text{O}_2$ 的极短寿命和高度反应性,其基础研究和实际应用面临挑战^[5].因此,开发能够高效捕获并可控释放 $^1\text{O}_2$ 的载体尤为重要^[6-10].近年来,功能化蒽基或萘基的芳香族有机化合物因能够通过环加成反应与 $^1\text{O}_2$ 生成内过氧化物(EPOs),并在外部热、光或化学刺激下释放捕获的 $^1\text{O}_2$,受到了广泛关注^[11-13].这些化合物不仅能作为有效的分子载体用于 $^1\text{O}_2$ 的存储与传递,而且生成的EPOs亦可作为可靠的 $^1\text{O}_2$ 生成源.然而,这些小分子通常存在无孔性和结构无定形性的问题,限制了 $^1\text{O}_2$ 的捕获速率.此外,部分EPOs在室温下不稳定,这使得获得既稳定又高效的EPOs仍然面临挑战.

晶态多孔材料因其结构有序性与功能多样性,在材料科学领域受到广泛关注^[14-16].共价有机框架(COFs)是一类新兴的晶态多孔材料,因具有高度的结晶性、明确的孔隙结构、低密度及卓越的化学稳定性,在气体传感与存储、药物传递及信息存储等领域展现出巨大的应用潜力^[17-25].此外,COFs还具备可调控设计与后合成修饰的优势,使其能够灵活引入多种功能基团,以满足不同的应用需求.目前,大多数已报道的共价有机框架为二维(2D)结构,通常呈堆叠模式(如AA堆叠).然而,由于层间强 π - π 相互作用,这种堆叠方式不可避免地降低了功能基团的可及性,使其难以与反应物充分接触,从而影响活性,进而影响其活性^[26-28].相比之下,将二维COF剥离为纳米片可显著暴露更多的活性位点,



Scheme 1 Synthesis and stimuli-responsive behavior of 2D An COF-nanosheet

(A) Schematic diagram of the synthesis of 2D An COF; (B) the exfoliation process to obtain 2D An COF-nanosheet *via* ultrasonic treatment; (C) $^1\text{O}_2$ capture and release by 2D An COF-nanosheet under light and heat stimuli.

使其成为¹O₂存储和可控释放的理想材料^[29].

本文设计并合成了一种具有高结晶性、稳定性和多孔性的二维蒽基COF(2D An COF), 并将其进一步剥离为纳米片(2D An COF-nanosheet, 见Scheme 1). 这些纳米片展现了优异的¹O₂捕获与可控释放性能. 本文研究结果充分展示了2D An COF-nanosheet在¹O₂捕获与释放中的结构优势, 为相关应用提供了新的设计思路和理论支持.

1 实验部分

1.1 试剂与仪器

4-[10-(4-氨基苯基)蒽-9-基]苯胺(APAA)、四-(4-甲酰基苯)乙烯(TBDA)和四苯基卟啉, 纯度95.0%, 北京百灵威科技有限公司; 1,4-二氧六环、均三甲苯和乙酸, 分析纯, 上海阿拉丁试剂有限公司; 丙酮和正己烷, 分析纯, 天津市大茂化学试剂公司.

Empyrean DY01610 型粉末 X 射线衍射仪(PXRD), 荷兰 PANalytical 公司; IRTracer-100 型原位傅里叶变换红外光谱仪(FTIR)、DTG-60 型差热-热重分析系统(DTA-TG)和 UV-2450 型紫外-可见分光光度计(UV-Vis), 日本 Shimadzu 公司; Autosorb-iQ3 型自动化气体吸附分析仪, 美国 Quantachrome 公司; FluoroMax-4 型荧光光谱仪(PL), 美国 Horiba Scientific 公司; SIGMA 300 型扫描电子显微镜(SEM), 德国 Carl Zeiss 公司.

1.2 实验过程

1.2.1 2D An COF 的合成 将 36.0 mg(0.1 mmol)APAA 和 22.2 mg(0.05 mmol)TBDA 混合均匀后进行研磨, 随后将混合物转移至 Pyrex 管中. 对管内进行抽真空并充氮气, 循环 3 次以排除空气, 确保反应体系处于纯氮气环境中. 接着, 加入 1.0 mL 正丁醇和 0.1 mL 6 mol/L 乙酸溶液. 将反应管迅速置于 77 K 液氮中冷冻, 并抽真空至约 20 Pa. 然后, 用甲烷与氧气的混合气体火焰密封管口, 并将反应管置于 120 °C 的烘箱中加热 3 d. 反应结束后, 通过过滤分离得到黄色沉淀物. 用丙酮(20 mL)洗涤沉淀物 3 次, 再将产物在 20 mL 正己烷中浸泡 4 h. 将过滤得到的固体置于 100 °C 烘箱中真空干燥 2 h, 最终得到黄色粉末状 2D An COF, 产率为 85%.

1.2.2 2D An COF-nanosheet 的合成 将 50 mg 2D An COF 置于 100 mL 烧瓶中, 加入 30 mL 甲醇溶液. 使用超声波处理反应混合物, 确保 COF 材料被剥离. 通过反复离心浓缩上清液得到 2D An COF-nanosheet.

1.2.3 气体吸附测试样品的预处理 用于氮气吸附测试的 2D An COF 和 2D An COF-nanosheet 样品均在 120 °C 下真空脱气处理至少 12 h(真空度 < 0.13 Pa), 以确保去除孔隙中的溶剂分子和吸附气体.

1.2.4 ¹O₂ 捕获实验 将 0.5 mg 2D An COF 或 2D An COF-nanosheet 分散在 3 mL 含 5 μmol/L TPP 的乙醇溶液中, 置于石英比色皿中. 通入氧气 15 min 以确保溶液饱和. 使用 660 nm LED 光源[中心波长(660±5) nm, 此波长常用于激发共轭光敏体系产生活性氧, 样品位置处的光功率密度为(30±2) mW/cm², 使用功率计校准, 光源距样品表面距离固定为 8 cm]进行照射. 在特定时间间隔下, 使用荧光光谱仪监测样品在蒽单元特征发射波长处的荧光强度变化(激发波长 365 nm).

1.2.5 ¹O₂ 释放实验 将捕获¹O₂后的样品(2D An COF-O 或 2D An COF-nanosheet-O)置于 100 °C 油浴中加热, 在 365 nm UV 光照射下, 监测其荧光强度的恢复.

2 结果与讨论

2.1 2D An COF 和 2D An COF-nanosheet 的结构表征

为确定 2D An COF 的晶体结构, 采用 Accelrys Materials Studio 软件包^[30]进行模拟, 结果见图 1(A). 模拟得到的 2D An COF 晶胞参数为 $a=3.75$ nm, $b=3.18$ nm, $c=0.36$ nm, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$. 通过 Pawley 精修, 实验衍射峰出现在 3.64°, 7.28° 和 10.9° 处, 分别对应于 $P\bar{4}$ 空间群中的(110), (220)和(330)晶面. 精修后的晶胞参数与模拟结果一致, 2D An COF 的 R_w 为 5.21%, R_p 为 6.77%. 此外, 根据模拟数据, 2D

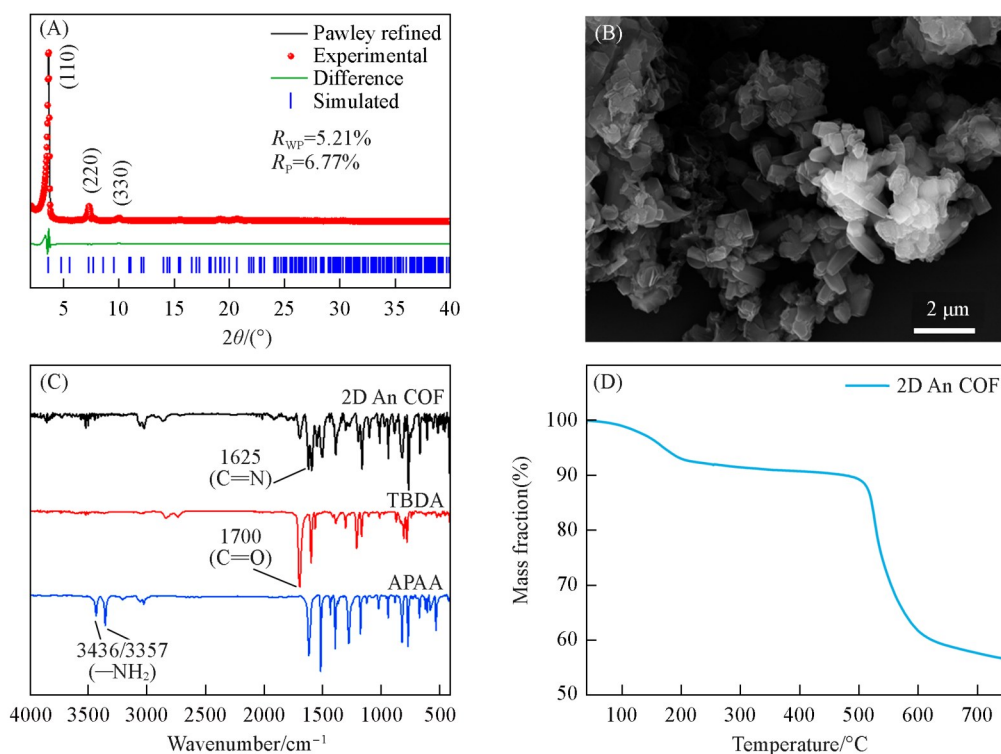


Fig. 1 PXRD pattern(A), SEM image(B), FTIR spectra(C) and TGA curve(D) of 2D An COF

An COF 的孔径为 1.9 nm, 呈四方微孔结构. 通过扫描电子显微镜(SEM)观察, 发现该 COF 呈现接近长方体的非规则形态[图 1(B)].

图 1(C)为 TBPA, APAA 和 2D An COF 的 FTIR 光谱. 在 2D An COF 的 FTIR 谱图中, TBDA 中 N—H 的伸缩振动吸收峰(3436 和 3357 cm^{-1})以及 APAA 中的 C=O 伸缩振动吸收峰(1700 cm^{-1})消失, 而出现了新的 C=N(1625 cm^{-1})伸缩振动吸收峰, 表明发生了缩合反应. 为了研究 2D An COF 的热稳定性, 在 N_2 气氛下对其进行了热重分析, 结果见图 1(D). 2D An COF 的热重曲线在 550 $^{\circ}\text{C}$ 时才出现显著的质量损失, 证明其具有良好的热稳定性.

进一步采用 77 K 下的氮气吸附-脱附测试表征 2D An COF 的比表面积和孔道结构, 结果见图 2(A). 在相对压力低于 0.05 的区域, 2D An COF 表现出急剧的吸附, 证明其具有微孔特性. 通过 Brunauer-Emmett-Teller (BET) 方程计算, 2D An COF 的比表面积为 1567 m^2/g . 利用非定域泛函理论 (NLDFT) 模型计算得 2D An COF 的微孔孔径为 1.9 nm, 与 PXRD 模拟结果相符[图 2(B)].

此外, 与 2D An COF 的晶态结构不同, 经过甲醇超声处理后, 所得 2D An COF-nanosheet 的晶体特

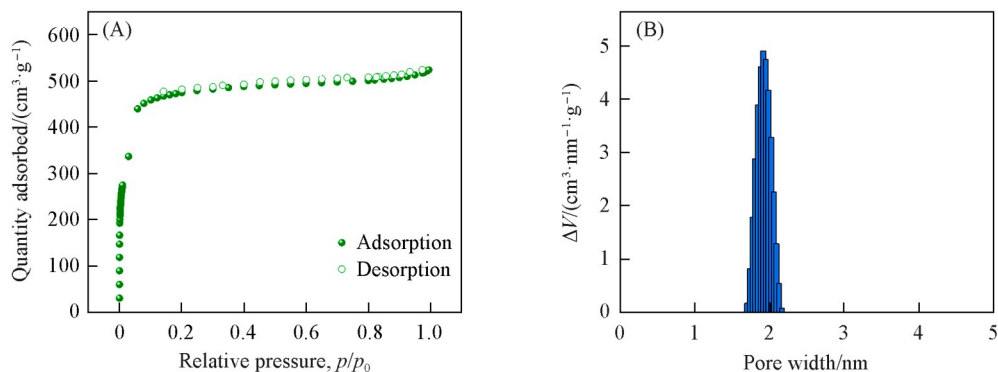


Fig. 2 N_2 adsorption-desorption isotherms of 2D An COF(A) and pore size distribution of 2D An COF derived from NLDFT analysis(B)

征几乎完全消失. 原始 COF 呈块状形貌[图 3(A)], 经超声处理后转变为片状纳米结构[图 3(B)], 表明超声剥离过程实现了结构解离. 模拟结果显示其单层厚度约为 0.36 nm[图 3(C)], 对应其典型的 π - π 堆积距离. AFM 测得的纳米片厚度为 1.91~2.11 nm, 与图 3(D)和(E)]相对应, 推算所得纳米片大致由 6 层 COF 构成. 2D An COF-nanosheet 的 PXRD 谱图中几乎无明显衍射峰[图 3(F)], 说明其长程有序性已大幅降低. 此外, 激光照射纳米片分散液时可观察到显著的丁达尔效应[图 3(F)插图], 进一步验证了其良好的分散性和纳米尺寸. 相比于块体 2D An COF, 2D An COF-nanosheet 的氮气吸附量显著下降[图 3(G)], 表明其孔容减小, 也从侧面印证了晶体结构的破坏与堆积的松散化.

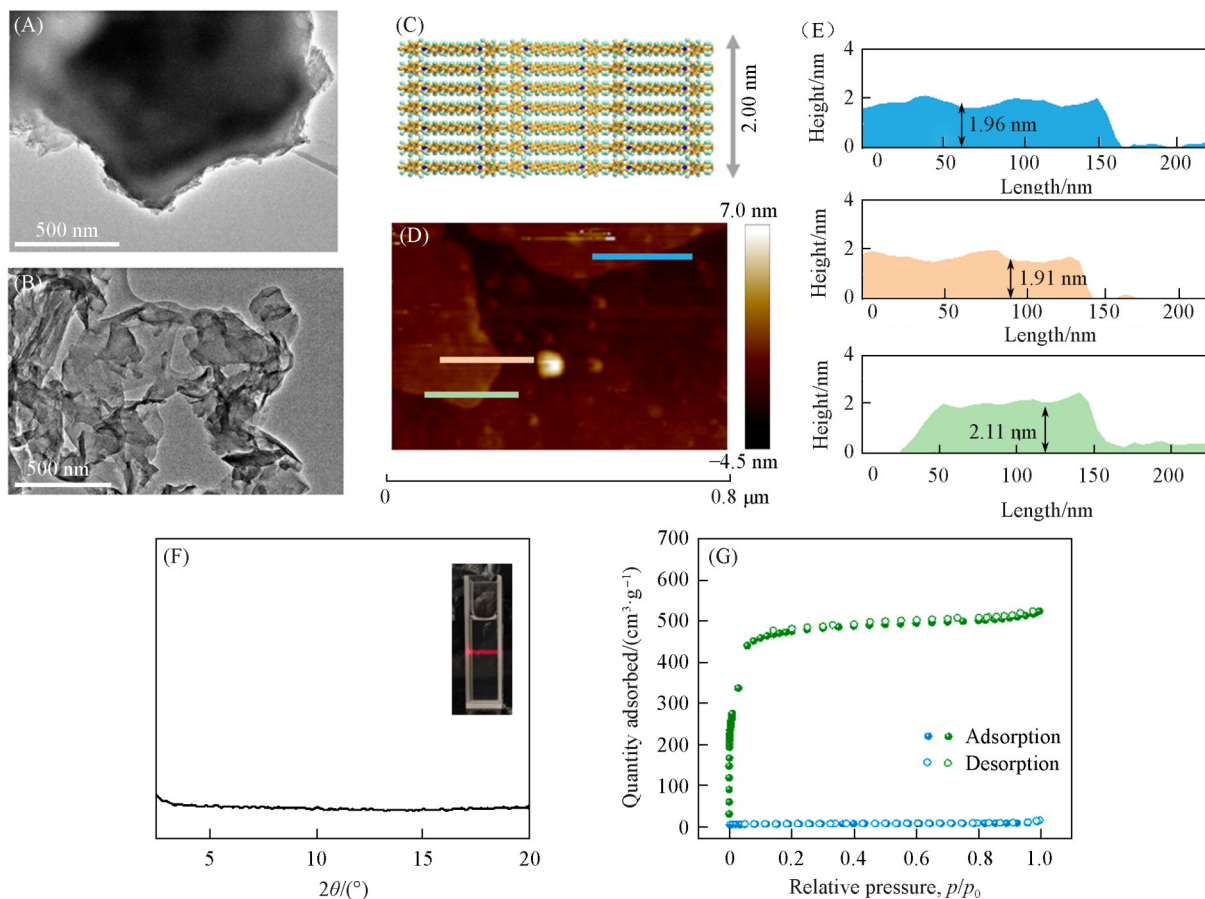


Fig. 3 Structural characterization of 2D An COF and 2D An COF-nanosheet

(A, B) TEM images of bulk 2D An COF(A) and exfoliated 2D An COF nanosheet(B); (C) simulated stacking model of 2D An COF, where the total thickness of a six-layer stack is *ca.* 2.00 nm (corresponding to an interlayer distance of *ca.* 0.36 nm per layer); (D) AFM height image of 2D An COF nanosheet; (E) height profiles along the colored lines in (D), showing nanosheet thicknesses of 1.96, 1.91 and 2.11 nm, consistent a six-layer 2D AnCoF stacking; (F) PXRD pattern of 2D An COF nanosheet accompanied by a photograph of the sample; (G) N₂ adsorption-desorption isotherms of bulk 2D An COF(green) and 2D An COF-nanosheet(blue), revealing enhanced surface area after exfoliation.

2.2 2D An COF 和 2D An COF-nanosheet 的 ¹O₂ 捕获与释放性能

四苯基卟啉(TPP)在 660 nm 处具有最大吸收(Q带), 该波长可高效激发 TPP 产生 ¹O₂^[12,31]. 实验中将 2D An COF 和 2D An COF-nanosheet 分别分散在乙醇中, 并加入 TPP, 随后用波长 660 nm 的光照射, 通过 [4 + 2] 环加成反应得到 2D An COF-O 和 2D An COF-nanosheet-O (表示 COF 与 ¹O₂ 结合后的产物)[图 4(A)]. 为了验证 ¹O₂ 的捕获过程, 通过荧光分析监测了氧化反应. 结果表明, 随着照射时间的延长, 2D An COF 和 2D An COF-nanosheet 的荧光强度逐渐减弱, 表明 2D An COF 和 2D An COF-nanosheet 与 ¹O₂ 结合形成了 2D An COF-O[图 4(B)]和 2D An COF-nanosheet-O[图 4(D)]. 这一过程是可逆的, 加热至 100 °C 后环加成结构逐步断裂, 恢复蒽单元的共轭结构, 从而导致荧光信号显著回升[图 4(C)和

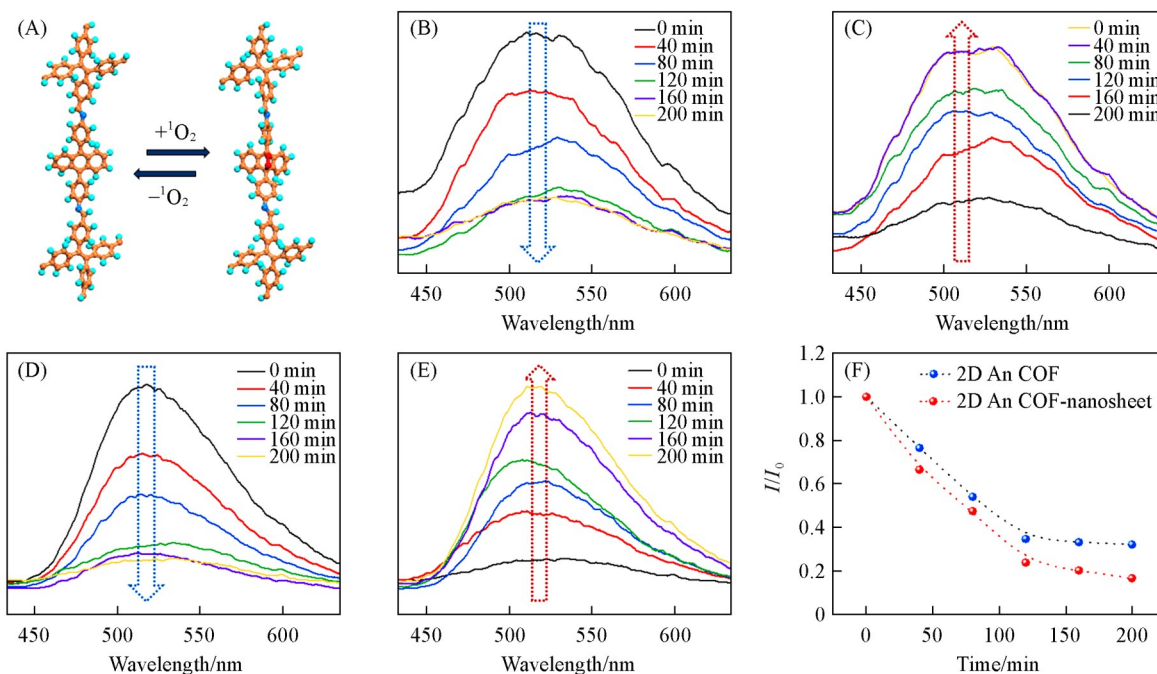


Fig. 4 Photo-oxidation behavior and reversible conversion of 2D An COF and 2D An COF-nanosheets

(A) Ball-and-stick representation illustrating the reversible [4+2] cycloaddition between anthracene units and singlet oxygen ($^1\text{O}_2$), forming 2D An COF-O (carbon in orange, oxygen in red, nitrogen in blue, hydrogen in cyan); (B) time-dependent fluorescence quenching of 2D An COF during $^1\text{O}_2$ capture under 660 nm irradiation; (C) fluorescence recovery of 2D An COF-O during thermal cycloreversion at 100 °C; (D) time-dependent fluorescence quenching of 2D An COF-nanosheets during $^1\text{O}_2$ capture under 660 nm irradiation; (E) fluorescence recovery of 2D An COF-nanosheet-O during thermal cycloreversion at 100 °C; (F) normalized fluorescence intensity (I/I_0) showing the faster $^1\text{O}_2$ capture kinetics of 2D An COF-nanosheets compared with 2D An COF.

(E)]. 为了进一步比较 COF 与纳米片的 $^1\text{O}_2$ 捕获速率, 将实时荧光强度与初始荧光强度进行归一化处理以分析荧光光谱[图 4(F)]. 结果表明, 2D An COF-nanosheet 表现出比 2D An COF 更高的 $^1\text{O}_2$ 捕获速率. 该现象可归因于 2D An COF-nanosheet 暴露出更多的蒽活性位点, 同时超薄纳米片结构大大降低了传质阻力^[32,33], 从而显著提高了 $^1\text{O}_2$ 的捕获效率. 并且该过程至少可重复 3 次而 $^1\text{O}_2$ 捕获效率不显著衰减 [图 5(A) 和 (B)], 反映出 COF 框架在反复的环加成与断裂过程中保持了较好的结构稳定性与反应活性.

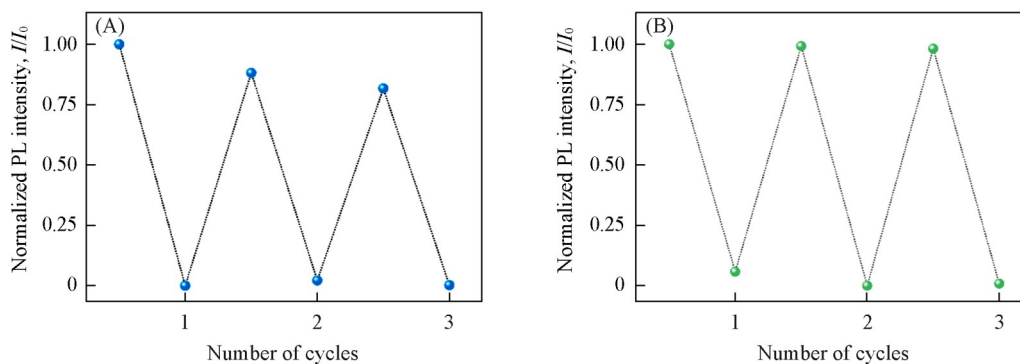


Fig. 5 Cyclic photo-oxidation and photo-reduction behavior of 2D An COF(A) and 2D An COF-nanosheet(B)

3 结 论

设计并合成了基于蒽基的二维共价有机框架(2D An COF)及其纳米片(2D An COF-nanosheet), 并实现了单线态氧($^1\text{O}_2$)的快速捕获与可控释放. 结构表征和实验结果表明, 2D An COF-nanosheet 展现出比 2D An COF 更高的 $^1\text{O}_2$ 捕获速率, 这归因于纳米片暴露了更多的活性位点. 结果表明, 在 660 nm 光照射

下, 2D An COF 及其纳米片能够高效捕获 $^1\text{O}_2$, 并在外部热或光刺激下可逆释放 $^1\text{O}_2$, 且表现出良好的稳定性和重复性. 该研究为基于二维共价有机框架的 $^1\text{O}_2$ 存储与释放材料提供了新的设计思路, 并为其在光动力疗法和光催化等领域的应用奠定了理论基础.

参 考 文 献

- [1] Fudickar W., Fery A., Linker T., *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, *127*, 9386—9387
- [2] Fujimura M., Kusaka S., Masuda A., Hori A., Hijikata Y., Pirillo J., Ma Y., Matsuda R., *Small*, **2021**, *17*, e2004351
- [3] Kim S., Tachikawa T., Fujitsuka M., Majima T., *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, *136*, 11707—11715
- [4] Lai H., Yan J., Liu S., Yang Q., Xin F., Xiao P., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, *59*, 10431—10435
- [5] Li X., Zhang G., Ma H., Zhang D., Li J., Zhu D., *J. Am. Chem. Soc.*, **2004**, *126*, 11543—11548
- [6] Liu K., Lalancette R. A., Jakle F., *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 18170—18173
- [7] Mongin C., Ardoy A. M., Mereau R., Bassani D. M., Bibal B., *Chem. Sci.*, **2020**, *11*, 1478—1484
- [8] Omoto K., Tashiro S., Shionoya M., *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, *143*, 5406—5412
- [9] You Y., *Org. Biomol. Chem.*, **2018**, *16*, 4044—4060
- [10] Ogilby C. S., *Chem. Soc. Rev.*, **2010**, *39*, 3181—3209
- [11] Martinez G. R., Ravanat J. L., Medeiros M. H. G., Cadet J., Di Mascio P., *J. Am. Chem. Soc.*, **2000**, *122*, 10212—10213
- [12] Zeng J. Y., Wang X. S., Qi Y. D., Yu Y., Zeng X., Zhang X. Z., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, *58*, 5692—5696
- [13] He Y. Q., Fudickar W., Tang J. H., Wang W. H., Li X., Han J., Wang Z., Liu M., Zhong Y. W., Linker T., Stang P. J., *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, *142*, 2601—2608
- [14] Chang S., Li C., Li H., Zhu L., Fang Q., *Chem. Res. Chinese Universities*, **2022**, *38*(2), 396—401
- [15] Song J., Wang Z., Liu Y., Tuo C., Wang Y., Fang Q., Qiu S., *Chem. Res. Chinese Universities*, **2022**, *38*(3), 834—837
- [16] Wang H., Zeng Z., Xu P., Li L., Zeng G., Xiao R., Tang Z., Huang D., Tang L., Lai C., Jiang D., Liu Y., Yi H., Qin L., Ye S., Ren X., Tang W., *Chem. Soc. Rev.*, **2019**, *48*, 488—516
- [17] Wang Z. T., Li H., Yan S. C., Fang Q. R., *Acta Chim. Sinica*, **2020**, *78*, 63—68(王志涛, 李辉, 颜士臣, 方千荣. 化学学报, **2020**, *78*, 63—68)
- [18] Dong W., Qin Z., Liu X., Li L., *Chin. J. Chem.*, **2025**, *43*, 1504—1512
- [19] Fang J., Zhao W. J., Zhang M. H., Fang Q. R., *Acta Chim. Sinica*, **2021**, *79*, 186—191(方婧, 赵文娟, 张明浩, 方千荣. 化学学报, **2021**, *79*, 186—191)
- [20] Kong X. Y., Liao L., Lu C. Z., Fang Q. R., *Chem. J. Chinese Universities*, **2023**, *44*(12), 20230282(孔祥宇, 廖力, 卢灿忠, 方千荣. 高等学校化学学报, **2023**, *44*(12), 20230282)
- [21] Li S. S., Zhao W. J., Li H., Fang Q. R., *Chem. J. Chinese Universities*, **2020**, *41*(6), 1384—1390(李闪闪, 赵文娟, 李辉, 方千荣. 高等学校化学学报, **2020**, *41*(6), 1384—1390)
- [22] Luo, X., Chen Y., Lin J., Luo J., Xia R., Yin N., Lin Y., Duan H., Ren S., Gao Q., Ning G., Li D., *Chin. J. Chem.*, **2025**, *43*, 1199—1207
- [23] Luo Y., Li B., Wang W., Wu K., Tan B., *Adv. Mater.*, **2012**, *24*, 5703—5707
- [24] Demessence A., Alessandro D. M. D., Foo M. L., Long J. R., *J. Am. Chem. Soc.*, **2009**, *131*, 8784—8786
- [25] Lu W., Yuan D., Sculley J., Zhao D., Krishna R., Zhou H., *J. Am. Chem. Soc.*, **2011**, *133*, 18126—18129
- [26] Rao M. R., Fang Y., Feyter S. D., Perepichka D. F., *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 2421—2427
- [27] Feng X., Ding X., Jiang D., *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, *41*, 6010—6022
- [28] Tao H., Ji C., Zhang J., Yin Y., Jia W., Jiang X., Xu J., Yang Y., *Chem. Res. Chinese Universities*, **2024**, *40*(3), 499—507
- [29] Liu Y., Ren J., Wang Y., Zhu X., Guan X., Wang Z., Zhou Y., Zhu L., Qiu S., Xiao S., Fang Q., *CCS Chem.*, **2022**, *5*, 2033—2045
- [30] Accelrys Inc., Materials Studio, Version 7.0, San Diego, **2013**.
- [31] Zhen W., Kang D. W., Fan Y., *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, *146*, 16609—16618
- [32] Peng Y., Li Y., Ban Y., Jin H., Jiao W., Liu X., Yang W., *Science*, **2014**, *346*, 1356—1359
- [33] Zhao M., Huang Y., Peng Y., Huang Z., Ma Q., Zhang H., *Chem. Soc. Rev.*, **2018**, *47*, 6267—6295

(Ed.: H, K, M)