

我校研究生科研成果入选国际知名期刊 **Inorganic Chemistry Frontiers** 热点文章



From the journal:
Inorganic Chemistry Frontiers

Kernel-Differentiated Fusion Strategy Redefines Critical Size Thresholds in Giant Twinned-FCC RS-AuNCs: Unlocking Size Adaptability and Birth of Metallicity



[Youqiong Fang](#), [Pu Wang](#), [Yong Pei](#) and [lin xiong](#)

近日，我校研究生方友琼在国际知名期刊《Inorganic Chemistry Frontiers》（《无机化学前沿》）以第一作者身份发表题为“Kernel-Differentiated Fusion Strategy Redefines Critical Size Thresholds in Giant Twinned-FCC RS-AuNCs: Unlocking Size Adaptability and Birth of Metallicity（内核差异化融合策略重新定义了孪晶面心立方结构的大型 RS-AuNCs 的临界尺寸阈值：解锁尺寸适应性与金属态的诞生）”的学术论文，并被该期刊选为 2025 年热点论文。导师为熊琳博士。

硫醇保护的金属纳米团簇（RS-AuNCs）因结构精确可调成为研究结构-性能关系的理想体系，其中 FCC 构型团簇因与金晶体同源而备受关注。然而，大尺寸 FCC 团簇（92-279 原子）的稀缺（仅 Au₁₄₆、Au₁₉₁ 和 Au₂₇₉ 三例）限制了对其实演化规律研究。理论显示，在 102-144 原子范围内，Dh/Ih 构型比 FCC 构型能量更低，引发对 FCC 构型-尺寸敏感性的

质疑。

为此，课题组设计出能量与 Dh 构型相当的孪晶 FCC 团簇 Au₁₂₇(SR)₄₈，突破了该尺寸区间 FCC 结构难稳定的认知。通过内核差异化融合策略，构建了 Au₂₀、Au₂₄ 和 Au₂₆ 新型金核，并进一步建立了大尺寸孪晶 FCC 团簇（Au₁₆₄、Au₁₈₂ 和 Au₁₈₈）。这些团簇表现出优异的结构稳定性，且其 HOMO-LUMO 能隙衰减趋势与常规立方体 FCC 团簇不同，揭示了金原子排列方式对电子结构的重要影响。此外，Au₁₈₂ 和 Au₁₈₈ 的紫外可见吸收光谱出现 SPR 峰，刷新了孪晶 FCC 结构呈现金属性的尺寸下限。该研究填补了大尺寸 FCC 团簇的结构空白，为探索 RS-AuNCs 的结构-性能关系提供了新思路。

（熊琳）



方友琼，邵阳学院在读硕士研究生。研究方向为中、大尺寸硫醇配体保护金团簇的结构和电子结构规律性的理论研究，目前以第一作者身份在 *The Journal of Physical Chemistry Letters*、*Nanoscale*、*Inorganic Chemistry Frontiers* 和 *Chemical Communications* 期刊上发表 SCI 类论文 4 篇。



熊琳，邵阳学院专任教师，硕士生导师，湖南省青年骨干教师。2014 年获湘潭大学学士学位，2020 年于湘潭大学获得博士学位（导师：裴勇教授），2021 年入职邵阳学院食品与化学工程学院。先后获得国家自然科学基金和湖南省自然科学基金资助，主要从事贵金属纳米团簇结构和性质的理论研究。在 *JACS*、*ACIE*、*Chem. Sci.*、*JPCL*、*Nanoscale*、*Inorg. Chem. Front.*、*Chem. Commun.* 等杂志发表 30 余篇 SCI 论文。