

安徽省科学技术奖提名项目公示内容

(自然科学奖, 2025 年度)

一、项目名称

动态热点增强拉曼光谱分析方法

二、提名者及提名意见

提名者: 中国科学院合肥物质科学研究院

提名意见: (600 字以内)

该项目系统地构建了从纳米结构单元设计、分子捕获原理到通用检测方法的研究体系。在动态高密度热点纳米结构调控方面, 针对传统热点工程多局限于零维点状、一维线性或二维平面结构的问题, 提出了二维单层与多层、三维动态高密度热点矩阵的调控策略, 形成了层间和层内双重高密度热点。在分子捕获原理方面, 克服了传统 SERS 检测中目标分子依赖被动扩散进入热点的局限, 提出了纳米毛细效应、纳米蒸腾效应和势阱效应捕获诱导目标分子进入三维矩阵热点结构的模型。在检测方法层面, 建立了从湿态到干态全过程的动态检测方法, 为痕量物质的超灵敏检测提供了新的分析方法。项目的科学价值在于提出了纳米毛细效应和蒸腾效应, 揭示了溶剂在纳米间隙中的定向运输机制, 势阱效应阐明了三维空间中粒子间范德华力与静电力的协同捕获原理。这些发现不仅为 SERS 热点工程提供了新的理论模型, 也为理解纳米限域空间内的分子行为提供了重要的理论支撑。

项目相关成果发表在 J. Am. Chem. Soc. 等国际顶级期刊, 所建立的通用检测方法已应用于社会安全、生物医学领域中多类痕量目标物的检测, 显示出广泛的学科认可度。该项目共发表高水平 SCI 论文 30 余篇, 第一完成人唯一署名撰写《表面增强拉曼光谱检测方法》专著 1 部。该项目为 SERS 基础研究提供了关键理论支撑, 有望推动分析化学、纳米技术和生物医学检测等学科的交叉融合发展。

同意提名该项目作为 2025 年安徽省自然科学奖候选项目。

三、项目简介

项目属于分析化学，涉及公共安全领域的痕量物质的动态增强光谱的鉴别方法。

表面增强拉曼光谱(SERS)，具有快速、灵敏和指纹特性。在实际发展过程中遇到了瓶颈：缺乏目标分子高效进入高密度热点纳米结构的调控策略；缺失高密度热点纳米结构抓捕目标分子的效应原理；以及缺少通用性的高灵敏与超稳定的检测方法。项目在国家重大科学仪器设备开发专项支持下，突破了瓶颈，提出并建立系统的动态热点增强拉曼光谱分析方法，在公共安全等多个领域发挥了重要作用。主要发现如下：

第一、提出了不同维度动态高密度热点纳米结构的调控策略，发展了超强的等离激元增强效应。（1）利用溶剂蒸发诱导的纳米粒子自组装策略，形成了二维单层无处不在的动态高密度热点；（2）利用界面自组装构筑紧密堆积的多层纳米膜策略，组装了兼具层间小间隙热点和层内小间隙热点互通网络状高密度热点结构；（3）利用液体毛细力与纳米颗粒间排斥力的动态平衡调控策略，构筑了等离激元热点数量极大增加和热点效率极大提高的三维空间热点结构。

第二、发现了不同维度热点结构动态诱捕目标物分子的原理，建立了增强场与分子一体化关系。（1）随着单层自组装膜由曲面转变为平面，纳米毛细效应促使间隙形成无处不在的热点，同时驱动目标分子必然进入其中；（2）逐层叠加界面组装方法制备多层纵横交错互通的纳米网络结构，纳米蒸腾效应驱动目标分子主动进入高密度热点结构；（3）随着纳米溶胶和目标分子混合体系中溶剂蒸发，纳米势阱效应促使三维空间的等离激元热点高效捕获痕量目标分子。

第三、开发了兼具高灵敏与超稳定的通用性动态检测方法，实现了痕量目标物便捷性分类识别。（1）将单层膜覆盖在痕量残留的器物表面上，随着溶剂的挥发，目标分子必然通过纳米间隙，从而实现动态高灵敏高稳定的普适性检测；（2）对于不容破坏或不易取样的样品，采用滴加了混合溶剂的多层膜基底进行测试，从而实现取样和高灵敏高稳定检测；（3）对于痕量固体或液体样品，将其与贵金属纳米溶胶混合，随着溶剂的挥发，实现对目标物的高效分类识别和鉴别。

四、代表性论文专著目录

序号	论文（专著）名称/刊名/作者	年卷页码（xx年x卷x页）	发表时间年月日	通讯作者（含共同）	第一作者（含共同）	国内作者	论文署名单位是否包含国外单位
1	General Surface-Enhanced Raman Spectroscopy Method for Actively Capturing Target Molecules in Small Gaps /Journal of the American Chemical Society/ Meihong Ge, Pan Li, Guoliang Zhou, Siyu Chen, Wei Han, Feng Qin, Yuman Nie, Yaoxiong Wang, Miao Qin, Guangyao Huang, Shaofei Li, Yongtao Wang, Liangbao Yang,* and Zhongqun Tian	2021 年 143 卷 7769-7776 页	2021 年 5 月 26 日	Liangbao Yang	Mei hong Ge	葛美红、李盼、周国良、陈思雨、韩伟、秦凤、聂余满、王耀雄、秦苗、黄光耀、李绍飞、汪永韬、杨良保、田中群	否
2	Detection and Direct Readout of Drugs in Human Urine Using Dynamic Surface-Enhanced Raman Spectroscopy and Support Vector Machines /Analytical Chemistry /Ronglu Dong, Shizhuang Weng, Liangbao Yang,* and Jinhuai Liu	2015 年 87 卷 2937-2944 页	2015 年 3 月 3 日	Liangbao Yang	Ronglu Dong	董荣录、翁士状、杨良保、刘锦淮	否
3	A novel paper rag as 'D-SERS' substrate for detection of pesticide residues at various peels/Talanta/ Yiqun Zhu, Minqiang Li, Daoyang Yu*, Liangbao Yang*	2014 年 128 卷 117-124 页	2014 年 10 月 1 日	Liangbao Yang; Daoyang Yu	Yiqun Zhu	朱逸群、李民强、余道洋、杨良保	否
4	Sea-urchin-like Fe ₃ O ₄ @C@Ag particles: an efficient SERS substrate for detection of organic pollutants/Nanoscale/ Yingjie Ye, Jin Chen, Qianqian Ding, Dongyue Lin, Ronglu Dong, Liangbao Yang*, Jinhuai Liu*	2013 年 5 卷 5887-5895 页	2013 年 4 月 23 日	Liangbao Yang; Jinhuai Liu	Yingjie Ye	叶英杰、陈晋、丁倩倩、林东岳、董荣录、杨良保、刘锦淮	否

5	Optimal Hotspots of Dynamic Surfaced-Enhanced Raman Spectroscopy for Drugs Quantitative Detection/Analytical Chemistry/ Xiunan Yan, Pan Li, Binbin Zhou, Xianghu Tang, Xiaoyun Li, Shizhuang Weng, Liangbao Yang*, Jinhuai Liu	2017 年 89 卷 4875-4881 页	2017 年 5 月 2 日	Liangbao Yang	Xiunan Yan	晏秀男、李盼、周彬斌、唐祥虎、李小芸、翁士状、杨良保、刘锦淮	否
---	--	-------------------------	----------------	---------------	------------	--------------------------------	---

五、主要完成人（按完成人顺序排列）

杨良保、董荣录、李盼、林东岳

六、主要完成单位（按完成单位顺序排列）

中国科学院合肥物质科学研究院

七、论证专家

姓名	工作单位	职称	专业领域
孟国文	中国科学院 合肥物质科学研究院	研究员	纳米材料
郁 杰	中国科学院 合肥物质科学研究院	研究员	材料科学
尤业宇	中国科学技术大学	教授	纳米材料
朱满洲	安徽大学	教授	材料化学
孟宪伟	合肥工业大学	教授	数据分析