福建物构所等在氢键有机框架材料研究中取得新进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/10134.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

有机分子通过分子间氢键相互连接，同时在π-π堆积等其他分子间相互力的协同作用下组装而成的晶态材料称为氢键有机框架材料(Hydrogen-bonded Organic Frameworks，简称HOFs)。这种材料具有结晶度高、比表面积大、合成条件温和、溶剂可加工性强等独特的优点，目前已经在多个领域表现出应用潜力。HOFs的结构取决于初始的构筑基元(或者配体分子)，而构筑基元主要包括两部分，氢键作用位点以及分子主干架，改变任一部分都有可能引起最终结构的变化。因此，了解骨架的几何结构以及氢键相互作用对最终结构的影响，对于揭示自组装规律，实现HOF结构的合理设计具有重要意义。

在国家自然科学基金项目、中国科学院战略性先导科技专项的资助下，中科院福建物质结构研究所结构化学国家重点实验室刘天赋课题组与米兰大学教授Davide M. Proserpio及广东佛山技术学

$_3$TATB和非平面分子H_3
BTB来进行自组装的研究。作者使用H_3
TATB在不同的溶剂条件下成功合成了三种HOFs材料PFC-11，PFC-12和PFC-13。三个结构中，相邻的H_3
TATB分子之间通过双氢键相互连接，形成规则的六边形蜂窝网格(hcb)，网格在形成和扩展的过

$_3$TATB分子非常相似但非平面的H_3
BTB通过自组装也形成了六边形蜂窝状网格，但其最终延展得到的是不具备任何波动性的平面层倾斜互穿的结构(HOF-BTB)。在研究的过程中，作者捕捉到了这种配体的轻微扭转所产生的颠覆性结构变化并从结构角度进行深入研究，发现了二维层状结构中的褶皱(或者波浪起伏)以及穿插可以提高分子堆积密度并降低自由能，从而实现结构的稳定。

尽管PFC-11、PFC-12和PFC-13高度穿插，但三个材料仍然保留了容纳客体分子的空间，同时独特的交织结构还赋予了材料一定的灵活性，PFC-11和PFC-12在氮气吸附过程中表现出独特的呼吸效应。此外，PFC-11对CO_2
表现出优异的吸附能力。同时，得益于孔道的尺寸效应以及孔道壁面的结构特点，PFC-11和PFC-12对与之孔道尺寸相当的有机污染物苯、甲苯和环己烷蒸汽也表现出良好的吸附性能，并且对

分子尺寸最为匹配且具有共轭效应的苯蒸汽具有良好的选择吸附性。相关结果发表在《美国化学会志》上（*J.Am.Chem.Soc.* 2020,142, 15,7218-7224），刘天赋课题组的研究实习员李玉麟为该文章的第一作者。

该研究工作展示了配体几何构型的微小变化所引发的结构和性能的巨大变化，同时还发现了超分子自组装过程中二维层片段利用褶皱和互锁稳定结构的现象，为理解HOFs的自组装规律以及结构性能关系提供了参考。

文章链接

研究团队单位：福建物质结构研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发