

金属有机框架脱水诱导簇固结用于筛分己烷异构体

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/27936.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！

金属有机框架脱水诱导簇固结用于筛分己烷异构体。近日，暨南大学化学与材料学院教授陆伟刚、李丹团队利用金属有机框架单晶到单晶转变有趣的固态相变过程，报道了一种新型的金属有机框架材料，实现了在大孔相和窄孔相之间可逆的单晶到单晶结构转变。相关成果发表于《德国应用化学》，并被编辑选为热点论文。

研究人员通过溶剂热反应合成了一例新型的金属有机框架材料（JNU-80）。该材料能够在大孔相和窄孔相之间可逆转变。大孔相中两个相邻的四配位单锌节点上的配位水分子在加热条件下会被脱除，进而相邻的两个单锌节点巩固成一个六配位双锌簇，这一过程导致窄孔相沿c轴方向的一维通道收缩。此外，将窄孔相浸泡在含有少量水的甲醇溶液中24小时后，其结构能够转变回到大孔相。

大孔相和窄孔相的77 K氮气吸脱附曲线均为典型的I型微孔吸附等温线。基于Horvath-Kawazoe模型的孔径分布分析结果显示，大孔相和窄孔相的主要孔径分别是6.4和5.3 nm。气相吸附动力学研究表明，大孔相对正己烷（nHEX），2-甲基戊烷（2MP）和2, 2-二甲基丁烷（22DMB）均表现出相对较快的吸附。相比之下，窄孔相因其孔径的限制几乎不吸附22DMB，而对nHEX和2MP表现出高吸附量。298 K下的蒸汽和液相吸附等温线进一步证实了窄孔相可以选择性地吸附nHEX和2MP，而完全不吸附22DMB。

密度泛函理论对己烷异构体扩散到通道中能垒计算结果表明，nHEX和2MP的能垒分别为17.1 kJ/mol和48.6 kJ/mol，表明它们能够快速扩散到通道中。相比之下，22DMB的能垒高达248.7 kJ/mol，表明22DMB在通道中的扩散极其困难。这与实验吸附数据一致，进一步证实了窄孔相能够通过尺寸排阻机制筛分双支链己烷异构体。

为了实际应用考虑，研究人员制备了金属有机框架聚合物复合材料，并探究了其在室温下从22DMB/2MP/nHEX三元混合物中一步纯化22DMB的能力。研究表明，该材料可以高效地移除己烷混合物中的nHEX和2MP，通过简单的液相吸附即可获得高纯度的22DMB。在连续十次液相吸附循环中，22DMB的纯度均可达99.5%，回收率接近90%。

吸附剂的化学稳定性是实际应用中需要评价的关键指标之一。金属有机框架聚合物复合材料浸泡在己烷中90天或在连续十次液相吸附循环后仍能保持较高的结晶度和结构完整性，证明其可回收性和可重复使用性。

该研究成果报道了一例具有独特动态相变行为的锌基金属有机框架，通过脱水诱导的簇固结导致通道收缩，成功实现了对单支链/双支链己烷异构体的筛分。这项工作强调了动态固态相变在具

有挑战性的分离过程中的重要性，为开发具有动态行为的金属有机框架及其在非热驱动分离技术中的应用提供了新思路。（来源：中国科学报朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.202403209>

作者：陆伟刚等 来源：《德国应用化学》

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](https://www.iikx.com)转发