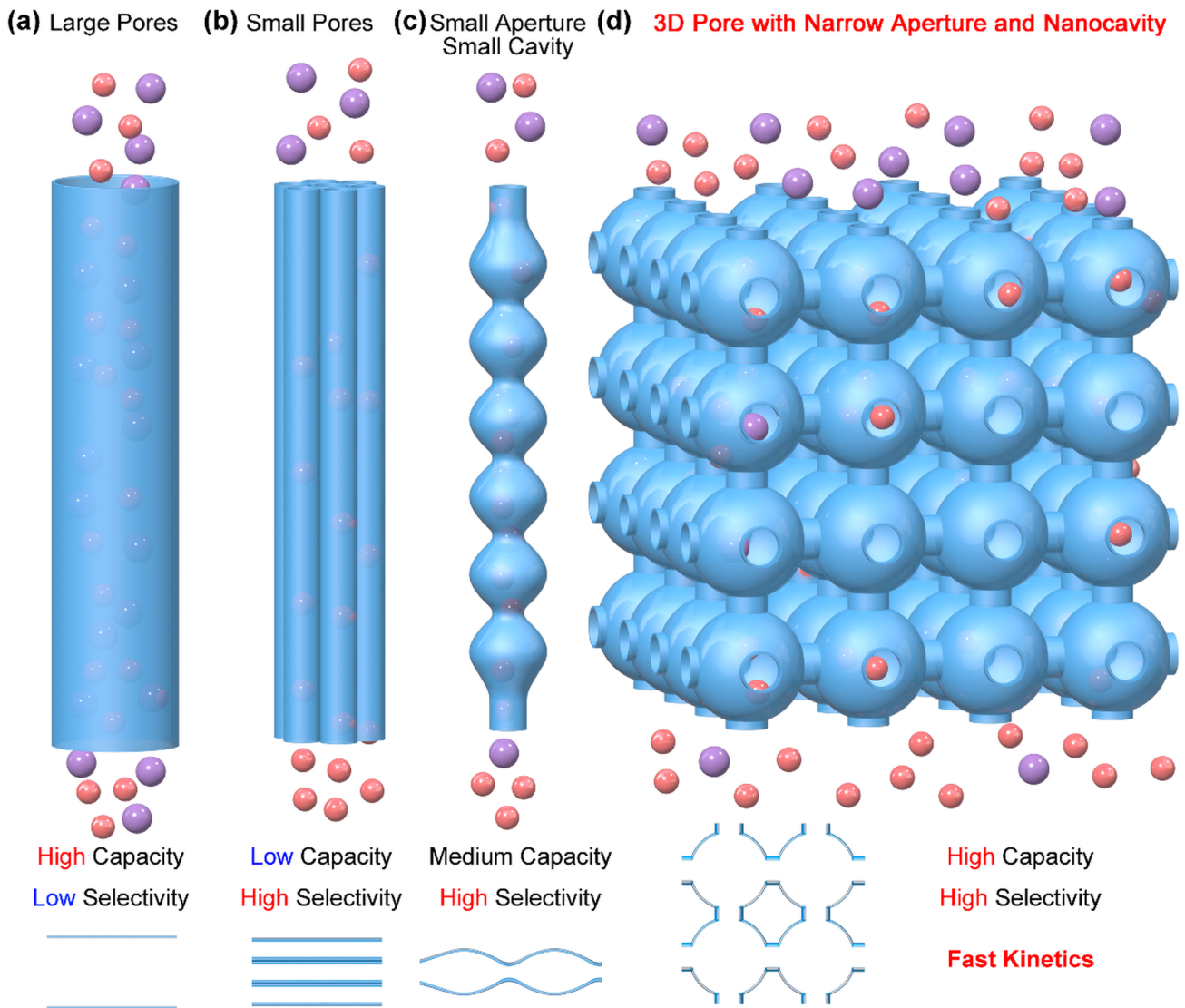

研究发现三维互连腔体与限域孔径协同实现丙烯高效分离

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/33662.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！

研究发现三维互连腔体与限域孔径协同实现丙烯高效分离。近日，华南师范大学化学学院教授严勇/兰亚乾团队同合作者，在国家自然科学基金等项目的资助下，系统提出并验证了一种基于三维互连纳米腔体与限域孔颈协同调控吸附动力学的新策略，实现了对工业上关键但难以高效分离的C₃H₆/C₃H₈气体体系的精准分离。相关成果发表于《美国化学会志》（JACS）。



多孔材料中孔道结构调控的分离机制示意图。(a) 大孔：容量高，选择性低；(b) 分子筛：选择性高，容量低，动力学慢；(c) 小孔连接腔体：提升容量，保持高选择性；(d) 扩大腔体、限制孔口：兼顾高容量、高选择性和快速扩散。研究团队供图

?

在石化产业中，丙烯/丙烷分离是一个典型的能耗高、难度大的过程。由于两者沸点极其接近（仅相差6K），传统低温精馏法面临巨大的能耗压力。开发新型吸附分离材料，是解决该问题的重要方向。金属有机框架作为一类结构可调的多孔晶体材料，近年来被广泛应用于气体分离领域。然而，传统金属有机框架常常在吸附容量、选择性和扩散效率三者之间存在性能折衷的问题。

针对这一挑战，研究团队设计并合成了一个以弱Lewis碱配体Pz4Bim与Ni²⁺构筑的金属有机骨架材料NiPz4Bim，构建出具有三维互连大型纳米腔体与限域小孔径协同结构。该结构实现了分子筛分与高速扩散的有机结合，有效打破了热力学选择性与动力学扩散效率之间的权衡。实验结果表明，该材料在298 K、1 bar下对丙烯的吸附量高达3.24 mmol/g，优于多数基于动力学分离的MOF材料，IAST选择性为2.42，动力学选择性高达51.96。

为深入理解主客体相互作用机制，研究结合中子粉末衍射、Grand Canonical Monte Carlo模拟与密度泛函理论计算，精确揭示了丙烯在孔颈区域的 π - π 作用与范德华力为主导的吸附机制，而丙烷则主要依赖较弱的分子间作用滞留于腔体内部。这一结构-功能调控策略在实现高效丙烯分离的同时，为设计新型金属有机骨架材料基气体分离材料提供了可推广的理论依据与实验路径。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c03677>

作者：严勇等 来源：《美国化学会志》

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](http://www.iikx.com)转发