

# 缺陷与金属位点双调控：UiO-67实现氨气吸附精准调节

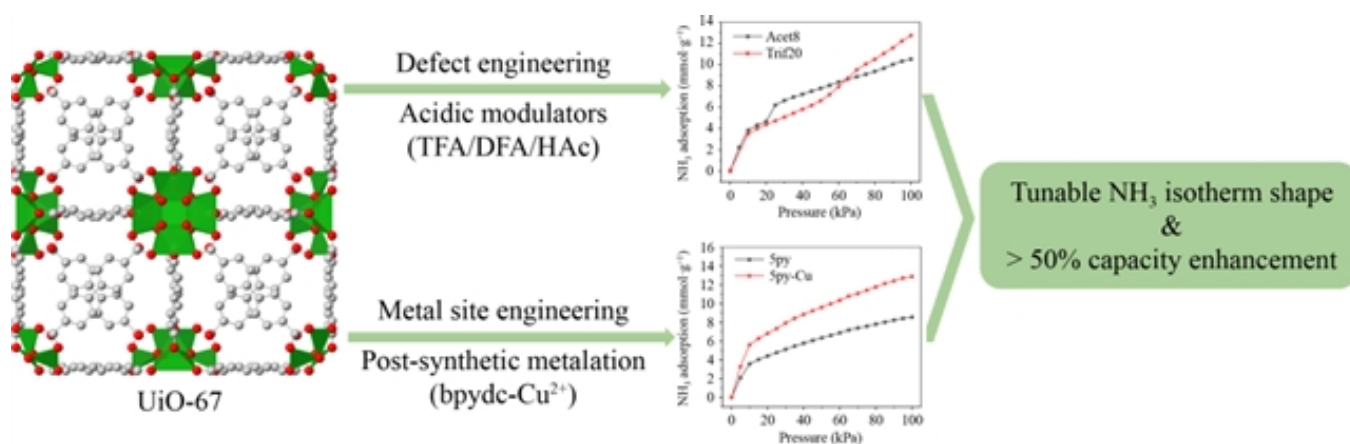
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40088.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！

缺陷与金属位点双调控：UiO-67实现氨气吸附精准调节。 研究背景

金属有机框架（MOFs）中的锆基UiO-67因超高稳定性和结构可调控性成为研究热点，然而如何系统调控其氨吸附性能仍是挑战。近日，苏州大学赵朴团队在ENG. Chem. Eng.发文，提出了缺陷工程与金属位点工程互补策略，可实现UiO-67氨吸附形状与容量的独立调控。缺陷工程可实现缺陷密度近10倍可调，获得阶梯型可调节NH<sub>3</sub>吸附等温线；铜功能化使最优样品吸附量提升超50%。研究系统地表征了材料结构演变，建立了结构与吸附性能的构效关系，证实缺陷调控与金属位点引入是设计面向特定应用的NH<sub>3</sub>吸附MOF材料的有效和互补手段。



研究内容

本研究构建了缺陷调控与金属负载两大研究框架，核心策略如下：

1. 缺陷工程体系：选用三种单羧酸调节剂——乙酸（pKa 4.76）、二氟乙酸（pKa 1.34）和三氟乙酸（pKa 0.23），通过改变调节剂酸强度与用量，系统地调控UiO-67中配体缺失缺陷密度。
2. 金属位点工程体系：以2,2-联吡啶-5,5-二甲酸（H<sub>2</sub>bpydc）功能化配体替代部分联苯二甲酸（H<sub>2</sub>bpdcc），通过后合成金属化（PSF）引入Cu<sup>2+</sup>开放金属位点。

---

## 缺陷密度近10倍调控，等温线形状显著变化

模拟与实验确定调节剂酸强度与用量协同控制缺陷密度，实现了5.4%（Acet8）到50.1%（Trif20）的近10倍调控。低缺陷样品（Acet系列）在~20 kPa呈现明显的第一台阶（三角窗孔填充），高缺陷样品（Trif20）第一台阶消失、在~65 kPa出现显著的第二台阶（菱形窗孔填充）。氟化调节剂中的F原子可通过氢键与NH<sub>3</sub>相互作用，额外贡献高压区吸附容量。

## Cu负载引入Lewis酸性位，容量提升超50%

Cu负载形成开放金属位点，通过Lewis酸碱作用增强NH<sub>3</sub>亲和力。5py-Cu样品的氨吸附容量较未负载Cu前提升超50%，其NH<sub>3</sub>-TPD脱附峰面积较20py-Cu增大84.2%，证实低比例bpydc-Cu的优越性。而高比例bpydc-Cu因Cu团簇堵塞孔道（BET比表面积从2247 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>降至1323 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>），导致性能逆转。

## 双策略互补机制明确

缺陷工程主导吸附等温线轮廓形状（台阶位置和数量），金属负载直接决定吸附容量，二者独立可调、协同增效，为应用导向的吸附剂设计提供了灵活方案。

## 未来展望

针对当前氟化调节剂成本较高、Cu负载量-分散度关系尚需精细优化等问题，提出以下未来研究方向：

（1）探索更经济高效的酸性调节剂体系，降低缺陷工程成本；（2）精准控制Cu分散度，避免团簇堵塞，并拓展至其他金属（如Ni、Co）；（3）面向实际工业场景（如NH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>分离、痕量NH<sub>3</sub>传感）开展动态穿透与选择性测试。

## 重要图表解读

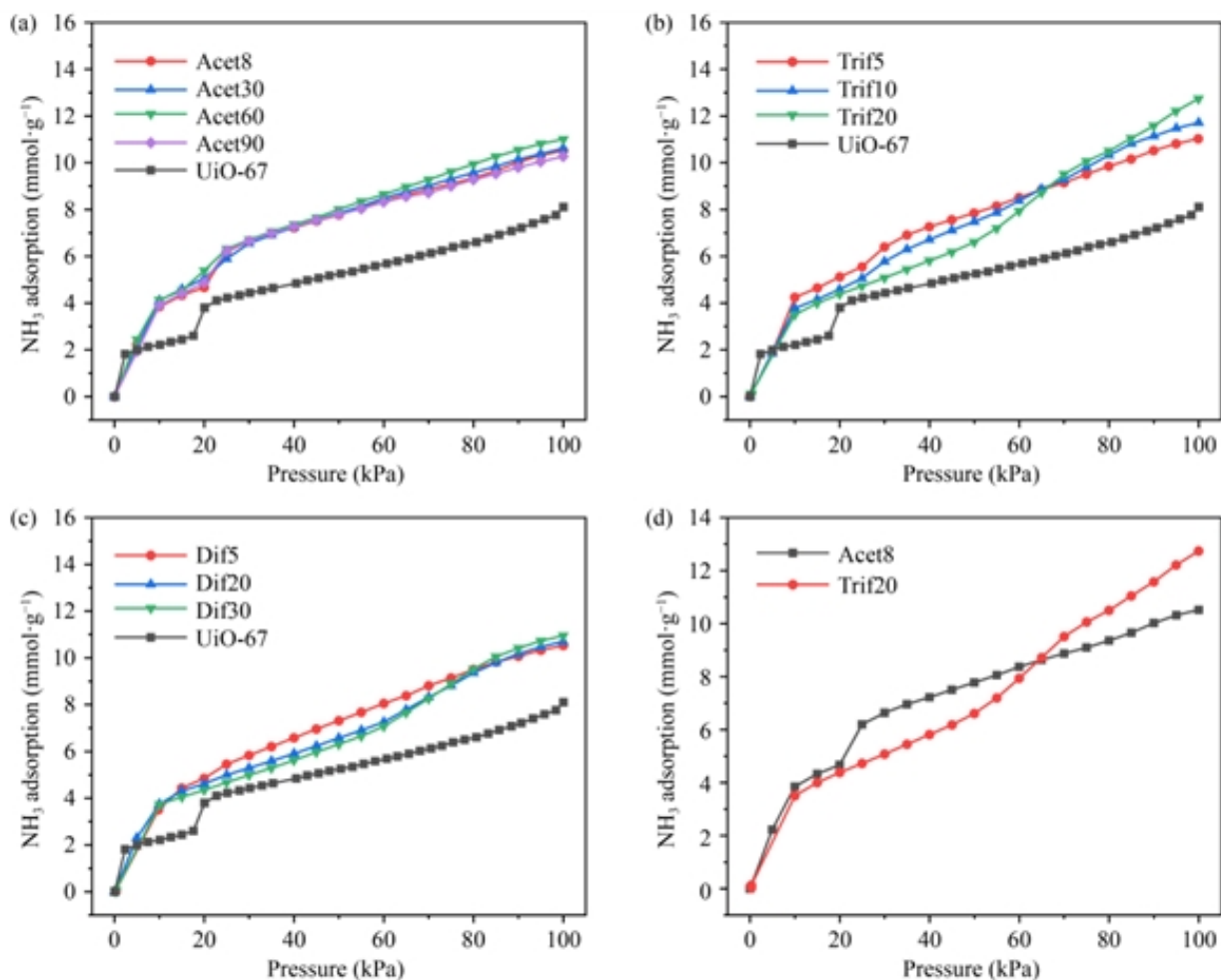


图2.为缺陷工程各样品的氨吸附等温线（298K）。Acet系列缺陷密度低（5.4% – 12.9%），等温线形状相近；Trif系列缺陷密度高（21.3% – 50.1%），第一台阶减弱、第二台阶增强，Trif20在100 kPa反超Acet8。

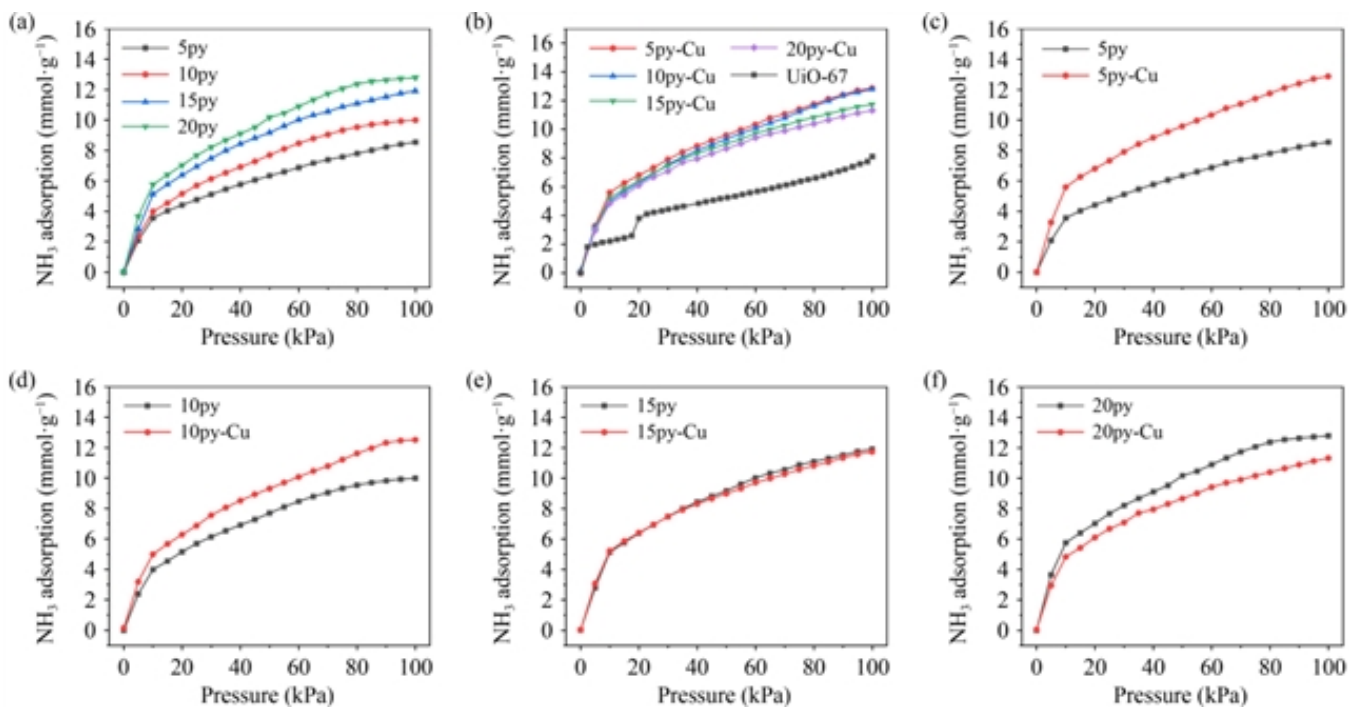


图4.展示了Cu负载对吸附量的提升效果，体现出联吡啶低比例提升/高比例下降的关键规律。

(来源：EngineeringJournals微信公众号)

相关论文信息：<https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2653-7>

作者：赵朴等 来源：《工程·化学工程》

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