

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

D20-多孔吸附与催化

D20-Adsorption and Catalysis in Porous Materials

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



D20. 多孔吸附与催化

分会主席：李建荣 邹如强

D20**双连续结构多孔材料及其能源存储与转化应用**

麦亦勇*

西安交通大学

光电功能材料是能源存储与转化等多个国家重大科技发展目标领域的核心材料，其主要研究目标之一的获得材料的构效关系和实现性能的优化。为此，实现材料的有序化是必要条件之一。本团队致力于用高分子自组装方法解决结构特殊的光电功能材料的有序化难题，构筑了一系列新颖的多维多尺度光电功能材料，并揭示和理解未知的构效关系。本报告将介绍团队在自组装可控构筑双连续结构多孔材料研究方面的成果：通过嵌段共聚物精准溶液自组装和相结构精确调控，获得了有序双连续结构组装体，填补了长期以来该相图的空缺；以此为模板精准构筑了双连续结构光电功能材料，并揭示该结构在光电应用上的独特优势。

D20**框架材料的结构重构与催化应用**

赵美廷*

天津大学

框架材料，包括金属有机框架（MOFs），共价有机框架（COFs）和氢键有机框架（HOFs）等，分别是由配位键、共价键和氢键链接组装而成的多孔材料。由于其具有较大的表面积、孔体积、易调节的结构和孔径等性质，框架材料在吸附、分离、催化和能源等领域具有广阔的应用前景^[1-3]。框架材料多样性的成键方式，为利用化学键的可逆变化诱导其结构重构，进而调控其结构和功能的提供了一种新的机会。

我们利用混合金属和混合配体构筑了一系列框架材料，通过精准调控亚胺键、酰亚胺键、碳溴键、氢键等化学键的形成与断裂，实现了框架材料的结构重构，包括晶体结构（晶态、非晶态）、缺陷结构、纳米结构等^[4-9]。进一步负载贵金属纳米颗粒，合成了金属@框架材料催化剂，实现了对不同官能团的选择性吸附与活化，有效调节了催化活性和选择性。在有干扰官能团存在的情况下，可以选择性的催化加氢 NO_2 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 等官能团。框架材料的结构重构策略为设计合成高效框架催化材料提供了一定的思路。

关键词：框架材料；结构重构；选择性催化；催化加氢

参考文献

- [1] J. Guo, Y. Qin, Y. Zhu, X. Zhang, C. Long, M. Zhao*, Z. Tang*, *Chemical Society Reviews* **2021**, 50, 5366-5396.
- [2] Y. Qin, Z. Li, Y. Duan, J. Guo*, M. Zhao*, Z. Tang*, *Matter* **2022**, 5, 3260-3310.
- [3] M. Zhao, K. Yuan, Y. Wang, G. Li*, J. Guo, L. Gu, W. Hu, H. Zhao*, Z. Tang*, *Nature* **2016**, 539, 76-80.
- [4] M. Zhao, J. Chen, B. Chen, X. Zhang, Z. Shi, Z. Liu, Q. Ma, Y. Peng, C. Tan, X.-J. Wu, H. Zhang*, *Journal of the American Chemical Society* **2020**, 142, 8953-8961.
- [5] Z. Li, B. Yao, C. Cheng, M. Song, Y. Qin, Y. Wan, J. Du, C. Zheng, L. Xiao, S. Li, P.-F. Yin, J. Guo*, Z. Liu*, M. Zhao*, W. Huang*, *Advanced Materials* **2024**, 36, 2308427.
- [6] J. Guo*, Y. Duan, Y. Jia, Z. Zhao, X. Gao, P. Liu, F. Li, H. Chen, Y. Ye, Y. Liu, M. Zhao*, Z. Tang*, Y. Liu*, *Nature Communications* **2024**, 15, 139.
- [7] X. Zhang, X. Tian, N. Wu*, S. Zhao, Y. Qin, F. Pan, S. Yue, X. Ma, J. Qiao, W. Xu, W. Liu, J. Liu*, M. Zhao*,

K. Ostrikov, Z. Zeng*, *Science Advances* **2024**, *10*, eadl6498.

[8] M. Song, Y. Wan, C. Cheng, J. Du, Y. Qin, Z. Li, S. Kong, B. Yao*, S. Li*, J. Guo*, Z. Tang, M. Zhao*, *CCS Chemistry* **2025**, doi:10.31635/ccschem.024.202404172.

[9] Y. Qin, J. Du, Q. Zhang, C. Cheng, Z. Dong, Q. Zhang, S. Li, J. Guo, Z. Tang, M. Zhao*, *Advanced Materials* **2025**, *37*, 2419515.

D20

金属-碳配位键基二维金属有机框架

庄小东*

上海交通大学

金属有机框架（MOFs）材料自发现以来，已经得到快速发展，在诸多领域表现出巨大应用潜力，围绕结构设计和应用开发这两方面的工作尤其突出。在大量的 MOFs 结构中，大部分连接键都是基于金属-杂原子配位键，而基于金属-碳配位键的 MOFs 较为少见。虽然也有金属-炔键的案例见诸报道，但是这类配位键非常不稳定，需要以来高真空环境和原子级平整的贵金属表面，而且仅限单层和有限单元的聚合，大大限制了其应用领域的探究。报告人近两年，开发了一类空气稳定的金属-碳配位键基二维 MOFs，并且探究了其能带、导电性、电催化等性能和应用表现，这一类全新的结构将给 MOFs 领域带来新的结构设计和应用开发探索。

D20

共价金属有机框架的设计合成及其性能研究

宁国宏*

暨南大学

金属有机框架(metal-organic frameworks, MOFs)和共价有机框架(covalent organic frameworks, COFs)作为两类高晶性、易修饰的多孔材料，在气体吸附、储能、传感、催化以及药物缓释等多个领域有着广泛应用。长久以来，MOF 化学和 COF 化学都是相对独立发展。近年来，将 MOF 化学（配位化学）与 COF 化学（共价键化学）进行交叉融合，产生了一种新型共价金属有机框架（covalent metal-organic frameworks, CMOFs）。本课题组利用环三核团簇作为构建单元，设计合成了一系列的环三核团簇基晶态共价有机框架。该类晶态多孔材料赋予了金属团簇以多孔特性，展现出优于团簇构筑单元的稳定性、光催化反应活性、吸附性能等。

D20

共价有机框架中芳香性与半导体性质调控

金恩泉*

吉林大学

共价有机框架（COFs）作为一类由有机基元通过共价键连接且有序排列而成的晶态多孔材料，为按需开发高性能有机半导体提供一个有效平台。然而，该领域仍面临以下几方面问题和挑战：（1）载流子传输机制不明确；（2）载流子传输能力有限；（3）共轭程度调控困难等。

针对上述难题，我们发展了“模型框架聚合法”及“共轭程度调控法”，通过有效调控不同维度共轭程度，使 COFs 实现高载流子迁移率、强固态发光及优异的锂离子传输。此外，还制备出首个具有 Drude 型带状载流子传输性质的 COFs 薄膜，在 THz 光谱测试下，室温载流子迁移率高达 $165 \pm 10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。相关工作作为今后开发新型 COFs 半导体用于有机场效应、电极材料及传感等，具有指导意义。

关键词：共价有机框架；共轭程度；有机半导体

参考文献

- [1] Fu, S.; Li, X.; Wen, G.; Guo, Y.; Addicoat, M.; Bonn, M.; Jin, E.; Müllen, K.; Wang, H. Dimensional evolution of charge mobility and porosity in covalent organic frameworks. *Nat. Commun.* 2025, 16: 2219.
- [2] Qiao, G.; Wang, X.; Li, X.; Li, J.; Geng, K.; Jin, E.; Xu, J.; Yu, J. Unlocking synthesis of polyhedral oligomeric silsesquioxane-based three-dimensional polycubane covalent organic frameworks. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146: 3373.
- [3] Yang, M.; Hanayama, H.; Fang, L.; Addicoat, M. A.; Guo, Y.; Graf, R.; Harano, K.; Kikkawa, J.; Jin, E.; Narita, A.; Müllen, K. Saturated linkers in two-dimensional covalent organic frameworks boost their luminescence. *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145: 14417.
- [4] Jin, E.; Geng, K.; Fu, S.; Addicoat, M. A.; Zheng, W.; Xie, S.; Hu, J.-S.; Hou, X.; Wu, X.; Jiang, Q.; Xu, Q.-H.; Wang, H. I.; Jiang, D. Module-patterned polymerization towards crystalline 2D sp^2 -carbon covalent organic framework semiconductors. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 61: e202115020.
- [5] Fu, S.; Jin, E.; Hanayama, H.; Zheng, W.; Zhang, H.; Di Virgilio, L.; Addicoat, M. A.; Mezger, M.; Narita, A.; Bonn, M.; Müllen, K.; Wang, H. I. Outstanding charge mobility by band transport in two-dimensional semiconducting covalent organic frameworks. *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144: 7489.

D20

外交联编织法构建的超交联聚合物及其在甲烷存储中的应用

谭必恩*

华中科技大学

全球能源结构正加速从传统化石燃料向清洁可持续能源转型，以应对日益严峻的环境与能源危机。天然气作为低碳燃料，是能源绿色转型的重要过渡能源，而吸附天然气（ANG）技术凭借储能密度、经济性与安全性的综合优势，成为极具潜力的甲烷存储解决方案。该技术发展的核心在于研发兼具高存储容量、优异稳定性和低成本的新型吸附材料。超交联聚合物（HCPs）作为通过 Friedel-Crafts 烷基化反应一步合成的有机多孔材料，因其独特的结构稳定性、可调控孔隙结构及突出的原子经济性，有望突破传统甲烷吸附剂的性能与制备瓶颈——克服活性炭存储容量低、金属有机框架材料成本高且稳定性差等问题，成为高压甲烷存储的理想材料。本研究围绕外交联编织法制备的 HCPs 材料，结合甲烷存储的高性能与产业化需求，开展了系列创新研究：（1）通过分子设计优化刚性 HCPs 的孔道结构；（2）利用官能团修饰精准调控 HCPs 的存储性能；（3）开发具有动态门控效应的柔性 HCPs 新材料；（4）探索高性能 HCPs 的致密化成型工艺。实验证实，上述研究在材料合成与性能提升方面取得显著突破，但在作用机理阐释和实际应用转化中仍面临关键科学问题。未来，深入解析 HCPs 材料的“结构 - 性能”构效关系，将是推动其作为新一代 ANG 吸附剂实现产业化应用的核心方向。

参考文献

- [1] Hu, J.; Gao, H.; Wang, X.; Tan, B. High-Capacity Volumetric Methane Storage in Hyper-Cross-Linked Porous Polymers Via Flexibility Engineering of Building Units. *Adv. Mater.* 2025, 37, 2418005.
- [2] Yang, S.; Zhong, Z.; Hu, J.; Wang, X.; Tan, B. Dibromomethane Knitted Highly Porous Hyper-Cross-Linked Polymers for Efficient High-Pressure Methane Storage. *Adv. Mater.* 2024, 36, 2307579.
- [3] Hu, J.; Yang, S.; Wang, X.; Zhang, D.; Tan, B. High Pore Volume Hyper-Cross-Linked Polymers Via Mixed-Solvent Knitting: A Route to Superior Hierarchical Porosity for Methane Storage and Delivery. *Macromolecules* 2024, 57, 5507-5519.
- [4] Yang, S.; Wang, X.; Tan, B. Porosity Engineering of Hyper-Cross-Linked Polymers Based on Fine-Tuned Rigidity in Building Blocks and High-Pressure Methane Storage Applications. *Macromolecules* 2023, 56, 1213-1222.

Tan, L.; Tan, B. Hypercrosslinked Porous Polymer Materials: Design, Synthesis, and Applications. *Chem. Soc. Rev.* **2017**, 46, 3322-3356.

D20

自组装材料化学

李伟*

复旦大学

自从功能介孔材料问世以来，引起了人们广泛兴趣。其特殊的介观结构和性质，超高比表面，超大的孔容，大而均一可调的孔径，在石油裂化、催化、吸附、分离等方面，尤其是能源转化与储存方面具有广泛的应用前景。这里，我们主要阐述近年来在单胶束定向组装介孔材料方面的研究进展。发现了小分子调节有机-无机/有机-有机分子间相互作用构筑单胶束基元新机制，发展了“纳米乳液”、“液-液两相界面组装”、“反相胶束组装”、“配位调控自组装”等多种全新合成方法，制备了垂直孔道介孔薄膜、树枝状介孔碳球、介孔氧化钛相结、可变性介孔空心硅球等新型介孔材料，所制备的功能介孔材料不仅形貌独特、均一，而且具有可控的介观孔道结构、高比表面积、大的孔容和开放的孔道。正是由于其独特的结构及功能性，使得这些材料在能源存储、催化等方面展现出非常好的应用前景。

报告人照片、简介

D20

大面积共价有机框架均孔膜合成探索

郑治坤*

中山大学

共价有机框架可通过动态共价有序网络构筑亚纳米贯通孔道，结构可设计性强，在传统聚合物膜难以胜任的尺寸相近有机小分子分离等精密分离领域极具应用前景，但其大面积可控制备仍面临生长熵亏高、机械强度低等问题。针对这些问题，报告人通过结构导向剂调控共价有机框架结晶过程，发现了聚合物结晶新路径，构建了晶体生长模型，揭示了结晶机理，建立了可控制备高结晶度共价有机框架的普适性新方法；通过共价有机框架成膜过程跟踪及外场驱动多层次网络结构运动，探明了缺陷结构，揭示了其形成和调控机制，初步建立了实现孔道结构均一化的方法；通过编织晶界构建，实现了共价有机框架膜材料机械强度和韧性的同步增强，为大面积、无缺陷、共价有机框架膜的可控制备奠定了坚实的基础。

D20

人造酶生物催化医学材料

程冲*

四川大学

我国是人口大国，各种组织器官损伤及炎症疾病的病患群体数量非常庞大，相关疾病往往创面或组织缺损大、坏死严重、炎症反应强，极易发生细菌感染，因此创面/组织愈合十分困难，自身极难修复。开发和制备具备抑菌、抗炎及促组织再生的生物医用材料对满足不同组织修复和治疗极为重要，相关领域已成为临床治疗中急需解决的难题，也是关系到人民健康的国家重大需求问题。本团队近年来提出通过构建共轭高分子人造酶生物催化医学材料来实现高效抑菌、抗炎和促再生治疗效应，团队利用共轭高分子化学合成结合材料基因工程技术，高通量设计和筛选了大量生物医用人造酶材料[1-5]。通过医工结合的研究模式，开发出多种可高效抑菌、抗炎及促再生的人造仿酶生物医用材料，阐明了不同人造酶结构对不同活性氧的

反应效率及机理。此外还利用体外干细胞实验、动物创伤及炎症疾病模型等实验探明其抑菌、抗炎促组织再生性能、作用机制与生物安全性。团队以临床治疗为导向, 针对解决和探索临床治疗重大需求的关键前沿科学问题, 已研发出多种具有自主知识产权的新型生物医用高分子材料, 并为该领域的发展提供原创性策略与理论基础。

参考文献

- [1]. Chong Cheng,* et al. *Nature Communications*, 2025, 16, 856.
- [2]. Chong Cheng,* et al. *Nature Materials*, 2021, 20, 1240.
- [3]. Chong Cheng,* et al. *Nature Communications*, 2024, 15, 9592.
- [4]. Chong Cheng,* et al. *Nature Communications*, 2021, 12, 6143.
- [5]. Chong Cheng,* et al. *Science Advances*, 2021, 7, eabd3803.

D20

晶态纳米有机光催化材料

张维伟*

华东理工大学

基于光合作用原理发展的各种光-化学转换清洁能源技术备受关注。光催化反应能够以水和空气为原料制备氢气和过氧化氢等清洁燃料及化学品, 是化工向绿色、可持续化发展的重要研究方向。然而, 目前光催化反应中存在电荷输运距离短、电荷重组严重和电荷分离难等瓶颈问题, 限制了其光-化学转换效率的提升。为此, 我们围绕“光生电荷传递过程强化”的科学问题, 开展了光敏分子组装行为调控和晶态纳米有机光催化剂精准构筑的研究, 取得光-化学转换效率的显著提升, 具体包括: 提出重构框架结晶组装策略, 强化光生电荷在体相中的长程输运; 发展限域空间纳米组装方法, 有效抑制光生电荷在体相内的电荷重组; 拓宽涡流强化 D:A 组装技术, 大幅提升光生电荷的分离效率。此外, 我们在研究过程中还提出了批量筛选与宏量制备相结合的有机光催化剂研究新思路。

参考文献

- [1] **W. Zhang**, L. Chen, S. Dai, C. Zhao, C. Ma, L. Wei, M. Zhu, S. Y. Chong, H. Yang, L. Liu, Y. Bai, M. Yu, Y. Xu, X. Zhu, Q. Zhu, S. An, R. S. Sprick, M. A. Little, X. Wu, S. Jiang, Y. Wu, Y. Zhang, H. Tian, W.-H. Zhu* and A. I. Cooper*, *Nature*, **2022**, 604, 72.
- [2] **W. Zhang**[#], M. Yu[#], T. Liu, M. Cong, X. Liu, H. Yang, Y. Bai, Q. Zhu, S. Zhang, H. Gu, X. Wu, Z. Zhang, Y. Wu, H. Tian, X. Li, W.-H. Zhu* and A. I. Cooper*, *Nat. Synth.*, **2024**, 3, 595.
- [3] W. Zhao, L. Luo, M. Cong, X. Liu, Z. Zhang, M. Bahri, B. Li, J. Yang, M. Yu, L. Liu, Y. Xia, N. Browning, W.-H. Zhu, **W. Zhang***, A. I. Cooper*. *Nat. Commun.*, **2024**, 15, 6482.
- [4] X. Wang, T. Fellowes, M. Bahri, H. Qu, B. Li, H. Niu, N. D. Browning, **W. Zhang***, J. W. Ward* and A. I. Cooper*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 14128.
- [5] T. Xu, Z. Wang, **W. Zhang***, S. An, L. Wei, S. Guo, Y. Huang, S. Jiang, M. Zhu, Y. Zhang and W.-H. Zhu*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 20107.
- [6] X. Liu[#], M. Yu[#], K. Huang, H. Huang, H. Gu, C. Tian, J. Qi, Z. Guo, C. Lian, Y. Wu, **W. Zhang***, W.-H. Zhu*, *Adv. Mater.*, **2025**, 37, 2413440.

D20

多元框架材料

袁帅*

南京大学

多元金属-有机框架 (multi-component MOFs) 是由多种金属或有机配体通过配位键连接形成的有序晶体材料。不同金属位点或有机官能团可以被安插在多元 MOF 晶格的不同位置, 并通过结构设计调控各组分相对距离, 从而实现在原子精度上控制固体材料的结构。首先, 我们针对多元 MOFs 合成的难题, 开发了一系列后修饰反应, 将多种金属和配体逐步搭建在原始 MOFs 结构之上, 从而可控地增加 MOFs 的组分和复杂性。其次, 我们基于上述策略提出多元 MOFs 的逆向合成方法, 实现在原子精度上控制固体材料的结构。最后, 我们探索多元 MOFs 在仿生、协同催化、能源环境等方面的应用。

D20

电功能导向的共价有机框架材料理性合成

李兴*

香港城市大学

面对全球气候危机, 可再生能源驱动的绿色电力蓬勃发展, 为传统工程流程的电气化创造了前所未有的机遇。要抓住这一机遇, 亟需开发能够高效生成、储存与利用来自间歇性可再生能源的绿色电力技术。然而, 能源储存与利用技术的进步, 仍受限于基础化学和材料科学领域的根本性挑战。共价有机框架 (COF) 是一类通过共价键将有机小分子单元精确组装而成的多孔聚合物晶体, 常被喻为“分子乐高”。得益于分子构筑单元的丰富选择以及近十年来在结构可预测性和可调性方面的突破, 种类繁多的 COF 被成功创制, 使其成为一个功能集成的材料平台。区别于传统线性聚合物, COF 具有更高维度的网络拓扑结构, 赋予其可定制的均一永久孔隙, 这一特性非常有利于促进物质传输。然而, 其合成与加工处理的挑战严重制约了实际应用。目前, COF 独有的突破性应用 (“杀手级应用”) 仍较为有限。有鉴于此, 我们通过分子工程策略, 有效实现了高结晶度 COF 的快速宏量合成与高精度 (可控) 剥离。同时, 利用 COF 独特的框架结构, 成功稳定了高活性卡宾催化剂。这些进展为开发高效、长循环稳定的空气电池和锂硫电池奠定了重要基础。

D20

高纯化学品分子识别与吸附分离过程

崔希利*

浙江大学

聚合级、电子级碳氢/氟等结构相似物高纯度化学品的选择性分离是化学工程领域的重要学术前沿, 但现有吸附分离过程存在选择性和容量难以兼具的难题。微观分子识别机制以及高选择性分离材料设计的研究是解决这一问题的关键。近年来围绕高纯化学品和清洁能源制造过程中低碳烃和专用化学品分离等关键技术, 设计开发高效分离材料, 以实验研究和模拟计算相结合的方法研究分子识别和分离机制, 在此基础上对高性能吸附剂成型、分离工艺等开展了系统研究; 开发了高纯度活性全氟聚醚高分子同系物分离制备关键技术, 在巨化实现产业应用, 为活性全氟聚醚及其下游含氟电子材料的国产化提供了关键基础材料。

参考文献

- [7] Xili Cui[#], Kaijie Chen[#], Huabin Xing*, Qiwei Yang, Rajamani Krishna, Zongbi Bao, Hui Wu, Wei Zhou, Xinglong Dong, Yu Han, Bin Li, Qilong Ren, Michael J. Zaworotko*, and Banglin Chen*. Science, 2016, 353, 141-144.
- [8] Xili Cui*, Zheng Niu, Chuan Shan, Lifeng Yang, Jianbo Hu, Qingju Wang, Pui Ching Lan, Yijian Li, Lukasz Wojtas, Shengqian Ma*, Huabin Xing*, Nature Commun., 2020, DOI: 10.1038/s41467-020-19209-7
- [9] Zhaoqiang Zhang, Bin Tan, Pengcheng Wang, Xili Cui*, Huabin Xing, AIChE J., 2020, 66:e16236.

D20

太阳能驱动光化学合成过氧化氢：机理与性能调控

徐航勋*

中国科学技术大学

过氧化氢不仅是一种广泛应用于化工、医疗和环境领域的绿色氧化剂，更是一种具备潜力的清洁能源载体。然而，当前工业上主要采用的蒽醌法生产工艺能耗高、过程复杂，难以满足可持续发展的需求。因此，开发绿色、高效、以太阳能为驱动的过氧化氢合成技术成为亟待突破的前沿方向。绿色植物通过光合作用将太阳能转化为化学能的过程为人类提供了重要的启示。模仿这一自然过程，将太阳能转化为可存储和可运输的化学能，被认为是解决能源和环境危机的有效途径之一。

近年来，我们设计并发展了一系列具有高效光化学能量转换效率的二维共轭有机多孔高分子材料体系并用于光化学合成过氧化氢，系统提出并验证了多种提升光催化过氧化氢合成效率的分子设计策略，包括：

（1）通过构建具有空间分离氧化/还原中心的七嗪共价有机框架，显著提升了载流子分离效率，并实现了水氧化和氧化还原在不同位点的协同反应，达到 0.78% 的太阳能转化效率；（2）引入炔基和二炔基团至三嗪骨架中，有效降低水氧化过程中关键中间体 OH^* 的生成能垒，首次实现了聚合物体系中从水直接两电子氧化生成过氧化氢的反应路径；（3）利用区域异构策略设计了两种结构不同的异构共价有机框架材料，通过调控噻吩结构单元的取代位点，实现激发态电子的空间重分布，其中 β 异构体展现出高达 1.35% 的转化效率；（4）系统比较三种不同拓扑结构的 sp 碳连接共价有机框架，发现 hxl 拓扑显著改善了激子解离与载流子迁移行为，实现了 1.41% 的 H_2O_2 光合成效率。

我们的研究系统揭示出高分子光催化材料的反应机理与调控机制，阐明了材料表面活性位点的结构及其在光催化反应中的关键作用，明确了反应路径，并深刻提炼出有机官能团对材料能带结构和反应中间态能垒的调控机制。这些发现为优化材料设计、提高光催化性能提供了重要的理论依据，也为开发新一代高效、可持续的太阳能化学转化材料体系提供了理论依据和实践范式。

D20

NiII-Ni0 原位催化体系实现 PAFs 材料的低成本及大规模制备

任浩*

吉林大学

多孔有机骨架是一类有机分子基块通过聚合反应下形成的新型多孔材料。多孔有机骨架具有稳定性高、比表面积大和骨架可调控等特点，在气体吸附、气体分离、催化和能源存储等领域展现了良好性能[1-3]。2009 年，以双-(1, 5-环辛二烯) 镍催化的乌尔曼偶联反应合成了高稳定性和高比表面积的 PAF-1 (PAF = porous aromatic framework) [4]。Ni(COD)₂ 对光、空气、水分和温度等都非常敏感，其需要在低温和惰性气氛下保存。在使用 Ni(COD)₂ 作为催化剂时，溶剂需要是无水干燥的，也需要氩气保护。最近，我们提出了一种新型的 Ni^{II}-Ni 原位还原催化体系，Ni 催化剂由镁还原 NiCl₂ 生成[5]。通过筛选反应时间、温度、共配体、Ni^{II} 源等，获得了合成 PAF-1 的最优催化条件，PAF-1-NS 的比表面积高达 4948 m² g⁻¹。此外，该催化体系可用于克级制备 PAF-1，并且在合成 PAF-5 和 JUC-Z2 时也有良好效果。这项研究为 PAFs 的通用制备和大规模合成提供了新方法。

参考文献

- [1] Zhu, G.; Ren, H. Springer, Germany, 2015, ISBN, 978-3-662-45456-5.
- [2] Tian, Y.; Zhu, G. Chem. Rev. 2020, 120, 8934.
- [3] Zhang, S.; Taylor, M.; Jiang L.; Ren H.; Zhu, G. Chem. Eur. J. 2020, 26, 3205.
- [4] Ben, T.; Ren, H.; Ma, S.; Cao, D.; Lan, J.; Jing, X.; Wang, W.; Xu, J.; Deng, F.; Simmons, J.; Qiu, S.; Zhu, G. Angew. Chem. Int. Ed. 2009, 48, 9457.
- [5] Wang, S.; Wu, Y.; Zhang, W.; Ren, H.; Zhu, G.; Ma, H. Carbon. Energ., 2024, e445.

D20

共轭聚合物光电催化

孙瀚君*

南京师范大学

基于光合作用原理发展的各种光-化学转换清洁能源技术备受关注。光催化反应能够以水和空气为原料制备氢气和过氧化氢等清洁燃料及化学品，是化工向绿色、可持续化发展的重要研究方向。然而，目前光催化反应中存在电荷输运距离短、电荷重组严重和电荷分离难等瓶颈问题，限制了其光-化学转换效率的提升。为此，我们围绕“光生电荷传递过程强化”的科学问题，开展了光敏分子组装行为调控和晶态纳米有机光催化剂精准构筑的研究，取得光-化学转换效率的显著提升，具体包括：提出重构框架结晶组装策略，强化光生电荷在体相中的长程输运；发展限域空间纳米组装方法，有效抑制光生电荷在体相内的电荷重组；拓宽涡流强化 D:A 组装技术，大幅提升光生电荷的分离效率。此外，我们在研究过程中还提出了批量筛选与宏量制备相结合的有机光催化剂研究新思路。

关键词：共轭聚合物；炔基；光电催化；制氢；催化机制

参考文献

- [1] Sun, H. et.al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, **58**: 10368.
- [2] Sun, H. et.al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, **60**: 18876.
- [3] Sun, H. et.al. *Adv. Mater.*, **2019**, **31**: 1900961.
- [4] Sun, H. et.al. *Adv. Mater.*, **2020**, **32**: 2002486.
- [5] Sun, H. et.al. *Chem. Eur. J.*, **2024**, **30**: e202402930.

D20

原子级催化剂的靶向设计与自动化制备

海晓*

北京大学

本研究围绕原子级催化剂的靶向设计与自动化制备，聚焦于提升催化材料在结构调控、性能优化及规模化制备方面的核心能力。当前，单原子催化剂因其极高的原子利用效率和独特的催化性能，已成为能源转化与绿色合成领域的研究热点。然而，单原子催化剂普遍面临着结构刚性强、电子结构调控能力不足等瓶颈，严重限制了其在复杂反应体系中的反应活性和应用范围。为突破上述难题，我们深入研究了单原子与偕原子催化材料的构效关系，发展了一种可扩展的预锚定策略，成功构建了涵盖多种金属组分的高密度原子分散型催化剂库。该策略通过对配体结构、锚定位点和载体界面构型的精准调控，实现了活性中心的原子级可控合成，并显著提升了材料的稳定性与可重复性。在此基础上，我们进一步设计了具备可调配位环境与多维界面拓扑结构的活性位点，有效增强了催化反应的选择性与转化效率。此外，本研究提出并构建了新型偕原子催化体系，该体系通过协同多位点行为和动态配位调控机制，突破了传统单原子催化剂在结构柔性与反应适应性方面的局限性，为多步级联反应与协同催化过程提供了更加高效的解决路径。为推动相关研究从理论设计走向实际应用，我们正建立自动化催化剂合成与表征平台，集成高通量合成、原位表征与性能评估模块，实现从催化剂设计、制备到筛选的全流程智能化与自动化，加速原子级催化剂在能源与化工等领域的工程化应用。

D20

三维 COF 设计合成及能源小分子转化

兰亚乾*

华南师范大学

D20

sp 碳共轭二维聚合物新材料设计构筑及其光电催化性质研究

张涛*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

以碳碳双键 (C=C) 桥接的 sp 碳共轭二维聚合物 (sp²DPs) 因其刚性骨架结构、优异的化学稳定性和平面扩展的 π 共轭体系, 在膜分离、能量转换和有机电子等领域展现出广阔的应用前景。然而, C=C 键的高活化能垒与非可逆成键特性, 导致传统界面合成中的自纠错机制失效, 难以兼容现有的动态界面组装热力学调控机制, 致使晶态 sp²DPs 的结构长程有序性与薄膜均匀性仍未达到理论预期。为应对这一挑战, 我们团队发展了多种框架化学与表界面聚合策略, 实现了晶态 sp²DPs 及其薄膜材料的可控制备。所制备的材料具有长程有序性、超薄均匀性及可编程孔道结构, 突破了传统不可逆反应在结构有序性与厚度可控性之间的技术瓶颈。研究表明这类材料在光电催化、有机电子等领域表现出优异性能。

D20

有机光反应制备共价有机框架材料

耿琰*、王广博、吴成娟、董育斌

山东师范大学

共价有机框架(COF)是基于共价键有序连接的一类晶态高分子材料, 具有规则的孔道结构、稳定的骨架结构、较高的比表面积、较高的孔隙率以及易于功能化修饰等优势, 自 2005 年 Yaghi 课题组报道了首例 COF 以来, 现已发展成为功能有机材料化学的热点研究领域之一。其中, COF 作为光催化剂应用于合成化学在近年来方兴未艾, [1] 但是通过光反应制备 COF 的研究才刚刚起步。

2022 年, 我们研究组首次利用太阳光作为光源, 通过窗台反应实现了 COF 的光催化合成。有别于传统的条件苛刻的溶剂热反应, 我们报道的基于窗台反应的 COF 合成是在室温常压进行的, 并且实现了克级制备。在氧气氛围和曙红存在下, 2,5-二氨基 1,4-二羟基苯二盐酸盐和 1,3,5-三(4-甲酰基苯基)三嗪在二甲基乙酰胺和 N-甲基吡咯烷酮的混合溶液中室温太阳光照反应 48 小时后, 制得目标 COF 材料。其形成的光催化环化反应机制得到了实验验证。同时, 所制备的 COF 材料作为光催化剂可以实现硫醚的光催化氧化反应高效进行。[2] 2023 年, 我们研究组在室温和可见光的反应条件下, 通过光诱导催化多组分 Petasis 反应, 实现了一系列 COF 材料的制备。所制备的 COF 材料作为光催化剂, 在光催化芳基硼酸氧化羟基化的反应中表现出了优异的光催化活性。[3] 2024 年, 我们通过三组分 Povarov 反应, 光催化合成了一系列以喹啉为桥键的 COF 材料。该方法具有很好的普适性。[4] 通过光催化合成策略制备 COF 材料, 为 COF 的绿色合成和应用提供了新的思路和可能。

关键词: 共价有机框架材料; 有机光反应; 光催化

参考文献

- [1] Wang, G.-B.; Xie, K.-H.; Xu, H.-P.; Wang, Y.-J.; Zhao, F.; Geng, Y.; Dong, Y.-B. Coord. Chem. Rev. 2022, 472: 214774.
- [2] Wu, C.-J.; Li, X.-Y.; Li, T.-R.; Shao, M.-Z.; Niu, L.-J.; Lu, X.-F.; Kan, J.-L.; Geng, Y.; Dong, Y.-B. J. Am. Chem. Soc. 2022, 144: 18750.
- [3] Wang, G.-B.; Wang, Y.-J.; Kan, J.-L.; Xie, K.-H.; Xu, H.-P.; Zhao, F.; Wang, M.-C.; Geng, Y.; Dong, Y.-B. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145: 4951.
- [4] Wu, C.-J.; Shao, M.-Z.; Kan, J.-L.; Liang, W.-J.; Li, T.-R.; Niu, L.-J.; Wang, H.-J.; Geng, Y.; Dong, Y.-B. ACS Materials Lett. 2024, 6: 5016.

D20

低剂量三维电子衍射的发展及其在框架材料中的应用

黄哲昊*

华南理工大学

在发展框架材料的过程中, 深入理解材料的性质及其构效关系必不可少。众所周知, 原子是组成物质的基本单元, 其排列和组成决定了材料的基本属性。因此, 框架材料原子级精细结构的解析对于其开发至关重要。单晶X射线衍射是目前最主要的原子级晶体结构测定方法, 但其运用局限于微米级尺寸晶体。对于纳米晶体, 基于透射电镜的电子显微方法是解析其精细结构的主要方法。然而, 由于电子和物质间的强烈相互作用, 电子束对材料的损伤不可避免, 这对于例如金属有机框架、共价有机框架等含有有机组分材料尤为严重。

低剂量三维电子衍射很好地突破了上述局限。该方法适用于纳米尺寸的晶体, 同时, 通过有效控制电子剂量, 该方法能够将电子对框架材料的损伤降至最低, 实现了原子级精细结构的解析。本次报告将汇报低剂量三维电子衍射方法的发展, 及如何将其运用于解析三维及二维层状框架材料的原子级精细结构^[1,2]。通过使用三维电子衍射方法高通量的优点, 我们从混合物中发现了一种新型的金属有机框架。因为其含量非常低, 这个发现极易被其他结构分析方法所忽略。通过发现并解析这种材料的新结构, 我们能够进一步调控合成条件并制备了高纯度的该产物^[3]。此外, 我将汇报通过使用三维电子衍射探测分子运动所取得的进展, 实现了对金属有机框架中同一有机分子的不同运动程度的识别^[4]。最后, 我将汇报我们在框架材料中直接定位客体分子的研究进展。通过低电子剂量和超快的数据收集, 我们实现了在差分电势图原子级识别及定位客体分子, 区分客体分子不同的空间构象, 揭示主客体相互作用^[5]。

关键词: 框架材料; 结构分析; 构效关系; 电子晶体学; 电子衍射

参考文献

- [1] T. Yang, T. Willhammar, H. Xu, X. Zou, Z. Huang, *Nat. Protoc.* **2022**, *17*, 2389.
- [2] Q. Chen, G. Zhou, Z. Huang, *Acc. Chem. Res.* **2024**, *57*, 2522–2531.
- [3] M. Ge, Y. Wang, F. Carraro, W. Liang, M. Roostaenia, S. Siahrostami, D. M. Proserpio, C. Doonan, P. Falcaro, H. Zheng, X. Zou, Z. Huang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 11391.
- [4] L. Samperisi, A. Jaworski, G. Kaur, K. P. Lillerud, X. Zou, Z. Huang, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 17947.
- [5] M. Ge, T. Yang, H. Xu, X. Zou, Z. Huang, *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, *144*, 15165.

D20

动态金属-有机框架轻烃吸附分离性质研究

常泽*

南开大学

轻烃的高效分离是石油化工和清洁能源领域的关键挑战。吸附分离技术因其低能耗潜力备受关注, 但其核心在于高性能吸附剂材料的开发。金属-有机框架(MOF)材料因其灵活可调的孔结构和孔表面性质已成为高性能吸附剂材料发展的理想平台, 广泛应用于轻烃吸附分离研究。在已报道的众多MOF材料中, 具有柔性框架结构的MOF材料可随外界刺激发生动态结构转化(如“开门”效应、孔道收缩/膨胀), 并可随孔道结构变化展现动态可变的吸附分离行为, 有望应用于智能响应吸附分离, 具有重要的研究意义^[1]。在此, 我们将汇报团队在动态MOF材料的构筑、动态结构转化行为及轻烃吸附分离性质等方面研究的最新成果^[2]。

参考文献

- [1] a) H. Zeng, M. Xie, Y.-L. Huang, Y. Zhao, X.-J. Xie, J.-P. Bai, M.-Y. Wan, R. Krishna, W. Lu, D. Li, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 8515. b) J. Wang, Y. Zhang, P. Zhang, J. Hu, R.-B. Lin, Q. Deng, Z. Zeng, H. Xing, S. Deng, B. Chen *J. Am. Chem. Soc.* **2020** *142*, 9744. c) D.-D. Zhou J.-P. Zhang, *Acc. Chem. Res.* **2022** *55*, 2966.
- [2] a) H. Fang, X.-Y. Liu, H.-J. Ding, M. Mulcair, B. Space, H. Huang, X.-W. Li, S.-M. Zhang, M.-H. Yu, Z. Chang, X.-H. Bu, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 14357–14367. b) H.-X. Nie, M.-H. Yu, H. Huang, S.-S. Liu, J.-Z. Jia, L. Li, Z. Chang, M. J. Zaworotko, X.-H. Bu, *Adv. Funct. Mater.* **2025**, *35*, 2414933. c) M.-H. Yu, H.

Fang, H.-L. Huang, M. Zhao, Z.-Y. Su, H.-X. Nie, Z. Chang, T.-L. Hu, *Small* **2023**, 19, 2300821.

D20

框架材料孔结构精密调控与吸附分离性能强化

鲍宗必*

浙江大学

金属有机框架材料(Metal-organic frameworks, MOFs)因其孔径的均一性、可精密调控及多样的柔性特征,在结构相似低碳烃吸附分离领域展现出巨大的应用潜力。本报告围绕 MOF 材料孔结构精准调控策略的建立,阐明 MOF 材料限制性孔道的亚埃米级精准调控及其对低碳烃吸附分离热力学和动力学行为的影响规律,从而建立低碳烃吸附分离性能的强化方法。报告将重点介绍溶剂介导的异构孔、二维堆叠的层间孔、手性控制的准离散孔及配位聚合物链形成的柔性孔等特殊孔结构对二氧化碳/甲烷、C1~C3 烷烃、丙烯/丙烷及二甲苯异构体等低碳烃吸附分离性能的影响,揭示孔道结构对吸附动力学的影响机制,为开发高性能 MOF 基低碳烃吸附分离材料提供重要参考。

D20

拓扑单原子催化

邹如强*

北京大学

单原子催化剂(SACs)凭借其卓越的原子利用效率和催化活性,在能源催化和储能领域展现出巨大潜力。设计与开发新型 SACs 不仅是构建高效能源催化体系、助力实现“碳达峰”与“碳中和”战略目标的关键,也是国际基础研究的前沿焦点。然而,突破催化活性、选择性与稳定性难以兼顾的瓶颈,是当前新型高性能 SACs 设计制备面临的核心挑战。

本报告提出了一种创新的拓扑单原子催化剂(Topological Single-Atom Catalysts, T-SACs)设计策略。该策略基于拓扑结构调控与电子屏蔽效应,精准构筑具有高性能的单原子位点。通过精确设计非对称空间构型, T-SACs 能够有效抑制副反应路径,显著提升催化选择性和稳定性,从而突破了传统催化剂在催化活性与选择性之间难以协同优化的关键限制。该设计策略普适性强,已成功应用于 Mn、Fe、Ru、Zn 等多种金属 SACs 的制备,并具备公斤级放大制备能力,兼具低能耗和经济成本优势。以低温氨选择性催化还原(NH₃-SCR)反应为例, T-SACs 表现出优异的催化性能,显著降低了 N₂O 等温室副产物的排放,有力支撑绿色技术和碳中和目标。基于上述理念,本报告进一步受点击化学启发,提出“点击锁定”策略。该策略利用 L-抗坏血酸等点击助剂作为分子“锁定安全带”,实现原子级精准锚定、优化电子结构并增强稳定性,同时可以有效减少原材料损耗,实现经济高效的规模化制备。目前,已利用自主研发的自动化合成机器人平台成功制备包含 200 余种点击单原子催化剂(Click Single-Atom Catalysts, C-SACs)的材料数据库,并开发高通量催化性能测试模块,加速了面向电催化、光催化和热催化过程的高性能催化剂筛选。工业级验证证实, C-SACs 具备优异的催化活性和长期运行稳定性,彰显了其广泛的适用性和高度的可靠性。本报告聚焦拓扑单原子催化的创新设计范式,通过精准结构调控策略,为高效选择性催化提供变革性解决方案。

参考文献

- [1] R. Zou. et al, *Nature Synthesis*, in revision.
- [2] R. Zou. et al, *Nature Communications*, **2025**, 1,6 1-15.

D20

功能性共价有机框架

王康*

北京科技大学

变革性与战略性功能材料的发现、发明和应用推广为技术革命和产业变革提供物质基础。多孔材料具有高的比表面和开放的通道,使其广泛的应用于气体储存、小分子分离、非均相催化、离子交换等,在国民经济中发挥重要作用。其中,以共价有机框架(Coalent Organic Frameworks, COFs)为代表的新型共价有机多孔聚合材料,具有结构清晰明确、孔道规则有序、易功能化修饰、稳定性高等优点,不仅有利于构效关系的理论探索,且在新能源、催化、生物医药等领域均有很好的应用前景。近年来,围绕 COFs 领域的若干科学问题和挑战,我们开展了系列的研究工作:1)提出了无溶剂绿色合成二维共轭 COFs 的普适性方法,利用位阻效应发展了制备二维 COFs 超薄纳米结构的普适性策略,实现了 COFs 材料的宏量、廉价、可控合成;2)发展了构筑二维 COFs 的新链接方式和构筑三维 COFs 的新单体,拓展了 COFs 的结构和拓扑种类;3)针对 COFs 材料在能源催化领域中的应用,构筑了基于 COFs 材料的高性能锂离子电池正极,阐明了锂离子存储机制,建立 COFs 功能化的设计策略,为高性能有机碱金属离子电池的开发提供指导。

D20

桥接前沿固体核磁共振技术与分子筛结构解析

陈魁智*

中国科学院大连化学物理研究所

分子筛基催化材料在能源、环保、化工和材料等领域发挥着关键作用;然而,现有的分子筛催化构效关系认识准确性不足,极大阻碍高效催化剂的设计和工业化应用,主要瓶颈之一是难以在原子尺度上精确揭示活性位结构。得益于原子尺度化学分辨、距离测量以及无定形结构、无损表征等优势,固体核磁共振(ssNMR)是现今最有效也是最有潜力表征方法之一。氢、铝物种是分子筛的关键活性中心(骨架 B 酸、外骨架铝、半键连骨架铝等)包含大量短程无序结构以及复杂的氢键环境,使得精准结构解析极其困难;另外,分子筛骨架中的亚纳米距离铝对(Al pair)具有重要的协同催化最用,但是因为骨架铝均呈现类似的 Al(OSi)₄四面体结构,只是空间分布有差异,常规表征手段难以对其区分。本报告将介绍近年来我们使用高场、超高场 NMR (600, 800, 1500 MHz 等)与前沿 NMR 脉冲技术等,解决低频核/四极核(²⁷Al、¹⁷O)的低灵敏、低分辨挑战,在分子筛铝物种辨识、精准结构解析上取得的一些重要进展,包括研究方法开发以及 B 酸与 Lewis 酸局域精细结构揭示。另外,我们近期实现了铝对和孤立铝位点、以及亚埃尺度铝对的亚类辨识与定量区分,并深入研究了铝对与分子筛水热稳定性的关联,相关成果为孤立铝、铝对的定向构筑及 Al-Al 距离的催化调控机制提供了可靠表征手段,为更高效分子筛设计提供了技术及理论支撑。

参考文献

- [1] Chen, K.*; Horstmeier, S.; Nguyen, V. Wang, B.; Crossley, S.; Pham, T.; Gan, Z.; Hung, I.; White, J. L.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 7514
- [2] Chen, K.*; Zornes, A.; Nguyen, V.; Wang, B.; Gan, Z.; Crossley, S. P.; White, J. L.* *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 16916
- [3] Ji, Y.; Chen, K.*; Han, X.; Bao, X.; Hou, G.* *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 11211 (supplementary cover)
- [4] Sun, Y.; Liang, L.; Yang, M.; Ji, Y.; Hou, G.*; Chen, K.* *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 12, 10160 (supplementary cover)

D20

Dynamic Covalent Organic Frameworks for Solar Energy Harvesting and Photocatalysis

章跃标*

上海科技大学

Sunlight-driven photocatalysis is regarded as one of the most promising strategies for renewable energy conversion. Recent studies have demonstrated that dynamic structural twisting of photocatalysts in their excited states can suppress charge recombination and enhance photocatalytic efficiency. Covalent Organic Frameworks (COFs), crystalline porous materials constructed via strong covalent bonds between organic building blocks, offer tunable light-harvesting and charge-transport properties, making them attractive candidates for heterogeneous photocatalysis under visible light. In this talk, we present the atomic-level observations of rotational and translational dynamics in single-crystal COFs upon adaptive guest inclusion of various organic molecules. These dynamics involve multiple rotamers of covalent linkages and switchable interframework noncovalent interactions. Such dynamic COFs exhibit concerted structural transformations in response to guest molecules, a property that has been widely studied for applications in gas storage, selective adsorption, heterogeneous catalysis, and molecular sensing. Recently, we have designed a dynamic COF with modulated structural flexibility in aqueous environments, which demonstrated enhanced performance in solar energy harvesting and photocatalytic activity.

D20

高性能 MOF 基 CO₂ 分离膜创制及放大

乔志华*

天津工业大学

围绕化工、能源和环境等领域的 CO₂ 分离过程，首先介绍了高性能 MOF 基 CO₂ 分离膜研究的必要性；然后指出现有 MOF 膜存在的不足：难以同时获得高通量和良好选择性，同时指出，目前很少有针对 MOF 膜进行放大的报道。紧接着，提出了我们的研究思路，通过构建富含活性位点的 MOF 超薄晶态膜，来同时获得高通量和良好选择性，并按照膜材料研发与规模化制备、膜规模化制备、膜组件研制以及膜分离装置建立的技术路线进行了 MOF 基 CO₂ 分离膜的规模化制备与应用研究。（1）首先，创制出水稳定的具有“金属—有机配体—聚合物”微结构的 MOF 新材料，提出“双聚合物定向沉积 MOF”策略，在聚砜(PSf)超滤膜支撑体上通过颗粒沉积创制出 MOF 超薄晶态膜，同时兼具高通量和良好选择性，实现了 CO₂/N₂ 的高效分离；进一步，通过“聚合物原位锚定”策略，在 PSf 超滤膜支撑体上原位制备出 CO₂ 分离 MOF 超薄晶态膜，同样实现了高通量和良好选择性。（2）通过“梯级成核-原位自修复”策略，实现了 CO₂ 分离 MOF 超薄晶态膜的大面积制备，单张膜面积可达 2700 cm²，大面积膜具有高通量和良好选择性。（3）研制出 CO₂ 分离 MOF 超薄晶态膜的连续化制备装置，实现了幅宽 0.3 m MOF 超薄晶态膜的连续化制备，开发了 MOF 超薄膜卷式组件制备工艺，研制出多只 1812 卷式膜组件，并建立了膜分离应用装置，推动了其应用。

D20

高效分离丙烯丙烷的 ZIF-8 膜

潘宜昌*

南京工业大学

石化行业中丙烯/丙烷的高效低能耗分离是重要发展方向。以高性能膜材料为核心的膜分离技术可实现丙烯/丙烷高效分离。金属-有机骨架 ZIF-8 是目前性能最好的丙烯/丙烷分离膜材料，推动该膜从实验室走向工厂已成为相关领域的研究焦点。ZIF-8 膜微结构的精密构筑决定了其关键晶体结构性质与其作为分离介质时的气体传输特性，是微孔膜成膜理论和高性能膜材料制备的关键研究内容。研究者将化学工程、晶体工程与界面化学的基本原理与方法引入 ZIF-8 膜的制备与微结构调控，推动 MOF 膜高效分离丙烯/丙烷的首次突破，具体进展如下：1）提出低温水相合成 ZIF-8 膜的新方法，借助媒介水驱动配体的快速去质子

化, 加速晶体成核与结晶动力学速率, 膜合成时间与膜厚均减小 1 个数量级以上, 且避免有机溶剂的使用与降低合成能耗输入; 2) 提出前驱体辅助生长策略, 前驱体直接驱动膜生长, 简化制备程序的同时也克服了常规晶种不能在管式支撑体表面强结合和均匀性等关键瓶颈; 3) 提出聚合物基体接触限制 MOF 骨架柔性的界面控制原理, 通过平衡聚合物链段的刚柔性, 建立了 ZIF-8 膜晶间结构与骨架柔性的协同调控理论, 提升了 ZIF-8 膜的制备重复性并实现本征柔性的 ZIF-8 膜在高压下分离性能的稳定; 4) 利用表面活性剂的界面响应原理, 根据晶核晶面结合能差异, 构建了表面活性剂浓度与 ZIF-8 晶体形貌之间的匹配法则, 突破了三维立体骨架材料超薄化的关键瓶颈; 5) 开发膜面积放大制备关键技术, 将化学工程中三传一反的基本原理引入 ZIF-8 膜规模化制备过程中强化传热和传质, 实现 ZIF-8 膜的放大制备。上述创新成果发展了膜材料微结构的调控方法与成膜理论, 助力实现高性能 ZIF-8 膜的制备, 推进 ZIF-8 膜向实际工业分离丙烯/丙烷应用不断迈进。

D20

工业气体吸附分离与纯化

肖静*

华南理工大学化学与化工学院

分离是化学工业的关键技术之一。其中, 结构相似工业烃如石化烃乙烯乙烷、丙烯丙烷、二甲苯同分异构体, 又如电子特气氟碳烃一氟甲烷、八氟丙烷等的分离提纯, 既是化工分离的学科前沿, 又契合重大工业需求。而常温吸附分离被认为是当前高能耗工业深冷分离最有可能的替代技术, 其关键是吸附剂。而工业烃的分子尺寸主要分布在亚纳米 (<1 nm) 范围, 因此, 研究探索与之尺寸相当的亚纳米孔吸附剂及其对结构相似工业烃的传质分离规律是化工吸附分离领域的前瞻性应用基础科学问题。基于这一研究主题, 课题组近年的研究工作主要面向石化和电子工业烃类化合物高效分离提纯的重大需求, 聚焦结构相似工业烃的共吸附制约吸附分离效率提高这一具有共性的瓶颈问题, 从吸附剂的亚纳米孔解析、亚纳米孔的均匀构筑与调控、及其在结构相似工业烃选择性分离提纯机制及过程强化这三个层面展开研究。研究工作主要包括: (1) 发展了碳基吸附剂亚纳米孔的梯级分子探针解析新方法; (2) 建立了碳基吸附剂亚纳米孔的均匀构筑及其埃米精细调控的新方法, 实现了一系列结构相似石化烃的高选择性筛分分离; (3) 发展了热力学-动力学和反应-吸附等协同调控新机制, 实现了结构相似电子氟碳烃分离提纯的过程强化。

D20

基于金属-有机骨架材料的浆液气体分离技术研发

刘蓓*、陈光进

中国石油大学(北京)

典型的化工过程主要由化学反应和产物分离等子过程组成, 其中分离过程最为庞大、复杂, 能耗也最高, 常占到整个化工过程的 70-80 %。如碳排放体系中 CO₂ 捕集分离能耗已成为制约 CCUS 技术产业化的关键瓶颈。因此, 长期以来研究人员一直致力于研发低耗高效的分离技术。金属-有机骨架 (MOF) 材料作为一类新型多孔材料在气体的吸附分离和膜分离领域展现出了广阔的应用前景。传统上提高 MOF 材料的吸附分离性能往往通过材料本身的结构调控, 但这会增加材料合成的复杂程度和成本、降低工业应用的经济性。另一方面, 有些易于合成且原料成本较低的 MOF, 如 ZIF-8, 在吸附分离性能方面往往表现不佳, 这也降低了其工业应用的吸引力。报告人等基于固-液界面调控理念, 提出吸收-膜-吸附耦合分离的技术思想, 利用基于 ZIF-8 制备的浆液在 CO₂ 捕集分离、天然气中乙烷经济回收、丙烷/丙烯及 C₄ 烃高效分离等方面取得系列进展, 形成了一种新型的 MOF 浆液吸着分离技术并推进到工业应用。如 CO₂ 捕集分离方面, 在中试实验的基础上, 在新疆风城油田已建成超稠油开采伴生气脱碳工业示范装置, 设计负荷 12 万 Nm³/天。吸收温度 37-40 °C、吸收压力约 0.9 MPa, 常压 65 °C 左右解吸, 可以将 CO₂ 浓度从 35 - 42 mol% 降到

3 mol%以下。

D20

功能多孔框架材料用于低浓度污染物捕获

李柏延*

南开大学

多孔晶态材料因其高度有序的孔道结构、可调控的化学环境以及丰富的功能位点，有望实现目标分子的高效选择性吸附与分离。课题组发展了系列吸附剂构筑策略，开发了一系列用于低浓度污染物捕获的功能导向型多孔晶态材料。例如通过自适应形状记忆策略构筑的 HOF-NKU-1，可用于高效捕获和分离烟气中的 SO₂。HOF-NKU-1 展示了创纪录的 SO₂/CO₂ 选择性 (7331) 和极高的 SO₂ 存储密度 (3.27 g cm⁻³)。其低水吸附性能、自适应和形状记忆多孔特性使其在高湿度条件下仍能实现超高动态 SO₂ 吸附与回收；利用离子位点强化构筑的系列放射性碘吸附剂首次突破了传统银基吸附剂的容量上限，并有效解决了其无法循环的难题。

参考文献

- [1] Li, L.; Zhang, X.; Lian, X.; Zhang, L.; Zhang, Z.; Liu, X.; He, P.; Li, B.*; Chen, B.*; Bu, X.*; Nat. Chem. 2025, 17, 727-733.
- [2] Zhang, Z.; Dong, X.; Yin, J.; Li, Z.; Li, X.; Zhang, D.; Pan, T.; Lei, Q.; Liu, X.; Xie, Y.; Shui, F.; Li, J.; Yi, M.; Yuan, J.; You, Z.; Zhang, L.; Chang, J.; Zhang, H.; Li, W.; Fang, Q.; Li, B.*; Bu, X.*; Han, Y.; J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 6821-6829.
- [3] Liu, X.; Zhang, Z.; Shui, F.; Zhang, S.; Li, L.; Wang, J.; Yi, M.; You, Z.; Yang, S.; Yang, R.; Wang, S.; Liu, Y.; Zhao, Q.; Li, B.*; Bu, X.*; Ma, S.; Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202411342.

报告人简介

李柏延，南开大学材料科学与工程学院特聘研究员。博士毕业于吉林大学。曾在美国南佛罗里达大学、罗格斯大学、沙特阿卜杜拉国王科技大学从事科学研究工作。在 Nat. Chem.、Nat. Commun.、JACS、Angew 等学术期刊上发表 60 余篇论文，被引用 7000 余次，多篇文章入选 ESI 高被引论文。

D20

柔性多孔框架材料用于温室气体的捕获和分离

杨庆远*

西安交通大学

六氟化硫 (SF₆) 作为一种电子气体,具有良好的化学稳定性、耐腐蚀性和电绝缘性,在半导体、电力设备、航空航天、金属加工、医疗等领域应用广泛。但六氟化硫也是《联合国气候变化框架公约》中重点控制的温室气体之一,它的温室效应是二氧化碳的 22800 倍,《京都议定书》将其列为六大温室气体之一。各行业中使用的六氟化硫仅有一小部分被回收利用,大部分被直接排放到空气中,因此六氟化硫气体的高效回收与减弱其直接排放所导致的温室效应,具有重要的实际意义。

最近我们开发了系列具有不同孔结构的金属-有机框架 (MOF) 材料,用于六氟化硫的捕获。研究表明,具有一维纳米孔道且孔尺寸与 SF₆ 分子动力学直径相近的 MOF 材料具有良好的六氟化硫捕获效果。MOF 材料 Ni(ina)₂ 的孔径为 0.6 nm, 和 SF₆ 的分子大小 (0.52 nm) 非常匹配,因此该材料表现出优良的六氟化硫捕获效果,Ni(ina)₂ 在 298K (0.1 bar) 下的 SF₆ 吸附量为 2.39 mmol/g,其 SF₆/N₂ 分离比高达 375。理论模拟计算和单晶结构解析表明 Ni(ina)₂ 框架和六氟化硫分子之间存在较强的作用力,可以从低浓度 SF₆-N₂ 混合气中选择性地捕获六氟化硫分子。动态突破实验也进一步表明 Ni(ina)₂ 具有良好的 SF₆/N₂ 实际

分离效果，该工作为工业上含氟电子气体的捕获提供了思路。

D20

离子聚合物结构调控及吸附分离性能研究

锁显*

浙江大学杭州国际科创中心

高选择性、低能耗分离技术的研究是碳捕集与高纯化学品制造等国家重大战略需求的关键技术支撑。其中极大的挑战来自碳捕集过程能耗较高、结构相似组分分离选择性不足、痕量组分脱除效率低等。高性能材料制备的核心在于分子识别位点的设计和结构性质的精准调控。离子多孔聚合物兼具离子液体和多孔聚合物双重特性，具有独特的化学环境、结构多样性和优异的物理化学稳定性等优点，有望克服现有材料的不足，为分离与捕集技术的发展提供契机。精准调控离子位点密度和孔径分布，强化分子识别能力和扩散传质性能，可实现结构相似乙炔/二氧化碳、二氧化硫/二氧化碳等气体高选择性分离；发展含氧阴离子功能化框架材料孔道结构调控策略，通过微孔结构的合理构建，可实现对二氧化碳吸附性能的增强。

本报告汇报离子多孔聚合物材料结构性质调控策略，及在结构相似气体分离、碳捕集等研究中的最新进展，研究分离强化机制，探讨离子多孔聚合物设计合成及气体分离与捕集中的关键科学问题

D20

HOFs 材料孔道调控及碳烃分子分离机制

高俊阔*

浙江工业大学

实现碳烃混合气的高效吸附分离是学术界与工业界长期关注的重要科学问题，对实现中国碳达峰、碳中和具有重要战略意义[1]。晶态多孔有机框架材料包含金属-有机框架材料（MOF）、共价-有机框架材料（COF）和氢键-有机框架材料（HOF）等，具有结构可调、易功能修饰等优点，在碳烃混合气的分离领域展现重要应用前景[2]。但有机框架材料孔道结构的精准调控和对气体分子的定向识别作用还存在巨大挑战。针对这些难题，我们构筑出具有高密度开放镍位点、极化表面以及致密孔道的 MOF 材料。孔道内对气体分子的多个结合位点以及其对具有相似物化性质的 C_2H_2 和 CO_2 气体的不同结合方式，使得 MOF 材料兼具高的 C_2H_2 吸附量和出色的 C_2H_2/CO_2 选择性（1bar 和室温条件下 IAST 选择性 24）[3]。同时，我们提出了溶剂诱导自组装原理，对 HOF 材料孔道尺寸和多重吸附位点进行精准调控，实现了 HOF 材料高效分离和纯化丙烯气体，解决了物化性质近似的气体分子难以吸附分离的难题，揭示了 HOF 对丙烯和丙烷分子的识别机理和吸附位点[4,5]。

参考文献

- [1] Sholl, D. S.; Lively, R. P.; Seven Chemical Separations to Change the World, *Nature*, 2016, 532: 435-437.
- [2] Li, H.; Li, L.; Lin, R.-B.; Zhou, W.; Xiang, S.; Chen, B.; Zhang, Z.; Porous Metal-Organic Frameworks for Gas Storage and Separation: Status and Challenges, *EnergyChem*, 2019, 1: 100006.
- [3] Gao, J.; Qian, X.; Lin, R.; Krishna, R.; Wu, H.; Zhou, W.; Chen, B.; Mixed Metal-Organic Framework with Multiple Binding Sites for Efficient C_2H_2/CO_2 Separation, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, 59: 4396-4400.
- [4] Gao, J.; Cai, Y.; Qian, X.; Liu, P.; Wu, H.; Zhou, W.; Liu, D.-X.; Li, L.; Lin, R.-B.; Chen, B.; A Microporous Hydrogen-Bonded Organic Framework for the Efficient Capture and Purification of Propylene, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60: 20400-20406.
- [5] Cai, Y.; Gao, J.; Li, J.-H.; Liu, P.; Zheng, Y.; Zhou, W.; Wu, H.; Li, L.; Lin, R.-B.; Chen, B.; Pore Modulation of Hydrogen-Bonded Organic Frameworks for Efficient Separation of Propylene, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, 62: e202308579.

D20

盐湖分散元素高效吸附分离材料设计与制备

刘大欢*

北京化工大学

我国盐湖卤水存在种类丰富的稀有元素，如硼、铷、铯等元素具有巨大的经济利用价值。近年来，国家提出要“加快建设世界级盐湖产业基地”，因此，加速开发我国盐湖卤水中多种稀有元素资源的高效提取材料与技术，具有着重要的经济价值和战略意义。

报告主要介绍团队在用于盐湖分散元素高效吸附分离的多孔材料分子设计与可控制备方面的研究进展。以 MOF/COF 以及 MOF/COF 复合材料为主，围绕合理构效关系建立与高效按需筛选关键科学问题，根据分离体系结构化学特征，构建了权重材料结构片段库、高通量复合材料构筑算法和大规模结构数据库；借助结合机器学习的多尺度理论计算方法高通量筛选材料，实验构筑了离子特异性识别缺陷位、气凝胶复合材料、新型绿色萃取体系等新结构，获得系列可从盐湖卤水中选择性提取硼、铷、铯等资源的分离材料；基于 3R 理念提出了 MOF 连续/低成本制备方法，开发的高效吸附分离工艺与装置效果优于已有工艺。这些成果有助于提升我国对于高效分离材料的设计开发能力，大幅度减少材料开发周期，也可以为其他领域材料的开发提供借鉴。

D20

用于气体分离的晶态多孔材料

吴明燕*

中国科学院福建物质结构研究所

气体分离和纯化是化学和化工领域的关键过程，与国民经济发展息息相关。传统的基于饱和蒸气压和溶解性的精馏法和液体吸附法经常需要极低的温度并伴随着巨大的能源消耗。因此，亟需开发一种能够在常温常压下可实现高效气体分离的新方法。目前，基于吸附的气体分离方法虽具有能耗低、选择性和操作简单等优点，但是仍有一些科学问题需要解决：①晶态多孔材料的合成方法学尚不完善，仍需探索精确调控晶态多孔材料结构的方法；②对于不同的气体分离体系，缺乏精确修饰孔道环境（孔尺寸、电子环境）的有效策略，分离效率亟待提升。针对上述问题，我们创新性地利用“取代基控制配体构象”的合成策略，实现了具有不同孔道结构的晶态多孔材料的可控制备，并以此为基础通过精确调孔道环境实现了高选择性气体分离。

参考文献

- [1] Chen, C.; Li, M.; Zou, S.; Wei, W.; Hong, M.; Wu, M., Reversible Trace-water-buffering Frameworks for Efficient Humid Methane Purification. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, e202510669.
- [2] Zou, S.; Zhang, W.; Chen, C.; Song, D.; Li, H.; Li, Y.; Yang, J.; Krishna, R.; Wu, M., Electrostatic Potential Matching in an Anion-Pillared Framework for Benchmark Hexafluoroethane Purification from Ternary Mixture. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, e202505355.
- [3] Cai, L. Z.; Yu, X. Y.; Wang, M. S.; Yuan, D. Q.; Chen, W. F.; Wu, M. Y.; Guo, G. C., In Situ Stimulus Response Study on the Acetylene/Ethylene Purification Process in MOFs. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, *64*, e202417072.
- [4] Ji, Z.; Li, Q.; Zhou, Y.; Krishna, R.; Hong, M.; Wu, M., Synergistic C₂H₂ Binding Sites in Hydrogen-Bonded Supramolecular Framework for One-Step C₂H₄ Purification from Ternary C₂ Mixture. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *63*, e202411175.

D20

基于氮气捕获与分离的多孔吸附材料研究

杨江峰*

太原理工大学

在全球能源结构清洁化转型与工业绿色化需求迫切的背景下，高效氮气捕获与分离技术对提升天然气品质、破解空分制氧能耗瓶颈意义重大，吸附分离技术因低能耗、易操作成为替代传统低温精馏工艺的核心方向，开发高性能多孔吸附材料是其突破核心。金属有机框架（MOFs）材料通过配位化学设计构建的不饱和金属位点，形成独特的化学吸附机制，通过反馈 π 键作用实现对氮气分子的强亲和力捕获。通过阴离子后置换、取代基诱导策略调控不饱和金属位点路易斯酸性，可进一步增强 MOFs 的氮气吸附与氮气/氧气、氮气/甲烷的分离能力。沸石材料基于分子筛分效应实现氮气/甲烷分离，通过骨架组成优化、阳离子类型调控与高温晶化原位掺杂等策略，开发出具有狭窄超微孔结构的新型沸石材料，实现对极小尺寸差异的氮气与甲烷的分子筛分。从八元环到十二元环孔道体系的拓展结合传质性能优化，缓解了吸附容量与选择性的“跷跷板”效应，为低品质天然气脱氮提供了兼具分离能力与经济性的解决方案。两类材料从化学吸附与物理筛分维度，构建了氮气捕获与分离的多元技术路径。该研究为工业气体分离提供新型材料范式，以材料创新驱动能源化工绿色化变革，助力“双碳”目标下资源高效利用与循环经济体系构建。

D20

A Robust Zr(IV)-Based Metal-Organic Framework Featuring High-Density Free Carboxylic Groups for Efficient Uranium

Bin Wang*

Soochow University

The extraction of uranium from aqueous environments, including the ocean and radioactive wastewater, represents a significant challenge with profound implications for energy resources and environmental remediation. This work presents the design and synthesis of a novel highly stable carboxylated metal-organic framework, BUT-12-3COOH, which achieves excellent U(VI) extraction ability from water. BUT-12-3COOH features high free carboxylic groups, exceptional chemical stability, fast kinetics, and high adsorption capacity for U(VI). Dynamic sorption experiments further demonstrated the potential of BUT-12-3COOH in treating real radioactive wastewater. The mechanisms for the U(VI) capture of BUT-12-3COOH are investigated through the combination of EDS, FT-IR, and XPS analysis. The results of this study underscore the promising utility of BUT-12-3COOH as an effective sorbent for extracting radionuclides from environmental specimens and liquid nuclear waste streams.

D20

化学稳定 MOFs 构筑与应用探索

何涛*

北京工业大学

MOFs 因其高度可设计性、比表面积大和孔隙结构多样性而在气体存储、分离、催化等领域展现出广阔应用前景。然而，MOFs 在实际应用中常面临化学稳定性不足的问题，尤其是在水、酸或碱等苛刻环境中易发生结构坍塌，极大限制了其进一步的发展。吡啶类配体因其与低价金属离子具有强配位能力，近年来被广泛用于构筑稳定 MOF 材料。

本研究聚焦于以吡啶类配体为构筑单元的化学稳定 MOFs 的合成与性能探索。通过吡啶配体与过渡金属离子（如 Ni(II)、Co(II) 和 Zn(II)）的溶剂热反应，成功构筑了系列新型稳定 MOFs，并首次通过单晶 X 射线衍射确定了 Ni₄ 吡啶 MOF (BUT-32) 以及多种 Ni₈-吡啶 MOFs（包括 BUT-2、BUT-3、BUT-4、BUT-48、

BUT-49、BUT-123) 的结构, 揭示了新的拓扑结构, 如 BUT-48/49 的 pcu 拓扑和 BUT-123 的(3,12)连接网络。这些构筑的 MOFs 展现出良好的化学稳定性。进一步探索了这些稳定 MOFs 在污染物去除和非均相催化等方面的应用性能。

本研究为开发高稳定 MOF 材料提供了新的构筑策略和结构设计思路, 拓展了稳定 MOFs 在极端条件下的应用潜力, 为 MOFs 在多相催化和痕量污染物去除等实际应用中的进一步探索奠定了基础。

D20

光响应共价有机框架光催化性能研究

李培洲*、栾天翔、孔朔

山东大学

开发用于氧化反应的高效光催化剂在化学合成中意义重大但仍具有挑战性。本课题组利用三苯胺和茚四酮做原料在醋酸铵存在下成功合成了一种咪唑键连接的共价有机框架(COF), PyNTB-CO。结构表征表明其框架结构中形成了供体-受体- π -受体-供体(D-A- π -A-D)片段。该 COF 具有光电半导体特性和高光响应电荷分离和迁移活性, 实验和理论计算表明其主要归因于其独特的 D-A- π -A-D 结构特征。光催化实验显示其可光照触发 O^2 生成, 并可作为甲苯的有氧氧化和醛的酰胺化反应的高效光催化剂。该工作表明在框架材料中引入光致变色单元以构建 π -共轭的 D-A 分子, 有望构建可用于光催化氧化的高效光催化剂。

D20

有机共轭配位聚合物的电荷传输机制及热电性质

卢阳*

重庆大学

近年来, 二维共轭配位聚合物在有机电子学领域展现出广阔的应用前景, 然而其电荷传输机制仍缺乏系统深入的研究, 成为制约材料性能优化与器件设计的关键科学问题。本报告围绕二维共轭配位聚合物的结构-性能关系, 系统探讨了有机共轭配体的分子结构对电荷传输机制的影响规律。基于此, 报告人提出了二维共轭配位聚合物的配体分子设计原则, 发展了一系列高结晶度二维共轭配位聚合物体系, 并成功拓展了其在有机热电与有机量子材料领域的应用。本研究为理解共轭配位聚合物的电荷传输机制提供了新视角, 同时为高性能有机电子材料的开发开辟了新途径。

关键词: 有机半导体, 有机热电, 共轭配位聚合物, 分子材料与器件

参考文献

- [1] Lu, Y., et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, DOI: 10.1021/jacs.4c18681.
- [2] Lu, Y., et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 2574.
- [3] Lu, Y., et al. *Acc. Chem. Res.* **2024**, 57, 1985.
- [4] Lu, Y., et al. *Nat. Commun.* **2022**, 13, 7240.

D20

分子印迹多孔芳香骨架海水提铀

元野*

东北师范大学

海水中溶解了 45 亿吨的铀, 高效的海水提铀能够保证核工业的可持续发展, 进而满足人类未来万年的能源需求。然而, 海水中铀元素浓度极低 (3.33 ppb) 且存在大量干扰离子, 如何增强吸附材料对铀酰

离子的结合能力和选择性是其要解决的关键性科学问题。多孔芳香骨架(Porous Aromatic Framework, PAF)是以芳环构筑的分子基块通过碳-碳共价键偶联形成的有机多孔材料。汇报人借助 PAF 材料的刚性骨架和高物理/化学稳定性等优点,提出了分子印迹技术在多孔材料制备化学中的组装策略。在大比表面积和多级孔道结构中设计并镶嵌具有特殊空间构型的分子印迹位点,将印迹技术的高识别能力和多孔材料的快速主体作用结合到一起。以多孔芳香骨架(PAF)对目标物质的特异性分离为研究目标,设计合成了近百个新型 PAF 材料,取得了系列成果:1. 调变骨架组分与结构,提出了分子印迹技术在 PAF 材料制备化学中的组装策略;2. 优化孔道尺寸与孔壁极性,发展了 PAF 材料的孔道表面工程技术;3. 针对国际难题--海水提铀,实现了高选择性、快速率、高容量的铀元素提取。

参考文献

- [1] Yuan, Y. et al. High-capacity uranium extraction from seawater through constructing synergistic multiple dynamic bonds, *Nature Water*, 2025, 3: 89-98.
- [2] Yuan, Y. et al. Photocatalytic extraction of uranium from seawater using covalent organic framework nanowires, *Journal of the American Chemical Society*, 2024, 146(33): 23566-23573.
- [3] Yuan, Y. et al. Selective scandium ion capture through coordination templating in a covalent organic framework, *Nature Chemistry*, 2023, 15: 1599-1606.
- [4] Yuan, Y. et al. Constructing mechanical shuttles in a three-dimensional (3D) porous architecture for selective transport of lithium ions, *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, 62: e202216549.
- [5] Yuan, Y. et al. Constructing uranyl-specific nanofluidic channels for unipolar ionic transport to realize ultrafast uranium extraction, *Journal of the American Chemical Society*, 2021, 143(36): 14523-14529.

D20

MOF 材料绿色制备及气体分子捕集

陈杨*

太原理工大学

金属有机框架材料(MOF)因其独特的结构可设计性和优异的孔隙特性,在气体存储、分离、催化等领域展现出广阔的应用前景。在气体分离领域,通过精准调控 MOF 的孔道结构和表面化学性质,可以实现对特定气体分子的高效识别与分离,为工业气体纯化、碳捕集等关键过程提供创新解决方案。另一方面,MOF 材料广泛应用的关键之一在于其能否低成本和绿色制备。目前,传统的 MOF 合成方法往往涉及高温高压和有机溶剂的使用,制约了其大规模工业应用。因此,开发低能耗、无毒害的绿色制备方法成为推动 MOF 材料应用的重要环节。介绍柔性与功能化多孔材料在低碳烃分离和 CO₂ 捕集领域的研究进展,了解柔性结构动态响应特性,探讨其在温度、压力和气体分子刺激下的结构转变行为及其分离机制;通过孔道工程和官能团修饰策略,优化 MOF 的吸附选择性和分离性能,为发展新一代高效气体分离材料提供更多思路。

D20

多孔材料吸附分离表征方法的研究与思考

殷小安*

贝士德

吸附分离技术能够通过材料的表面性质,孔结构实现物质的高效分离。在化工生产中这种技术被广泛应用于气体分离。而分离技术中核心的吸附分离材料被广泛研究与应用。

报告主要围绕如何高效,准确的评价多孔材料的吸附性能,包含比表面积,孔结构测定,单组分吸附量,吸附动力学,循环吸附寿命,多组分竞争吸附分离性能评价等。通过贝士德分析测试中心大量的吸附

表征测试经验以及与众科研工作者的合作，发现样品的活化方式（原位与非原位活化），真空度（机械泵与分子泵活化），“氮污染”等因素都会对测试结果产生显著的影响。同时报告还将介绍恒压吸附动力学，全自动循环吸附寿命，穿透曲线准确定量方式等。

D20

金属有机框架材料孔工程与气体吸附分离

叶应祥*、郑欣怡、龚玲珊

福建师范大学

乙炔 (C_2H_2) 被广泛地应用于燃料和有机化工基础原料。乙炔的生产过程中通常伴随着少量的二氧化碳等杂质，乙炔的纯化是工业中亟待解决的关键问题。由于乙炔和二氧化碳分子具有非常相近的理化性质和分子尺寸，使得两者的分离十分具有挑战性。基于 ACS 拓扑网格 MOFs 孔空间分割法 (PSP) 的孔径可调特性和孔壁 Lewis 碱位点可识别 C_2H_2 的特性，我们首次提出将 PSP 发展为一种对 MOFs 的双功能优化的可设计性的新思路，用于常温常压下挑战性 C_2H_2/CO_2 混合气的分离[1]。经过 PSP 功能化后，MOFs 材料的稳定性和比表面积都得到显著提升，并且 C_2H_2 的吸附量远高于 CO_2 。此外，基于 C_2H_2 和 CO_2 分子在四极矩参数和表面静电势的差异，我们提出 MOFs 孔表面氢键陷阱构筑的双功能优化思路：孔表面氢键受体陷阱不仅可以通过多重氢键作用选择性捕获 C_2H_2 分子，同时还可以保持多孔材料原有的孔体积，有望突破当前多孔材料在乙炔吸附容量和分离选择性之间的权衡问题，得到适合于挑战性 C_2H_2/CO_2 混合气高效分离的多孔材料[2]。基于 MOFs 的网格化学原理，通过选择不同的 V 型有机配体对孔表面氢键陷阱进行调控，获得的微孔材料 (MIL-160) 对乙炔显示出超高的吸附容量 ($191\text{cm}^3/\text{g}$ 或 $213\text{ cm}^3/\text{cm}^3$)，在分离潜力和捕获容量方面为 C_2H_2/CO_2 分离建立了新的基准。

D20

面向液相分离体系的复合膜制备及应用

冯英楠*

北京理工大学化学与化工学院

膜分离技术是一种高效分离过程，包括超滤、纳滤、膜蒸馏等膜过程已广泛应用于水处理、食品加工、医药制造等领域。面向液相分离体系的膜技术在实际应用中往往面临渗透性与选择性的制约效应 (“trade-off”效应) 和膜污染问题两个关键性挑战。作为分离过程中料液与膜的界面，复合膜的表面结构与性质对于膜分离过程的效率提升和优化至关重要。本次报告聚焦于膜结构及表面性质调控，通过喷雾辅助相转化、表面晶体原位生长等方法构建复合膜表面微纳结构并调节浸润性与孔道特性，实现膜分离性能与抗污染性能提升，并在海水淡化、食品浓缩等应用中展现良好的分离效果。

D20

超分子吸附分离材料

周炯*

东北大学

大环主体是超分子化学研究的重要工具，开发具有结构和功能特色的新型大环主体是超分子化学领域的一个永恒的主题。尽管这些年来，基于相同重复单元组成的大环主体的研究取得了巨大的进展，然而如何有效设计合成具有不同类型的重复单元的功能性新型大环主体仍然存在很大的挑战。另一方面，碳氢化合物分离广泛应用于能源、化工、环保等领域。现有的碳氢化合物吸附分离技术通常是基于多孔材料（如

金属有机骨架、共价有机骨架、多孔有机笼)来实现的。这些多孔材料具有比表面积大、孔道有序等优点,但也存在合成复杂、稳定性差、可重复使用性低等缺点。非多孔自适应晶体作为一种新型的吸附分离材料,在碳氢化合物分离纯化领域具有广阔的应用前景。相较于传统的大环主体柱芳烃,杂芳烃在吸附分离方面具有独特的优点。本研究将重点介绍一种使用杂芳烃非多孔自适应晶体的环保节能吸附分离策略。

D20

MOF-on-MOF 催化材料

刘超*

华东师范大学

定向构筑组分多元化、微/纳结构多样化的金属有机框架(MOF)纳米结构对于实现多性质、多功能一体化,进而增强材料的催化性能具有重要意义。我们发展了基于 MOF 纳米颗粒各向异性生长及转化的界面定向合成体系,实现 MOF-on-MOF 异质结构的精准构筑和组装基元的催化功能协同。发展了多重选择性生长、配体竞争及界面诱导转化等合成新方法,有效调控纳米 MOF 生长机制、不同材料界面相互作用及 MOF 转化行为,进而精确控制复合体系中组成单元的空间分布及组合方式,制备出一系列区别于已有 MOF 材料的新型 MOF-on-MOF 组装材料。进一步探究了 MOF-on-MOF 异质结构在催化领域尤其是小分子转化方面(如两电子氧还原合成 H_2O_2 、硝酸盐还原合成氨等)的应用潜力,提出了异质 MOF 催化界面调控新机制,实现了高价值化学品的高效电/光合成。

参考文献

- [1] Chaoqi Zhang, Chao Liu*, Chengzhong Yu*, et al., Nature Sustain., 2025, DOI: 10.1038/s41893-025-01538-4.
- [2] Tong Bao, Chengzhong Yu*, Chao Liu* et al., Adv. Mater., 2025, 37, 2500399.
- [3] Yamin Xi, Chao Liu*, Chengzhong Yu*, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2025, DOI: 10.1002/202505046.
- [4] Jiaxin Li, Chao Liu*, Chengzhong Yu*, et al., Adv. Mater., 2025, 37, 2416210.
- [5] Ling Yuan, Chao Liu*, Chengzhong Yu*, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2025, 64, e2412340.
- [6] Yamin Xi, Chengzhong Yu*, Chao Liu*, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2025, 64, e202413866.
- [7] Yingying Zou, Chengzhong Yu*, Chao Liu*, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202409799.
- [8] Yamin Xi, Chengzhong Yu*, Chao Liu*, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202409163.
- [9] Chaoqi Zhang, Chengzhong Yu*, Chao Liu*, et al., Adv. Mater., 2024, 36, 2313844.
- [10] Zi-Meng Li, Chao Liu*, Cheng-Zhong Yu*, Pei Yuan*, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202314266.
- [11] Ying-Ying Zou, Chao Liu*, Cheng-Zhong Yu*, et al., Nature Commun., 2023, 14, 5780.
- [12] Chaoqi Zhang, Chao Liu*, Chengzhong Yu*, et al., J. Am. Chem. Soc., 2023, 145, 7791-7799.
- [13] Tong Bao, Chengzhong Yu*, Chao Liu* et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2022, 61, e202209433.

最终交流类型: 口头报告

D20

协同催化助力高效催化加氢及电催化

朱丽华*

江西理工大学

负载型催化剂广泛用于催多相化加氢及电催化,尤其是多元金属(金属氧化物或金属氢氧化物)负载型催化剂,多组分之间的协同对其催化性能及稳定性至关重要,以下主要以多相催化加氢和电催化为例。催化加氢:设计与合成了“小岛状贵金属团簇或单原子负载于过渡金属/过渡金属氧化物(或氢氧化物)纳米颗粒”新型结构催化剂(NM/TM/TMO(TMOH)/C)(如图 A),表现出优异的催化加氢性能,研究了其催化加氢的协同机理[1-4]。电催化:提出利用贵金属-贵金属(过渡金属)-过渡金属氢氧化物相关物种协同

效应（如图 B），构筑具有新型纳米结构的多元金属催化剂。以高效电催化甲醇、乙醇氧化和电解水析氢为模型反应，设计合成了 $\text{PtRu}/\text{Ni}(\text{OH})_2/\text{C}$ 、 $\text{Ru}_1\text{Pd}/\text{Ni}(\text{OH})_2/\text{C}$ 和 $\text{Pt}_1\text{Cu}/\text{Ni}(\text{OH})_2/\text{C}$ 等一系列多元金属催化剂。进一步采用原位拉曼与红外及 DFT 计算证明了催化剂在电催化中的协同作用机理[5-9]。

参考文献

- [1] Lihua Zhu,* Y. Sun, H. Zhu, et al., ACS Catal., 2022, 12: 8104-8115.
- [2] Lihua Zhu,* H. Zhu, M. Shakouri, et al., Appl. Catal. B, 2021, 297, 120404.
- [3] Lihua Zhu,* H. Zhang, H. Zhu, et al., J. Catal., 2022, 413: 978-991.
- [4] Lihua Zhu,* H. Zhang, N. Ma, et al., J. Catal., 2019, 377: 299-308.
- [5] A. Pei,# R. Xie,# Lihua Zhu,#, * et al., J. Am. Chem. Soc., 2025, 147, 3185-3194.
- [6] A. Pei,# R. Xie,# Lihua Zhu,#, * et al., Energy Environ. Sci., 2023, 16, 1035-1048.
- [7] A. Pei,# G. Li,# Lihua Zhu,#, * et al., Adv. Funct. Mater., 2022, 2208587.
- [8] S. Zhang,# A. Pei,# G. Li,# Lihua Zhu,* et al., Green Chem., 2022, 24, 2438-2450.
- [9] Qian Yang,# Sifan Zhang,# Lihua Zhu,*,# et al., J. Energy Chem., 2024, 90, 327-336.

最终交流类型：口头报告

D20

含硼二维石墨炔衍生物的结构调控和应用研究

尹晓东*

华东师范大学

在“双碳”背景下，新型的光、电功能材料如光/电催化材料、电致发光材料、光电转化材料等是减小碳排放，提高能源利用效率的解决策略之一，也是形成新质生产力的关键。二维光电材料具有多种关键特性使它们非常适合于光电应用，例如可调谐带结构、大的激子结合能、强光-物质相互作用、高载流子迁移率、分层结构等，在光电材料领域具有巨大的潜力。其中，有机二维发光材料由于其具有可控合成、易组装、灵活结构、优异的光电性能、易于大规模制备等优势，引起人们的广泛关注。石墨炔材料及其衍生物作为一种新型的二维碳材料，在光、电、磁功能材料领域的展现出巨大应用潜力。石墨炔因此被科睿唯安在 2020 年评选为化学和材料科学领域最热门的 10 个研究方向之一。人们发现通过对石墨炔骨架的掺杂，能够有效的调控其能带结构，进而产生独特的光电性质，有望成为一类新型的有机二维光电子材料。

本研究基于硼元素独特的价电子结构，通过精准调控其在共轭体系中的 $p-\pi^*$ 共轭作用，成功设计并制备了系列含硼二维石墨炔衍生物。我们创新性地构建了三芳基硼-荧光团二元单体，利用炔炔偶联反应构筑出具有高效发光特性的硼掺杂二维共轭骨架。通过硼-氟配位作用实现了二维材料的有效剥离，成功制备出少层二维纳米片。系统研究证实，所得硼杂石墨炔衍生物具有高比表面积和独特的气体选择性吸附特性。值得注意的是，这类二维纳米片同时展现出较高的荧光量子产率和特异性氟离子识别能力，这种集发光传感与气体吸附于一体的多功能特性，使该材料成为新型二维发光化学传感器的理想候选体系，为有机二维光电子材料的功能化设计提供了新思路。

参考文献

- [1] F. Zhao, G. Liao, M. Liu, T. Wang, Y. Zhao, J. Xu, X. Yin*, Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202317294.
- [2] K. Liu, Z. Jiang*, F. Zhao, W. Wang, F. Jäkle*, N. Wang, X. Tang, X. Yin*, and P. Chen, Adv. Mater. 2022, 2206594.
- [3] G. Liao#, J. Lei#, S. Li, M. Liu, Y. Qiao, K. Liu, N. Wang, Q. Niu*, X. Yin*, Adv. Optical Mater. 2024, 12, 2301242.

最终交流类型：口头报告

D20

面向能源转换与储存的共价有机框架材料的分子设计与功能化研究

刘从学*

北京大学深圳研究生院

共价有机框架（COFs）作为一种高度有序且具备分子可编程特性的多孔晶态材料，因其可调的化学功能性和优异的结构稳定性，在能源转换与储存领域展现出独特的应用潜力。本研究围绕COFs的结构可设计性与功能调控，分别针对储能和能源转换方向开展了深入研究：在锂离子储能方面，通过引入吡啶鎓磺基甜菜碱基团，实现了COF纳米片的自剥离组装，有效构建了连续的锂离子迁移通道，室温离子电导率达 $10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$ ，且在宽电化学窗口内展现出优异的电化学稳定性与锂金属界面兼容性，优于传统聚合物基电解质；在光催化领域，基于菲咯咪唑单元设计的共轭COF，通过调控其 π 共轭网络与D - A分布，提升了可见光吸收与电荷分离效率，实现了高效的光催化析氢（产氢速率达到 7.4 mmol/g/h ），并在循环测试中保持稳定的催化活性。该研究从分子层面揭示了COFs结构调控对性能优化的关键作用，展示了COFs作为新一代多功能能源材料的广阔前景，为推动能源转换与储存技术的发展提供了新的设计理念与研究范式。

关键词：共价有机框架；锂离子电导；光催化析氢；分子可编辑性；能源材料

最终交流类型：口头报告

D20

Ethane Triggered Gate-Opening in a Flexible-Robust Metal-Organic Framework for Ultra-high Purity Ethylene Purification

Lu Zhang, Libo Li*

Taiyuan University of Technology

Priority recognition separation of inert and larger ethane molecules from high-concentration ethylene mixtures instead of the traditional thermodynamic or size sieving strategy is a fundamental challenge. Herein, we report ethane triggered gate-opening in the flexible-robust metal-organic framework Zn(ad)(min), the 3-methylisonicotinic acid ligand can spin as a flexible gate when adsorbing the cross-section well-matched ethane molecule, achieving an unprecedented ethane adsorption capacity ($62.6 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$) and ethane/ethylene uptake ratio (3.34) under low-pressure region (0.1 bar and 298 K). The ethane-induced structural transition behavior has been uncovered by a collaboration of single-crystal X-ray diffraction, in situ variable pressure X-ray diffraction and theoretical calculations, elucidating the synergetic mechanism of cross-section matching and multiple supramolecular interactions within the tailor-made pore channels. Dynamic breakthrough experiments have revealed the outstanding separation performance of Zn(ad)(min) during the production of ultra-high purity ethylene (> 99.995 %) with a productivity of up to 39.2 L/kg under ambient conditions.

最终交流类型：口头报告

D20

高纯活性氧化铝的制备及其形貌调控机制

唐文奇*

上海交通大学

随着科技的发展，氧化铝在催化、吸附、生物材料等领域需求也急剧增加，这对氧化铝的纯度、比表面积、孔径结构提出了更高的要求。然而在制备高纯氧化铝的过程中，保持高比表面积的特性是现研究难点。在氧化铝和其前驱体制备过程中，Al、O、H 原子的空间排列形成了多种相，相的转化对氧化铝的形貌与性能影响重大。

本工作以高纯铝和超纯水为原材料利用 $\text{Al-H}_2\text{O}$ 反应法制备超高纯氧化铝，探索不同官能团对表面化学势能的影响、抑制剂对产物演化过程的抑制效应、外部超声对晶体生长过程的作用等，阐明了 $\text{Al-H}_2\text{O}$

反应过程中氧化铝前驱体的微观组织控制机理和粒度控制方法，最终制备出了高比表面积多孔高纯氧化铝粉体。本工作的主要研究结果如下：

首先，研究了含不同离子、官能团的催化剂对 $\text{Al-H}_2\text{O}$ 反应中表面化学势能的影响规律，探明了表面化学势能对氢氧化铝形貌的演化作用机制。研究了外场调节对 $\text{Al-H}_2\text{O}$ 反应中产物形貌和颗粒尺寸的影响，探明了超声对择优生长晶面的作用机理。在 $\text{Al-H}_2\text{O}$ 反应中，通过超声增加了铝表面的反应势能，加快反应速率和抑制氢氧化铝晶体沿(110)、(111)、(131)、(202)晶面的优先生长。此外，外场超声提高了晶体中相应晶面的解离速率，促进产物中 Al-O 键的形成，制备出单一形貌和尺寸分布均匀的超细活性多孔高纯氢氧化铝。

其次，研究了铵盐在煅烧氢氧化铝（ $\text{Al-H}_2\text{O}$ 反应产物）过程中对产物粉体微孔和形貌的作用机制，优化了氧化铝粉体的孔径结构。铵盐煅烧过程中分解产生的气体（ NH_3 和 CO_2 ）可以调控孔隙和晶体结构，防止粉体中毛细孔的坍塌，有利于形成海绵状形貌和更多的活性位点，具备良好的吸/脱附和负载特性。结果表明，用碳酸铵、碳酸氢铵、乙酸铵辅助制备 $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的比表面积分别为 441.35、459.23、427.32 $\text{m}^2\cdot\text{g}^{-1}$ 。另外探明了氧化铝的“继承”特性和颗粒圆化的煅烧机制，将（超声） $\text{Al-H}_2\text{O}$ 反应产物氢氧化铝经煅烧后进行研磨，获得粒度 D_{50} 为 159 nm 以及纯度大于 99.999% 的超细类球形活性高纯 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 。

本工作探明了 $\text{Al-H}_2\text{O}$ 反应法合成高纯氧化铝过程中的形貌控制机理，开发了一系列制备不同形貌高比表面积高纯氧化铝的工艺方法，为高纯活性产物的工业化生产提供了理论指导和技术支撑。

最终交流类型：闪报

D20

利用镍(II)-吡唑羧酸盐框架从 $\text{N}_2\text{O}/\text{N}_2/\text{CO}_2/\text{O}_2$ 混合气中同时捕获 N_2O 和 CO_2

李沐紫*, 张鑫, 李建荣

北京工业大学

氧化亚氮（ N_2O ）是一种强效温室气体，也是臭氧层破坏的主要贡献者之一。其主要工业排放源是己二酸生产过程中的尾气，这种尾气通常包含氧化亚氮（ N_2O ）、二氧化碳（ CO_2 ）、氮气（ N_2 ）和氧气（ O_2 ）的混合物。目前用于从尾气中去除氧化亚氮和二氧化碳的技术能耗高且操作复杂。在此，我们首次利用镍(II)-吡唑羧酸盐框架（BUT-167）实现了从四元混合气中同时捕获氧化亚氮和二氧化碳。该材料对氧化亚氮表现出卓越的吸附能力（在 40 kPa 下吸附量为 135.8 cm^3/cm^3 ）和高堆积密度（790 mg/cm^3 ），其性能优于已报道的吸附剂。此外，BUT-167 对二氧化碳也表现出显著的吸附能力（在 4 kPa 下吸附量为 101.5 cm^3/cm^3 ），并实现了同时对二氧化碳/氮气（4:96，体积比）和氧化亚氮/氮气（40:60）的高选择性值，分别为 257.6 和 135.7。重要的是，BUT-167 在干燥和潮湿条件下均表现出强大且出色的双气体去除性能，并且在多次吸附-脱附穿透循环过程中性能稳定。其对二氧化碳和氧化亚氮的强亲和力可归因于其高度受限的通道结构所促进的多重氢键相互作用，这一点通过单晶 X 射线衍射分析得到了证实。

最终交流类型：闪报

D20

金属有机框架材料的绿色规模化制备及其煤层气分离研究

韩章烨*

北京工业大学

过去几十年的研究揭示了金属有机框架（MOFs）的无限潜力。然而，涉及大量有机溶剂的危险和昂贵的生产成本严重阻碍了它们在工业上的广泛采用。本研究将碱辅助合成和调制水热化学两种生态友好策略的优势结合，引入醋酸阴离子作为温和有效的调节剂来调节配位和调整结晶途径。在水介质中实现了双配体 Zn-MOF 的绿色、快速和可扩展的合成，具有前所未有的 24 吨/立方米·天的时空产率，且单批次超过 1.2 千克的产量。并且，由于对 CH_4 有较强的亲和力，获得的 Zn-MOF 在环境条件下具有较好的 CH_4/N_2 分离能力。该研究不仅促进了 MOFs 的绿色、规模化生产和产业化进展，而且为煤层气的回收提供

了一种经济高效的吸附剂。

最终交流类型：闪报

D20

含富氧基团的超微孔金属-有机骨架用于潮湿环境下高度选择性地捕获二氧化碳

李文梁、谢林华、俞嘉梅*、李建荣

北京工业大学

温室气体的过度排放导致了全球变暖，这给世界敲响了警钟，并引发了全球碳中和运动。全球天然气发电厂数量的增加导致了碳排放量的增加，天然气发电厂尾气中 CO_2 的有效去除可以加速碳中和。然而，此类电厂烟气中 CO_2 浓度较低，仅为 4%，且含有大量的 O_2 和 H_2O ，使 CO_2 的分离更具挑战性。制备了一种新型富氧基团的极性超微孔金属有机骨架 (BUT-189)。在模拟天然气发电厂的烟气环境下，它对 CO_2 具有较高的吸附能力和选择性，并在现有的物理吸附剂中吸附焓很低。这种优异的吸附性能即使在高湿度条件下也能保持。机理研究表明，极性超微孔非常适合 CO_2 和 N_2 的分子筛分，其对 H_2O 和 CO_2 的不同吸附位点使其能够共吸附。BUT-189 具有优良的稳定性和可回收性，配体价格低廉，可大规模合成，是一种实用的 CO_2 捕集吸附剂。这将为开发实用的 NGCC 吸附剂提供新的策略。

最终交流类型：闪报

D20

$\text{TiO}_2/\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ 之间电子反向传输实现高效光催化 CO_2 还原

赵琛、李涵冰、周阿武*

北京工业大学

光催化二氧化碳(CO_2)还原为高附加值的化学燃料，是实现可持续能源生产和缓解环境问题的一种有前途的方案。在异质结中自发的自由电子转移通常是由双半导体之间的相互作用所引发的，它对光催化性能有着显著的影响。然而，精确调控光生电子的转移方向仍是一项艰巨的任务。在此，我们提出了一种反向电子迁移策略，以引导光生电子转移到催化位点，从而提高在 $\text{Cu-TiO}_2@\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ 上的 CO_2 光还原效率。通常情况下，电子是从 TiO_2 转移到 ZnIn_2S_4 上的，而当引入 Cu 位点时， ZnIn_2S_4 会向 Cu-TiO_2 供电子。正如预期，在可见光不添加任何光敏剂条件下， $\text{Cu-TiO}_2@\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ 对于 CO 选择性为 99.4%，产率为 $620 \mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$ ，优于目前最先进的 TiO_2 基光催化剂。飞秒瞬态吸收光谱(fs-TA)，原位 XPS 和傅里叶变换红外光谱(FT-IR)表征结合密度泛函理论(DFT)计算证实了 Cu 调节异质结电子结构，精确地将 ZnIn_2S_4 上累积的光生电子沿特定路径引导至 Cu 活性位点。此外电子的重新分配使得 Cu 原子周围电子局域化程度提升，并于 Cu 与 Ti 原子之间形成电子极化区域，促进 CO_2 的吸附和活化，同时显著降低了关键中间体*COOH 的生成能垒，从而解释了 CO_2 高效还原为 CO 的主要原因。

最终交流类型：闪报

D20

Porous sorbents for direct capture of carbon dioxide from ambient air

Yuchen Zhang, Jian-Rong Li*

Beijing University of Technology

Large-scale deployment of carbon dioxide (CO_2) removal technology is an essential step to cope with global warming and achieve carbon neutrality. Direct air capture (DAC) has recently received increasing attention given the high flexibility to remove CO_2 from discrete sources. Porous materials with adjustable pore characteristics are promising sorbents with low or no latent heat of vaporization. This review article has summarized the recent development of porous sorbents for DAC, with a focus of pore engineering strategy and adsorption mechanism.

Physisorbents such as zeolites, porous carbons, metal-organic frameworks (MOFs), and amine-modified chemisorbents have been discussed and their challenges in practical application have been analyzed. At last, future directions have been proposed, and it is expected to inspire collaborations from chemistry, environment, material science and engineering communities.

最终交流类型：闪报

D20

硅胶负载硫酸在开环聚合作用下去除环状硅氧烷

吕思琪、周阿武*

北京工业大学

由于挥发性甲基硅氧烷 (VMS) 杂质的存在, 生物气的燃烧导致微晶状 SiO_2 沉积物生成, 需要将其从生物气中去除。环状硅氧烷作为 VMS 的代表, 可以进行开环聚合。在本研究中, 开发了一种用于生物气净化的硅胶负载硫酸 (SSA/SG) 材料, 利用硅胶的吸附特性在其表面捕获八甲基环四硅氧烷 (D4), 后在锚定的硫酸催化下发生开环聚合反应。动态吸附测试表明, SSA/SG3 具有优异的 D4 去除效率 (20 °C 时, $Q_{m,th} = 2459.1 \text{ mg/g}$), 超过了大多数用于吸附 D4 的材料。过程条件显示, 更高的入口浓度、适中的气体流速、更多的吸附剂质量以及更低的相对湿度均显著提高了 D4 的去除效率。通过密度泛函理论计算, 系统地探究了可能的吸附/聚合机制。这些发现证实了 D4 在硅胶负载硫酸上形成了高分子量的聚硅氧烷结构, 突显了该方法去除挥发性有机硅氧烷的经济性和可行性。

最终交流类型：闪报

D20

基于 Co(III)-二吡啶配位框架的光催化大气 CO_2 还原研究

王英杰*、何涛、李建荣

北京工业大学

北京工业大学

在“双碳”目标驱动下, 将 CO_2 转化为燃料或化学品的人工光合还原反应被视为实现碳中和的重要路径之一, 尤其是针对浓度极低的大气 CO_2 利用, 仍面临重大挑战。我们报道了一类基于 Co_8 簇单元的 fcu 型金属有机框架 (MOFs) 材料——BUT-60(II)、BUT-60(III) 及 BUT-60(M- H_2O), 并将其应用于大气 CO_2 的光催化还原反应中。其中, 具有高自旋态 Co(III) 中心的 BUT-60(M- H_2O) 展现出优异的光催化性能, 其 CO 生成速率达到 $12.66 \mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$, 选择性接近 100%, 相比于 BUT-60(II) 的性能提升超过 5 倍 ($2.44 \mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$)。结合原位红外光谱与理论计算分析, 揭示了高自旋 Co(III) 位点在促进界面电荷转移、调控反应中间体吸附行为、降低反应能垒等方面的关键作用。本研究不仅深化了对金属自旋态在光催化反应中机制作用的理解, 也展示了 Co(III)-MOFs 在低浓度 CO_2 资源化利用中的巨大潜力。

最终交流类型：闪报

D20

原位蒸汽辅助法用于一步制备多级孔 Cu-BTC

代艳辉、陈杨*

太原理工大学

金属有机骨架材料 (MOF) 因其比表面积大、孔隙率高、结构高度可调等优势在气体吸附分离、催化、传感及生物医学等领域展现出巨大的应用潜力。但大多数 MOF 的孔结构在微孔范围, 狭窄的孔隙环境限制了其应用过程中的传质扩散以及活性位点释放, 在微孔 MOF 结构的基础上进行多级孔的构建则可以解决这一问题。为实现经典 Cu-BTC 结构上的多级孔构筑, 基于原位蒸汽辅助合成加刻蚀过程开发了一步制

备多级孔 Cu-BTC 的新方法。通过绿色刻蚀剂乙酸用量、蒸汽辅助时间的调节,获得了孔径范围可调的多级孔 Cu-BTC。由于多级孔结构对传质过程和活性位点的提升作用,该材料在 CO₂ 电还原实验中展现出优秀的转化效率,最高乙烯的选择性可提升 157%。通过蒸汽辅助耦合材料制备和刻蚀过程使得多级孔 MOF 的一步制备成为了可能,其具有的减少反应物用量和反应步骤的特点将进一步推动多级孔 MOF 在实际应用中的发展。

最终交流类型: 墙报

D20

可规模化制备的立体柱撑 MOF 用于高效天然气提纯

赵砚珑*、张鑫、李建荣

北京工业大学

甲烷(CH₄)作为天然气的主要成分,具有最高的氢碳比,这使其成为一种清洁能源来源。然而,低品质煤层气中的甲烷由于浓度很低(<30%,主要杂质为氮气(N₂)),很难被直接应用,继而由于安全等因素被直接排放。这不仅造成了能源的浪费,还贡献了温室效应。目前,由于缺乏合适的吸附剂,很难有效地将甲烷从低品质煤层气中提纯出来。金属有机框架(MOF)根据等网状化学的原理具有前所未有的孔结构可调性,因此是一类有前景的 CH₄/N₂ 吸附剂材料。通常来讲,提升 CH₄/N₂ 分离选择性是具有挑战性的,因为二者均为弱吸附质,共吸附现象较为严重。在材料设计中,除了吸附位点的设计之外,动力学影响也是决定分离性能的重要因素,但目前鲜有研究。

因此,我们在经典霍夫曼结构 MOF 中采取了等构替换的策略,将平面吡嗪柱撑替换为立体三乙烯二胺柱撑。这种策略不仅可以提升 MOF 对于甲烷的作用力,还能限制氮气的扩散入孔。替换之后的 CoNi-DAB 展现出了前所未有的 CH₄/N₂ (15:85)选择性(16.7)。除此之外,CoNi-DAB 由于良好的疏水性,在动态分离测试过程中表现出优异的抗湿度性能。该材料可在常温常压下通过搅拌法大规模制备,具有一定的实际应用前景。

最终交流类型: 墙报

D20

吡啶基稳定 MOF 的合成: 独特簇结构及高催化活性

李翔宇、谢林华*

北京工业大学

由[Co₄Pz₈]簇(Pz = 吡啶酸盐)和 1,3,5-三(吡啶酸盐-4-基)苯(BTP³⁻) 配体构建的金属有机框架(MOF)在多年前就被预测出来,由于其独特的团簇和高度开放的 3D 框架结构,有望成为各种应用的有前途的候选者。然而,尽管付出了广泛的努力,但这个 MOF 至今没有得到。在这项工作中,我们将该 MOF (以下简称 BUT-124 (Co))的成功构建,采用两步合成策略,包括初始构建模板框架(BUT-124(Cd)),然后是合成后金属复分解过程。系统研究了各种钴源和溶剂的影响,并采用了创新的逐步复分解策略来优化材料的交换比例和孔隙率。BUT-124(Co)在析氧反应(OER)中表现出高催化活性,在 10 mA cm⁻² 的电流密度下实现了 393 mV 的过电位,并且在 1 M KOH 溶液中的恒电位电解过程中也提供了显着的长期稳定性,超过了许多基准催化剂的耐用性。这项工作不仅介绍了一种具有良好性能的新型 MOF 材料,而且还展示了一种基于吡啶酸盐的 MOF 的战略合成方法,为不同应用领域的进步铺平了道路。

最终交流类型: 墙报

D20

基于机器学习与多尺度模拟的碳基吸附剂微孔-功能位点耦合效应对 CO₂ 吸附性能的影响研究

左家玉、孙飞*、曲智斌、杨潮伟、谢亮、张艺、李旭函、李俊峰

哈尔滨工业大学

Sunlight-driven photocatalysis is regarded as one of the most promising strategies for renewable energy conversion. Recent studies have demonstrated that dynamic structural twisting of photocatalysts in their excited states can suppress charge recombination and enhance photocatalytic efficiency. Covalent Organic Frameworks (COFs), crystalline porous materials constructed via strong covalent bonds between organic building blocks, offer tunable light-harvesting and charge-transport properties, making them attractive candidates for heterogeneous photocatalysis under visible light. In this talk, we present the atomic-level observations of rotational and translational dynamics in single-crystal COFs upon adaptive guest inclusion of various organic molecules. These dynamics involve multiple rotamers of covalent linkages and switchable interframework noncovalent interactions. Such dynamic COFs exhibit concerted structural transformations in response to guest molecules, a property that has been widely studied for applications in gas storage, selective adsorption, heterogeneous catalysis, and molecular sensing. Recently, we have designed a dynamic COF with modulated structural flexibility in aqueous environments, which demonstrated enhanced performance in solar energy harvesting and photocatalytic activity.