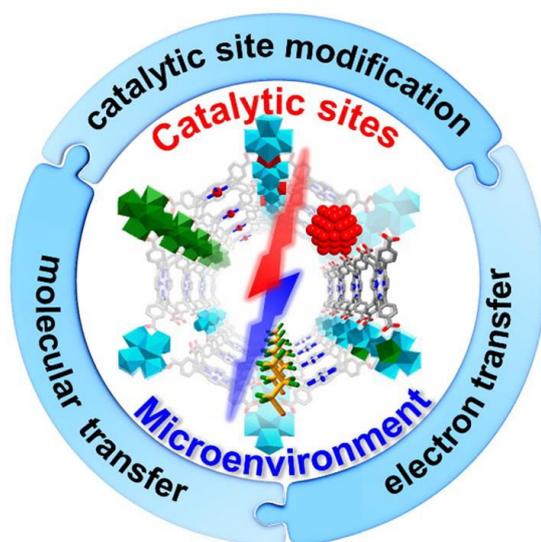




MOF 基催化剂中催化微环境的精准设计与调控

催化微环境可以在催化位点周围形成独特的空间结构和电子性质，对催化性能具有重要的调控作用。然而在多相催化中，由于传统无机催化剂缺乏原子精度的可调变性，在催化位点的微环境调控上仍具有挑战。金属有机骨架材料 (MOFs) 具有明确的晶态结构、丰富的活性位来源和灵活的调控策略，为精确控制微环境带来的巨大机遇。然而，当前 MOF 催化中微环境的精确控制的研究还非常有限，因此，深入研究 MOF 基催化中的微环境设计调控，认识其中的内在机制并实现材料催化性能优化，对催化领域具有重要意义。

近年来，中国科学技术大学江海龙教授课题组致力于 MOF 基催化材料中活性位微环境的精准调控，并取得了系列重要的研究进展。针对催化中的扩散传质，课题组通过调节 MOF 孔结构和化学微环境（如润湿性）等，实现催化位点周围反应物尺寸/形状的精确定选择和快速扩散。针对反应中的电荷传递，通过 MOF 调变活性位微环境，有效地调控了电荷迁移距离和分离效率，加速了反应过程。此外，课题组还借助 MOFs 结构和成分的灵活性，通过改变微环境，精确调制催化位点的电子态和配位结构，优化位点本征活性。在此基础上，课题组还通过微环境调控，实现了传质、电荷转移和催化位点的本征活性等多个关键因素系统性优化，极大改善了催化性能。



最近，课题组受邀通过对上述 MOF 基催化剂微环境调控的系列工作进行梳理总结，并就当前该方向的挑战和机遇进行了的简要介绍。相关工作以“Microenvironment Modulation in Metal-Organic Framework-Based Catalysis”为题，以正封面形式发表在 *Accounts of Materials Research* 上 (Acc. Mater. Res. 2021, 2, 327-339)。