

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования



**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Направление подготовки/профиль 02.00.03 органическая химия
Школа ИШХБМТ

**Научный доклад об основных результатах подготовленной
научно-квалификационной работы**

Тема научного доклада
Особенности формирования галогенных связей в структуре метал-органических каркасов на примере UiO-66 и дихлорбензола

УДК 547.1'13-386:547.539.2:66.094.4

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A8-17	Гуляев Роман Олегович		

Руководитель профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор НОЦ им. Н.М Кижнера	Филимонов Виктор Дмитриевич	д.х.н		

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ИШХБМТ	Постников Павел Сергеевич	д.х.н		

Аннотация

В настоящее время металл-органические каркасы (MOF) благодаря своим уникальным свойствам приобретают особую популярность в науке и технике. MOF представляют собой класс высокопористых материалов, состоящих из металлических узлов и органических линкеров. Их модульная природа обеспечивает возможность тонкой настройки свойств за счет структурный контроля. Благодаря синтетическому дизайну такие свойства, как пористость, стабильность, морфология частиц, структура, проводимость, могут быть адаптированы для конкретных применений. Выбор прекурсоров для синтеза MOF являются одними из основных стратегий химического и структурного контроля. MOF продемонстрировали значительный потенциал для разделения и хранения опасных экотоксикантов.

Несмотря на уникальные свойства, широкое применение MOF сдерживается техническими и технологическими недостатками, связанными с гранулометрическим составом и, как следствие, низкой проницаемостью для жидкостей, что делает их редко применяемыми в промышленности. Несмотря на высокие сорбционные и разделительными характеристиками MOF, соотношение их производительности и цены остается неудовлетворительным для ряда технологических применений. Функциональные свойства MOF не удовлетворяют технологическим запросам, кроме того, специфические лиганды и методы их синтеза, а также дополнительное оборудование применяемое при синтезе порошков MOF, и их удаления после использования, увеличивают ценообразование конечного продукта.

Руководствуясь вышеизложенными проблемами, исследования в области создания новых функциональных материалов на основе MOF имеют огромный потенциал с точки зрения как фундаментальной науки, так и практических применений в химической промышленности.

В данной работе представлен новый подход к регулированию адсорбционных свойств металл-органический каркас UiO-66 по отношению к хлор-аренам (CBs) посредством введения доноров галогенных связей (ГС). Нами получена и охарактеризована серия UiO-66 с широким диапазоном концентраций 2-йодтерефталевой кислоты (I-TA) 0, 33, 50, 67 и 100% для адсорбции CBs. Зависимость структура-свойство показала, что наибольшая адсорбционная способность достигается при 50% I-TA (UiO-66-I (50%)) за счет баланса количества доноров ГС, площади поверхности и дефектов в структуре UiO-66. Адсорбционную емкость для UiO-66-I (50%) достигала 130 % по сравнению с UiO-66. Образование галогенной связи между UiO-66-I (50%) и CBs было теоретически обосновано квантово-химическими расчетами, а, затем, и экспериментально подтверждено с помощью спектроскопических подходов. Для получения технологического материала в целях сепарации отработанный ПЭТ был использован в качестве носителя и сырья для поверхность-опосредованного роста UiO-66-I (50%). Полученный ПЭТ@UiO-66-I (50%) показал высокую адсорбционную способность по отношению к CBs и близкую к идеальной селективность при отделении CBs от не-хлорированных ароматических аналогов.

Работа была выполнена при поддержке Мегагранта (постановление правительства 220) 220П_075-15-2021-585 и фонда содействия инновациям в рамках программы «УМНИК».