

## <<功能配位聚合物>>

### 图书基本信息

书名：<<功能配位聚合物>>

13位ISBN编号：9787030359612

10位ISBN编号：7030359615

出版时间：2013-1

出版时间：科学出版社

作者：刘志亮

页数：205

字数：271500

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<功能配位聚合物>>

### 内容概要

功能配位聚合物是分子材料中最为活跃的研究领域之一。

《功能配位聚合物》主要介绍了功能配位聚合物的设计、合成与结构表征等基础知识,以及配位聚合物单链磁体、自旋转换配位聚合物、催化功能配位聚合物、二阶非线性光学效应配位聚合物、配位聚合物储氢材料、金属-有机骨架结构配位聚合物发光材料、铁电配位聚合物等重要功能配位聚合物的基础与前沿进展。

主要内容涵盖了功能配位聚合物研究中处于主流的、最重要的研究方向,使功能配位聚合物形成一个相对独立的科学研究体系。

《功能配位聚合物》提供了较为全面系统的专业知识,可以作为从事功能配位聚合物领域研究的广大科研人员、教师、研究生及高年级本科生的参考读物。

## <<功能配位聚合物>>

### 作者简介

刘志亮 博士、教授、博士生导师，1968年出生于内蒙古自治区。  
2002年获南开大学理学博士学位，曾在中国科学院化学研究所、荷兰Leliden大学从事博士后研究工作。  
2006年起任内蒙古大学教授。  
主要从事功能分子材料的设计、合成及性能研究。

## &lt;&lt;功能配位聚合物&gt;&gt;

## 书籍目录

序1 功能配位聚合物的设计、合成与结构表征1.1 功能配位聚合物概述1.1.1 功能配位聚合物的现状1.1.2 功能配位聚合物的分类1.2 功能配位聚合物的结构设计1.3 功能配位聚合物的性能设计1.3.1 磁功能配位聚合物的设计1.3.2 单链磁体的设计1.3.3 自旋转换功能配位聚合物的设计1.3.4 催化功能配位聚合物的设计1.3.5 二阶非线性光学(NLO)配位聚合物的设计1.3.6 储氢功能配位聚合物的设计1.3.7 发光MOFs配位聚合物的设计及组装1.3.8 铁电配位聚合物的设计1.4 功能配位聚合物的单晶生长及结构确定1.4.1 功能配位聚合物的单晶生长1.4.2 功能配位聚合物的结构测定方法简介1.4.3 单晶结构解析方法简介参考文献2 新型一维配位聚合物磁系统——单链磁体2.1 单链磁体的特点2.1.1 单链磁体的静态磁性2.1.2 单链磁体的磁化动力学行为2.1.3 单链磁体中的缺陷2.2 单链磁体的设计2.3 单链磁体的类型2.3.1 铁磁耦合的单链磁体2.3.2 亚铁磁单链磁体2.3.3 基于自旋倾斜的单链磁体2.4 展望参考文献3 自旋转换配位聚合物3.1 自旋转换的基本概念3.2 自旋转换现象的基本表征3.2.1 变温磁化率测定3.2.2 X射线单晶衍射3.2.3 UV-Vis谱3.2.4 Mossbauer谱3.2.5 Raman光谱3.3 引起自旋转换现象的外部条件3.3.1 温度变化引起的自旋转换3.3.2 压力变化引起的自旋转换3.3.3 光致自旋转换3.4 一维自旋转换配位聚合物3.5 二维自旋转换配位聚合物3.6 三维自旋转换配位聚合物3.7 展望参考文献4 催化功能配位聚合物4.1 催化功能配位聚合物简介4.2 配位聚合物催化下形成C—C键的反应4.2.1 配位聚合物催化的醛/亚胺硅氰化反应4.2.2 配位聚合物催化的芳香醛/酮硅氰化反应及Mukaiyama-Aldol反应4.2.3 配位聚合物催化的Knoevenagel缩合反应4.2.4 配位聚合物催化的Diels-Alder加成、Michael加成反应4.2.5 稀土配位聚合物催化的Hetero-Diels-Alder加成反应4.2.6 配位聚合物催化的Suzuki-Miyaura耦合反应4.3 配位聚合物催化的氧化反应4.3.1 配位聚合物催化合成 $\alpha$ -羟基酮的反应4.3.2 配位聚合物催化下苯甲醇选择性氧化为苯甲醛的反应4.3.3 配位聚合物催化的烷基芳基硫醚选择性氧化为亚砷的反应4.4 配位聚合物催化的光化学反应4.4.1 配位聚合物光催化的有机合成反应4.4.2 配位聚合物光催化的有机物降解4.5 手性配位聚合物催化的不对称合成4.5.1 手性配位聚合物的设计4.5.2 手性配位聚合物催化芳香酮的加氢还原反应4.5.3 手性配位聚合物催化 $\alpha,\beta$ -不饱和酮的环氧化反应4.5.4 手性配位聚合物催化2,2-二甲基苯并吡喃的环氧化反应4.5.5 手性配位聚合物催化的环氧化合物不对称开环反应4.5.6 手性配位聚合物催化芳香醛与二烷基锌的不对称加成反应4.5.7 手性配位聚合物催化的不对称Aldol加成反应4.6 配位聚合物催化的不饱和烃聚合反应4.6.1 配位聚合物催化的烯烃聚合反应4.6.2 配位聚合物催化的炔烃聚合反应4.6.3 配位聚合物作为Ziegler-Natta催化剂用于异戊二烯的聚合反应4.7 展望参考文献5 二阶非线性光学效应配位聚合物5.1 二阶非线性光学效应基本原理5.2 基本效应及主要测试方法5.3 二阶NLO化合物的分类5.3.1 无机二阶非线性光学材料5.3.2 有机/金属有机二阶非线性光学材料5.3.3 二阶非线性光学配合物/配位聚合物5.4 二阶NLO配位聚合物5.4.1 3D金刚烷型网络结构二阶NLO配位聚合物5.4.2 2D网络结构配位聚合物组装形成的二阶NLO材料5.4.3 1D配位聚合物二阶NLO材料5.5 展望参考文献6 配位聚合物储氢材料6.1 储氢概述6.1.1 氢气的获得6.1.2 氢气的存储6.2 配位聚合物储氢机理研究6.3 储氢配位聚合物的设计策略6.3.1 控制MOFs适当的孔径尺寸及高的孔隙率6.3.2 客体注入6.3.3 骨架连锁6.3.4 开放金属位点6.3.5 轻金属MOFs6.3.6 氢溢流6.4 展望参考文献7 金属-有机骨架结构配位聚合物发光材料7.1 MOFs配位聚合物的发光机理7.2 发光MOFs配位聚合物的设计及组装7.3 重要的MOFs发光配位聚合物7.3.1 MOFs发光配位聚合物对硝基化合物的识别——爆炸物检测7.3.2 MOFs发光配位聚合物对F<sup>-</sup>的识别7.3.3 MOFs发光配位聚合物对Ag<sup>+</sup>的识别——Ag<sup>+</sup>探针7.3.4 MOFs发光配位聚合物作为pH传感器7.3.5 MOFs发光配位聚合物作为O<sub>2</sub>分子传感器7.4 展望参考文献8 铁电配位聚合物8.1 铁电效应基本概念8.2 铁电相变的结晶学条件8.3 铁电效应的基本测量8.3.1 电滞回线8.3.2 Curie温度T<sub>c</sub>8.3.3 Curie-Weiss定律8.4 铁电效应配位聚合物8.4.1 一维链状结构配位聚合物铁电体8.4.2 二维层状结构配位聚合物铁电体8.4.3 三维骨架结构配位聚合物铁电体8.5 展望参考文献

## &lt;&lt;功能配位聚合物&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：插图：6.2配位聚合物储氢机理研究 MOFs储氢材料是由金属离子通过刚性有机桥联配体相互连接形成的具有微孔结构的晶态材料。

非弹性中子散射 (inelastic neutron scattering, INS) 研究表明, 吸氢位点通常位于过渡金属和有机配体附近。

H<sub>2</sub>分子进入孔道中, 与孔壁原子的势场能量叠加, 孔壁原子与H<sub>2</sub>分子之间产生作用力。

当孔径大小与H<sub>2</sub>分子的范德华半径相近时, 它们之间的作用力最大。

要提高MOFs的储氢量, 可以通过调整口脑瓜径的大小来实现。

减小孔径, 可以提高氢分子与孔壁之间的作用力, 有利于增加储氢量; 但孔径也不能太小, 否则每个孔只能容纳有限数量的H<sub>2</sub>分子, 氢吸附量反而下降。

反之, 如果孔径太大, 孔壁与H<sub>2</sub>分子之间的作用力减弱, 孔洞内部将有部分“空闲”体积, 造成空腔体积的“闲置浪费”。

因此, 要获得理想储氢性能的MOFs, 一般需要合成具有合适孔径大小、同时具有较大比表面的MOFs。

目前, 针对MOFs配位聚合物储氢性能的理论研究方法主要涉及以下三种。

(1) 基于从头计算 (ab initio) 或密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的计算方法。

这种计算方法主要用于研究H<sub>2</sub>分子与MOFs间的结合能 (吸附热, heat of adsorption), 能够很好地给出H<sub>2</sub>分子吸附位置的相关信息。

(2) 基于巨正则蒙特卡洛 (grand canonical Monte Carlo, GCMC) 的计算方法。

这种计算模拟方法主要用于预测H<sub>2</sub>分子在MOFs微孔中的吸附量。

利用这种计算模拟方法较为准确地预测了一些MOFs体系的H<sub>2</sub>吸附性能。

计算结果表明: 在低压 (0.1 bar, 1 bar=10<sup>5</sup>Pa) 下, H<sub>2</sub>吸附量主要与吸附热相关; 在中等压力 (30 bar) 下, H<sub>2</sub>吸附量主要与MOFs的比表面相关; 在高压 (100 bar) 下, H<sub>2</sub>吸附量主要与MOFs结构中的自由体积 (free volume) 相关。

(3) 基于分子动力学 (molecular dynamics) 的计算方法。

这种计算模拟方法主要用于预测H<sub>2</sub>分子在MOFs微孔中的动力学行为, 从而了解H<sub>2</sub>分子在MOFs微孔中的吸附扩散过程。

上述三种计算方法的着眼点各有侧重, 对一些MOFs体系储氢性能的理论预测有时需要用几种方法结合起来进行处理, 会获得与实验结果更为吻合的结果。

## <<功能配位聚合物>>

### 编辑推荐

《功能配位聚合物》提供了较为全面系统的专业知识，可以作为从事功能配位聚合物领域研究的广大科研人员、教师、研究生及高年级本科生的参考读物。

<<功能配位聚合物>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>