



廈門大學  
XIAMEN UNIVERSITY

# BTB-MOL 表面修饰总结

戴冰玲

2024年12月

Hf-BTB-MOL

Entry	Sample	Condition FA/H <sub>2</sub> O (mL)	FA/H <sub>2</sub> O (摩尔比)	MOL FA/SBU
1	Hf-BTB-MOL-1	0.75 :0.75	0.477	2.18
2	Hf-BTB-MOL-2	1.875 : 0.375	2.385	2.38
3	Hf-BTB-MOL-3	2.25 : 0.75	1.431	2.30
4	Hf-BTB-MOL-4	2.25 : 1.5	0.716	2.32
5	Hf-BTB-MOL-5	3.1 : 0.375	3.944	2.28
6	Hf-BTB-MOL-6	3.1 : 1.0	1.479	2.32

增加核磁表征弛豫时间到 30s，FA/SBU 约为 3

**Hf-BTB-MOL合成时，不同甲酸和水的比例基本不影响MOL表面的甲酸封端含量。**

**BTB-MOL**

Condition : 苯甲酸 (BA) 投量为理论甲酸位点的 10 当量，浓度 0.072 M，55 °C 油浴搅拌 18 h.

Entry	Sample	MOL BA/BTB	MOL FA/BTB
1	Hf-BTB-MOL-1	1.26	0.07
2	Hf-BTB-MOL-2	1.29	0.17
3	Hf-BTB-MOL-3	1.25	0.13
4	Hf-BTB-MOL-4	1.24	0.12
5	Hf-BTB-MOL-5	1.17	0.19
6	Hf-BTB-MOL-6	1.19	0.15

不同的Hf-BTB-MOL合成条件，基本不影响苯甲酸的修饰量。

Condition : 苯甲酸 (BA) 投量为理论甲酸位点的 10 当量，浓度 0.072 M，搅拌 17 h.

Entry	Sample	Temperature	MOL BA/BTB	MOL FA/BTB
1	Hf-BTB-MOL-2	55 °C	1.44	0.32
2	Hf-BTB-MOL-5	55 °C	1.29	0.28
3	Hf-BTB-MOL-2	80 °C	1.46	0.10
4	Hf-BTB-MOL-5	80 °C	1.41	0.08

(核磁表征时 D1=30S)

提高苯甲酸修饰的温度，基本不影响苯甲酸的修饰量。

Condition : 苯甲酸 (BA) 投量为理论甲酸位点的 10 当量，浓度 0.072 M，55°C油浴搅拌 18 h.

Entry	Sample	Solvent	MOL BA/BTB	MOL FA/BTB
1	Hf-BTB-MOL-2	THF	1.30	0.23
2	Hf-BTB-MOL-5	THF	1.32	0.27
3	Hf-BTB-MOL-2	CH <sub>3</sub> CN	1.25	0.22
4	Hf-BTB-MOL-5	CH <sub>3</sub> CN	1.20	0.29
5	Hf-BTB-MOL-2	H <sub>2</sub> O(NaOH)	1.16	-
6	Hf-BTB-MOL-5	H <sub>2</sub> O(NaOH)	1.21	-

改变苯甲酸修饰时使用的溶剂，基本不影响苯甲酸的修饰量。

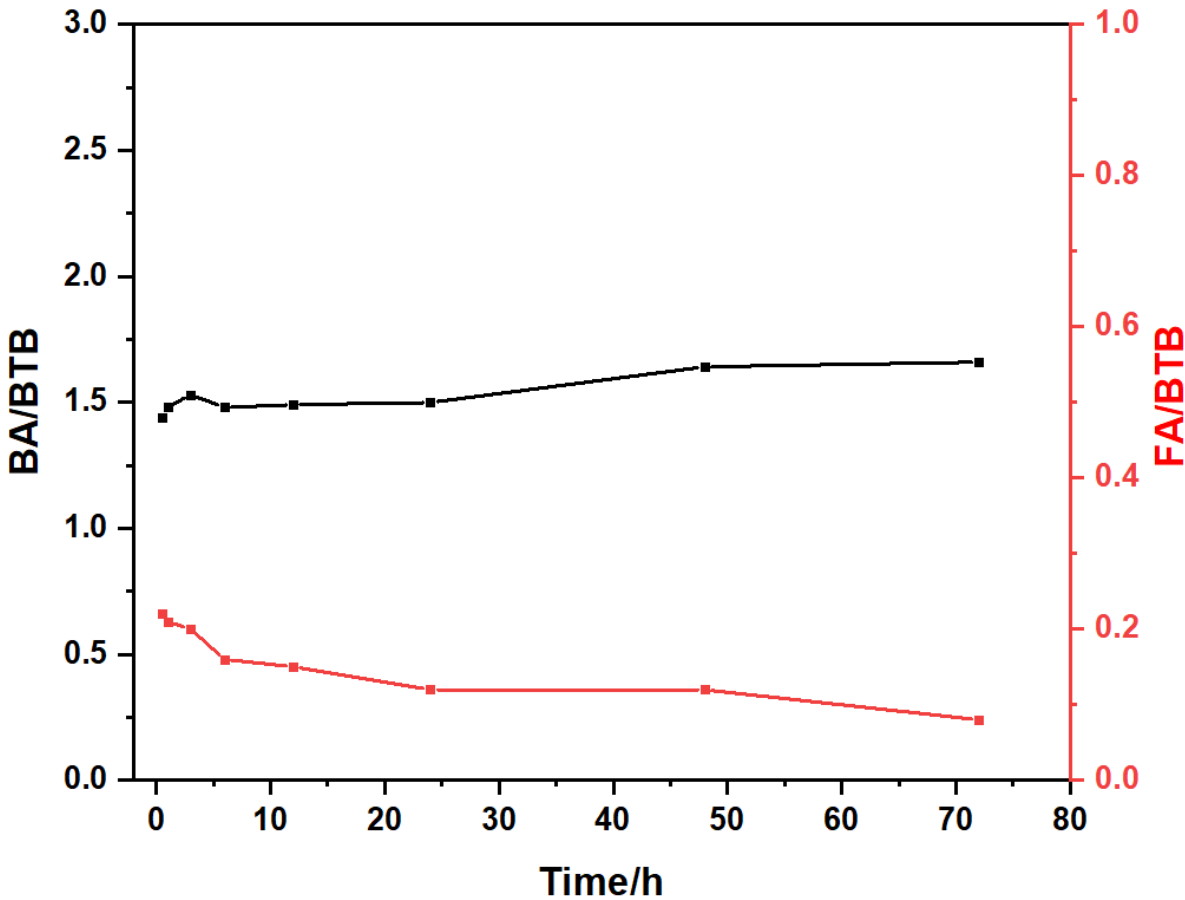
Condition : 苯甲酸 (BA) 投量为理论甲酸位点的 50 当量, 55 °C 油浴搅拌 18 h.

Entry	Sample	Equivalent	Concentration	MOL BA/BTB	MOL FA/BTB
1	Hf-BTB-MOL-3	10	0.072 M	1.25	0.13
2	Hf-BTB-MOL-3	50	0.072 M	1.17	0.09
3	Hf-BTB-MOL-3	50	0.144 M	1.19	0.06

改变苯甲酸修饰时使用的投量或浓度，基本不影响苯甲酸的修饰量。



Time / h	BA/BTB	FA/BTB
0.5	1.44	0.22
1	1.48	0.21
3	1.53	0.2
6	1.48	0.16
12	1.49	0.15
24	1.50	0.12
48	1.64	0.12
72	1.66	0.08



苯甲酸修饰时,半小时即可修饰接近饱和。

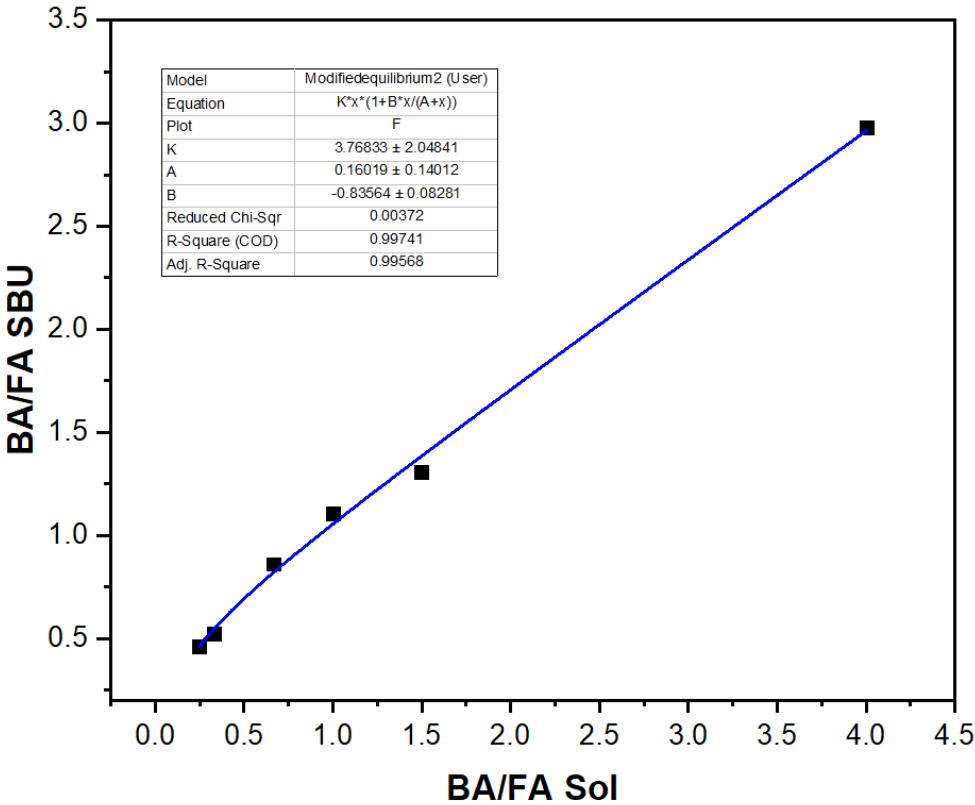




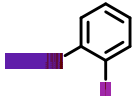
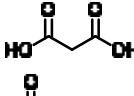
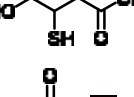
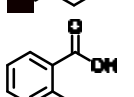

BTB-MOL 苯甲酸 修饰

	FA (mmol/L)	BA (mmol/L)	FA (/SBU)	BA (/SBU)
1	176	705	0.88	2.62
2	352	527	1.44	1.88
3	440	440	1.68	1.86
4	527	352	1.86	1.6
5	659	220	2.26	1.18
6	705	176	2.22	1.02

所用拟合公式并无微观模型支撑





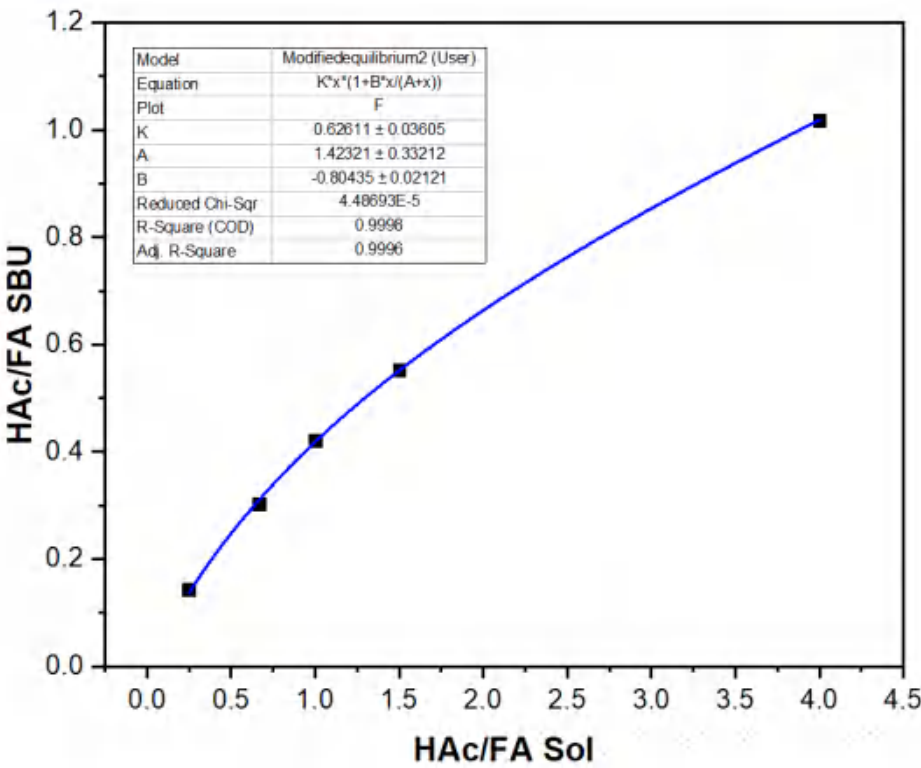
	CAS		A 修饰量(/SBU)	B 修饰量(/SBU)	C 修饰量(/SBU)
1	65-85-0	苯甲酸	2.68	2.79	2.82
2	76-05-1	三氟乙酸	2.57	2.98	2.74
3	64-19-7	醋酸	2.14	2.35	2.36
4	445-29-4		2.46	2.54	2.54
5	141-82-2		1.66	1.77	1.82
6	70-49-5		2.42	2.42	2.50
7	79-14-1		2.99	3.01	3.09
8	69-72-7		2.60	2.74	2.75

A : 浓度 0.045 M 反应时间 3 h 温度55°C  
B : 浓度 0.09 M 反应时间 3 h 温度55°C  
C : 浓度 0.09 M 反应时间 6 h 温度55°C

BTB-MOL 醋酸 修饰

	FA (mmol/L)	HAc (mmol/L)	FA (/SBU)	HAc (/SBU)
1	45	180	1.62	1.65
2	90	135	2.12	1.17
3	112.5	112.5	2.30	0.97
4	135	90	2.54	0.77
5	180	45	2.94	0.42

所用拟合公式并无微观模型支撑

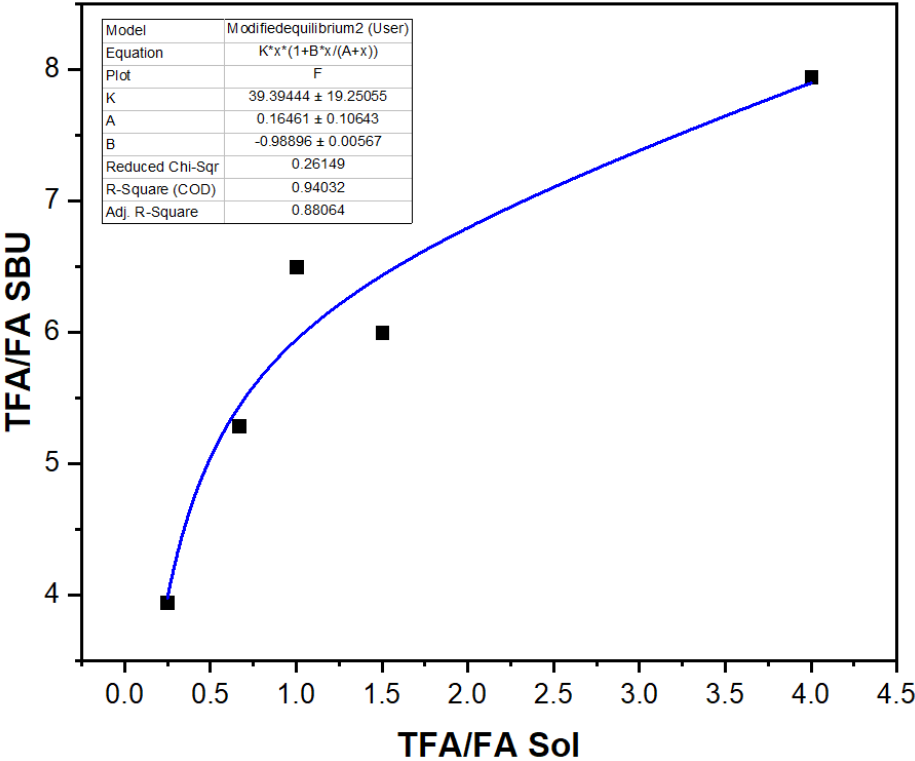




BTB-MOL 三氟乙酸 修饰

	FA (mmol/L)	TFA (mmol/L)	FA (/SBU)	TFA (/SBU)
1	45	180	0.38	3.02
2	90	135	0.48	2.88
3	112.5	112.5	0.44	2.86
4	135	90	0.56	2.96
5	180	45	0.70	2.76

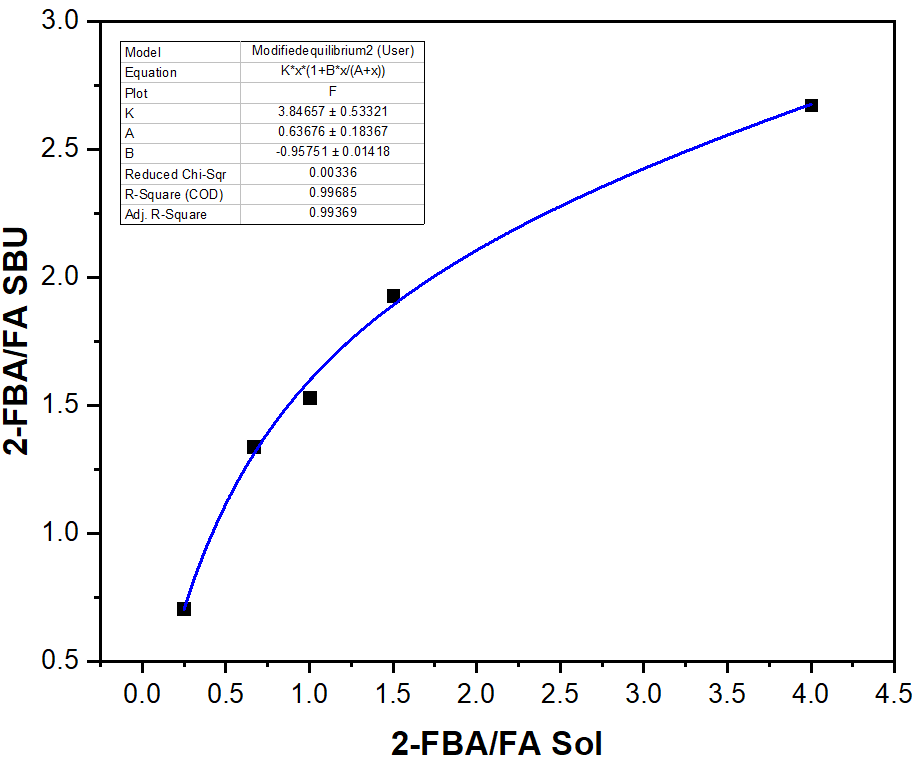
所用拟合公式并无微观模型支撑



BTB-MOL 2-氟苯甲酸 修饰

	FA (mmol/L)	2-FBA (mmol/L)	FA (/SBU)	2-FBA (/SBU)
1	45	180	0.92	2.46
2	90	135	1.14	2.20
3	112.5	112.5	1.32	2.02
4	135	90	1.42	1.90
5	180	45	1.90	1.34

所用拟合公式并无微观模型支撑



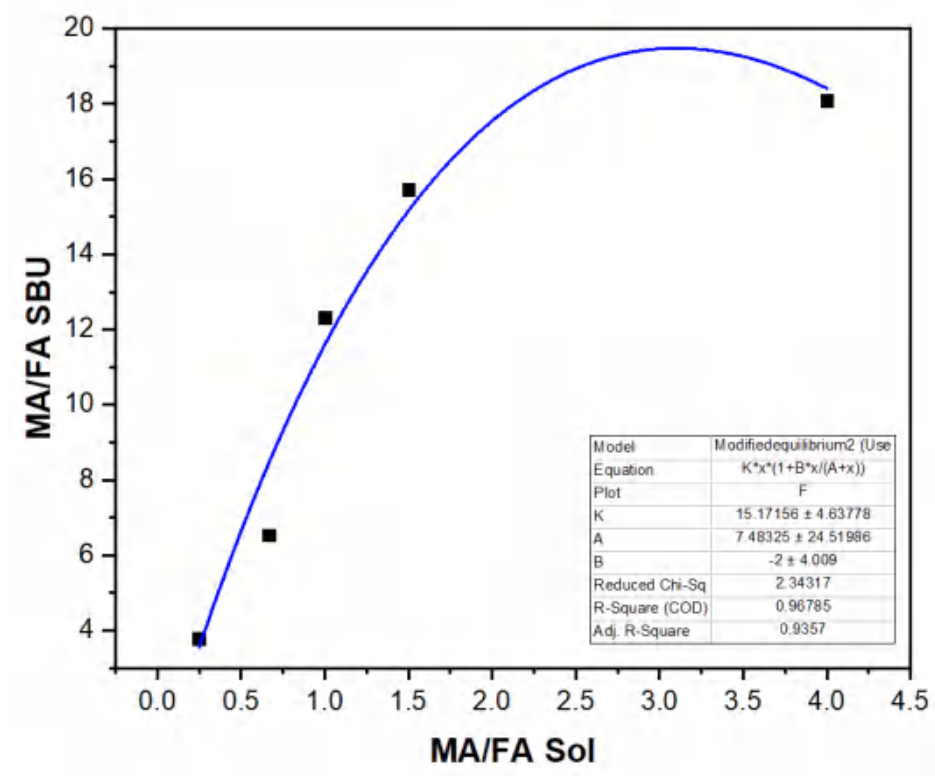


BTB-MOL 丙二酸(MA) 修饰

	FA (mmol/L)	MA (mmol/L)	FA (/SBU)	MA (/SBU)
1	45	180	0.12	2.17
2	90	135	0.14	2.2
3	112.5	112.5	0.16	1.97
4	135	90	0.28	1.83
5	180	45	0.5	1.89

pKa 1 : 2.83  
pKa 2 : 5.69

所用拟合公式并无微观模型支撑



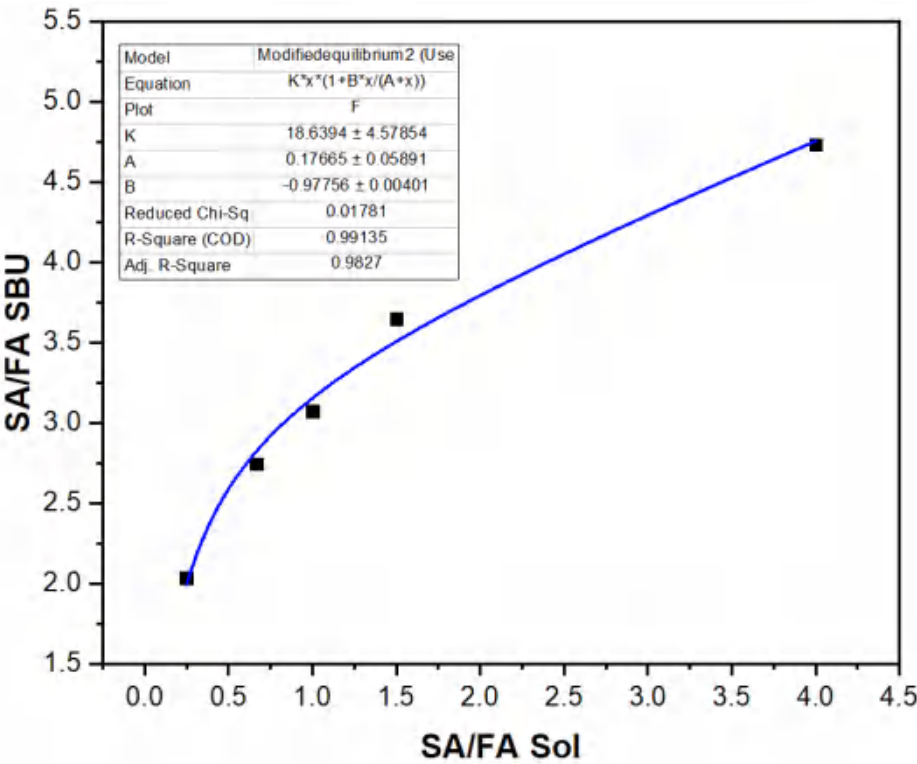


BTB-MOL 水杨酸(SA) 修饰

	FA (mmol/L)	SA (mmol/L)	FA (/SBU)	SA (/SBU)
1	45	180	0.6	2.84
2	90	135	0.74	2.7
3	112.5	112.5	0.84	2.58
4	135	90	0.94	2.58
5	180	45	1.1	2.24

pKa : 2.97

所用拟合公式并无微观模型支撑

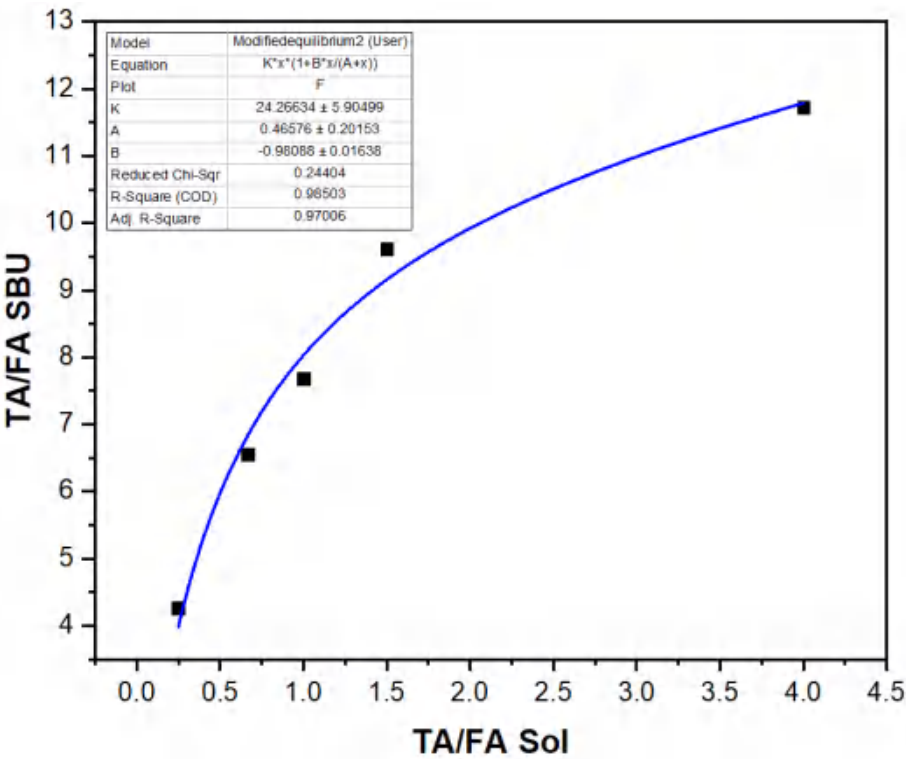


BTB-MOL 巯基丁二酸(TA) 修饰

	FA (mmol/L)	TA (mmol/L)	FA (/SBU)	TA (/SBU)
1	45	180	0.22	2.58
2	90	135	0.26	2.5
3	112.5	112.5	0.32	2.46
4	135	90	0.36	2.36
5	180	45	0.52	2.22

pKa 1 : 3.40  
pKa 2 : 4.60

所用拟合公式并无微观模型支撑





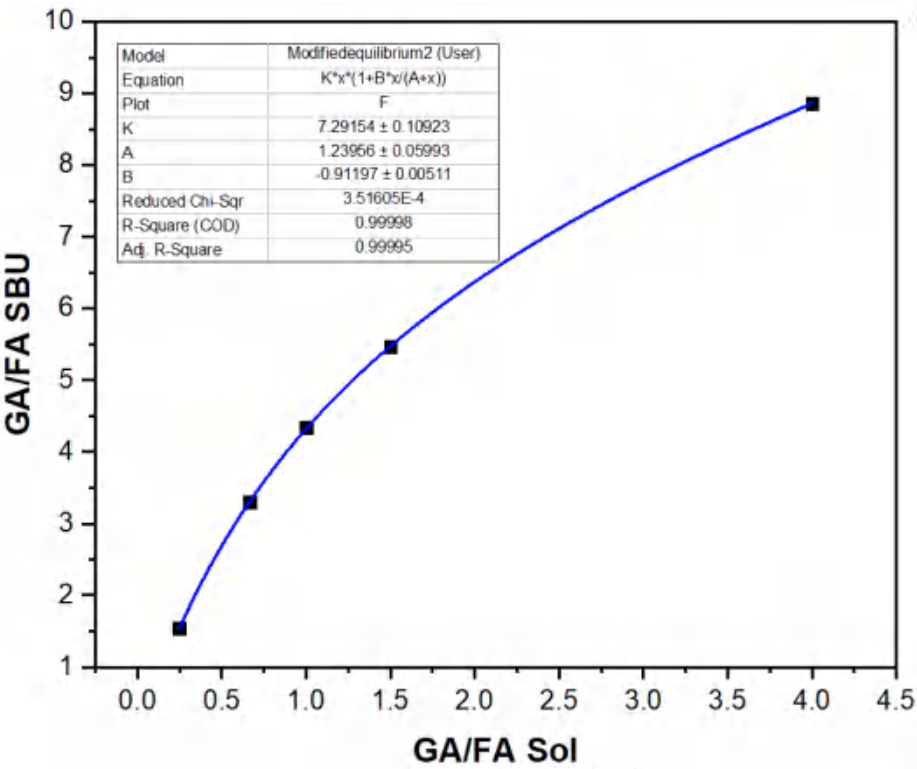


BTB-MOL 乙醇酸(GA) 修饰

	FA (mmol/L)	GA (mmol/L)	FA (/SBU)	GA (/SBU)
1	45	180	0.36	3.19
2	90	135	0.54	2.95
3	112.5	112.5	0.64	2.78
4	135	90	0.82	2.71
5	180	45	1.34	2.06

pKa : 3.83

所用拟合公式并无微观模型支撑

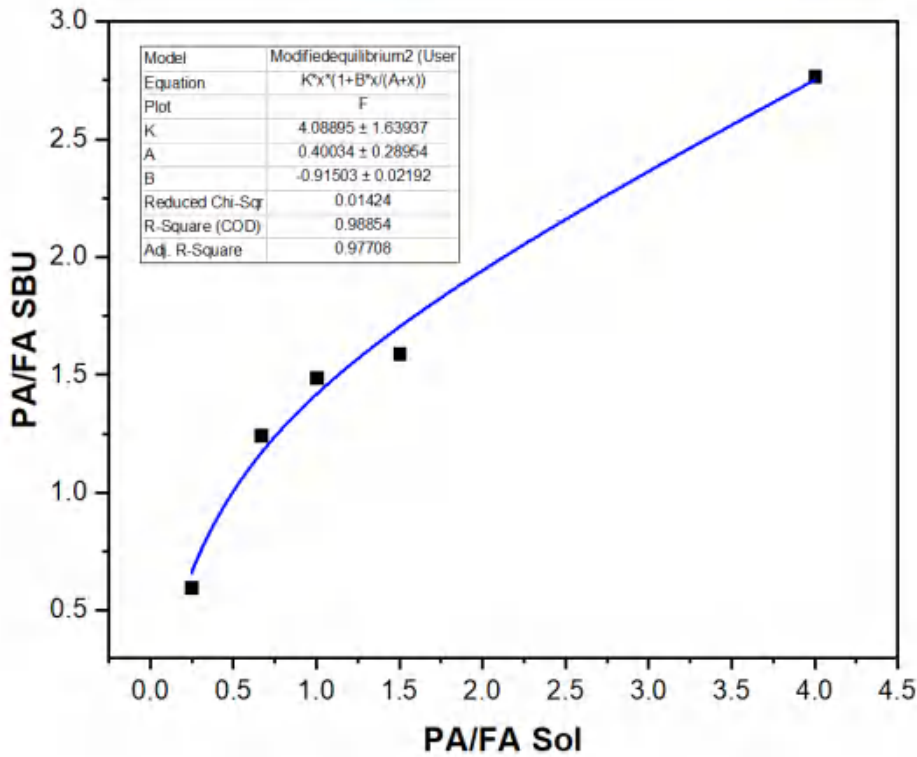


BTB-MOL 原儿茶酸(PA) 修饰

	FA (mmol/L)	PA (mmol/L)	FA (/SBU)	PA (/SBU)
1	45	180	0.6	1.66
2	90	135	0.88	1.4
3	112.5	112.5	0.94	1.4
4	135	90	1.06	1.32
5	180	45	1.34	0.8

pKa : 4.48

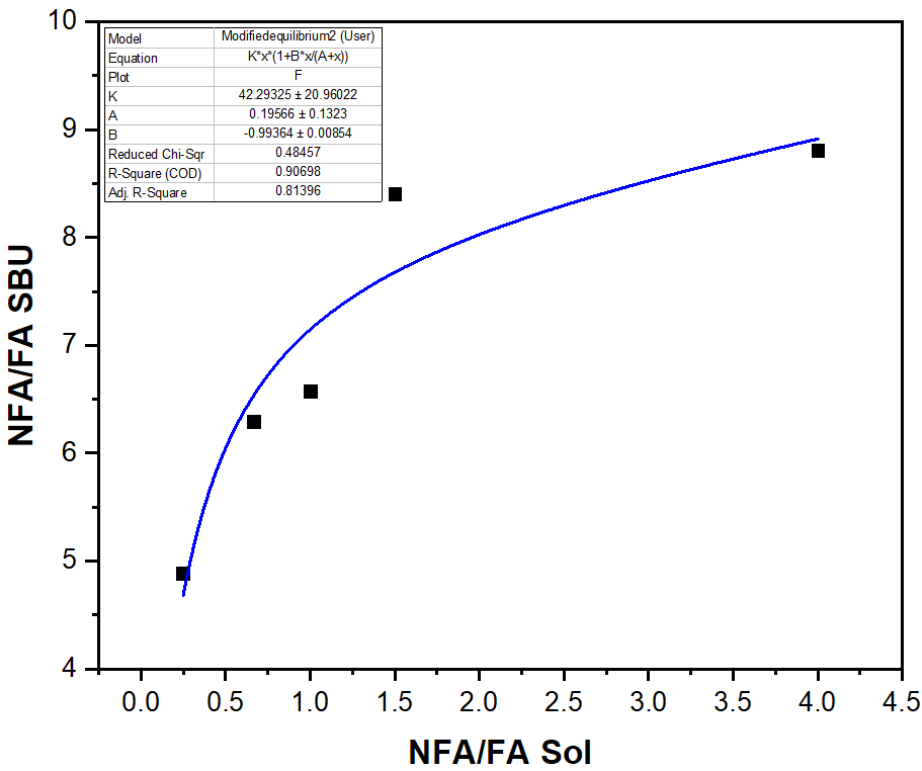
所用拟合公式并无微观模型支撑



BTB-MOL 全氟戊酸(NFA) 修饰

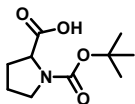
所用拟合公式并无微观模型支撑

	FA (mmol/L)	NFA (mmol/L)	FA (/SBU)	NFA (/SBU)
1	45	180	0.42	3.7
2	90	135	0.44	3.7
3	112.5	112.5	0.52	3.42
4	135	90	0.54	3.4
5	180	45	0.68	3.32



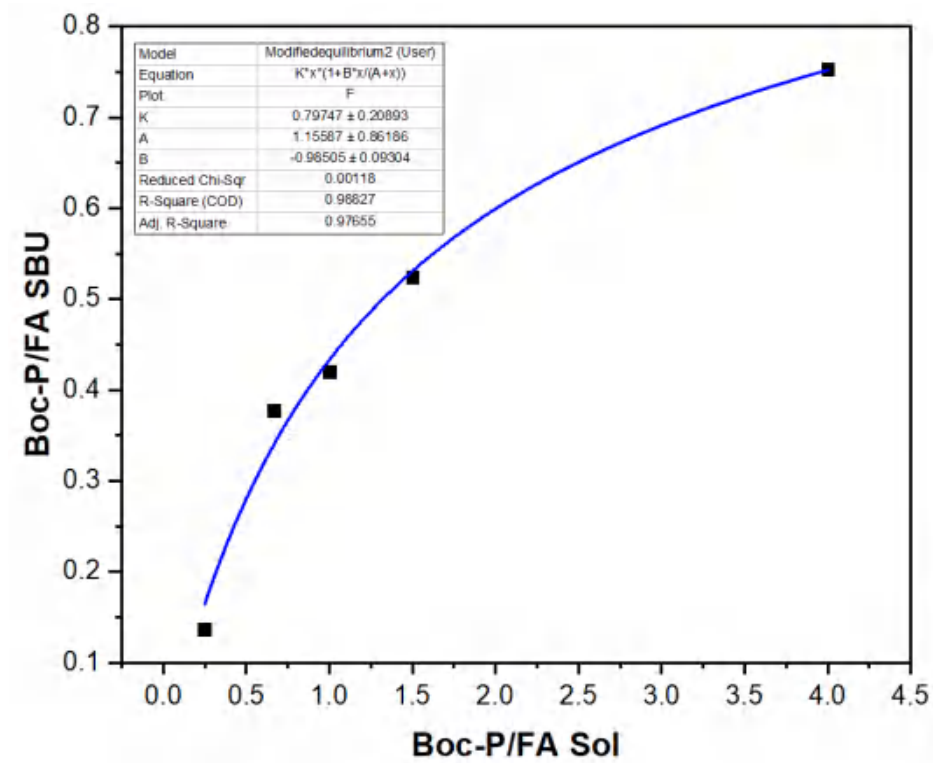


BTB-MOL **Boc-DL-脯氨酸(Boc-P)** 修饰



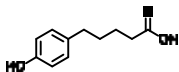
	FA (mmol/L)	Boc-P (mmol/L)	FA (/SBU)	Boc-P (/SBU)
1	45	180	1.54	1.16
2	90	135	2.06	1.08
3	112.5	112.5	2.14	0.9
4	135	90	2.28	0.86
5	180	45	3.08	0.42

所用拟合公式并无微观模型支撑



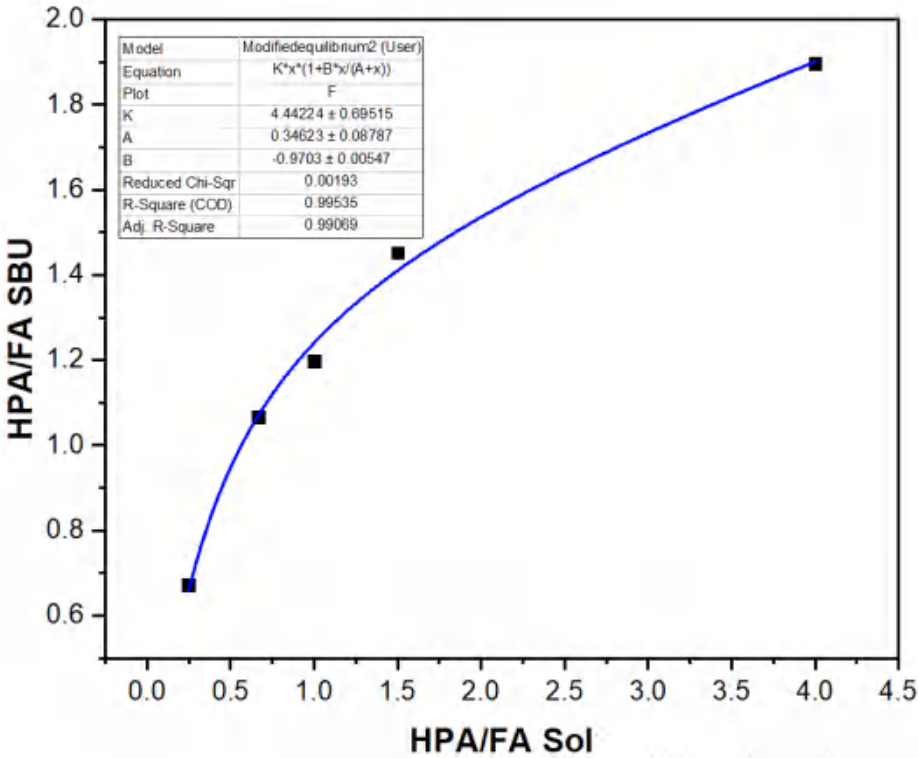


BTB-MOL 5-(4-羟基苯基)戊酸(HPA) 修饰



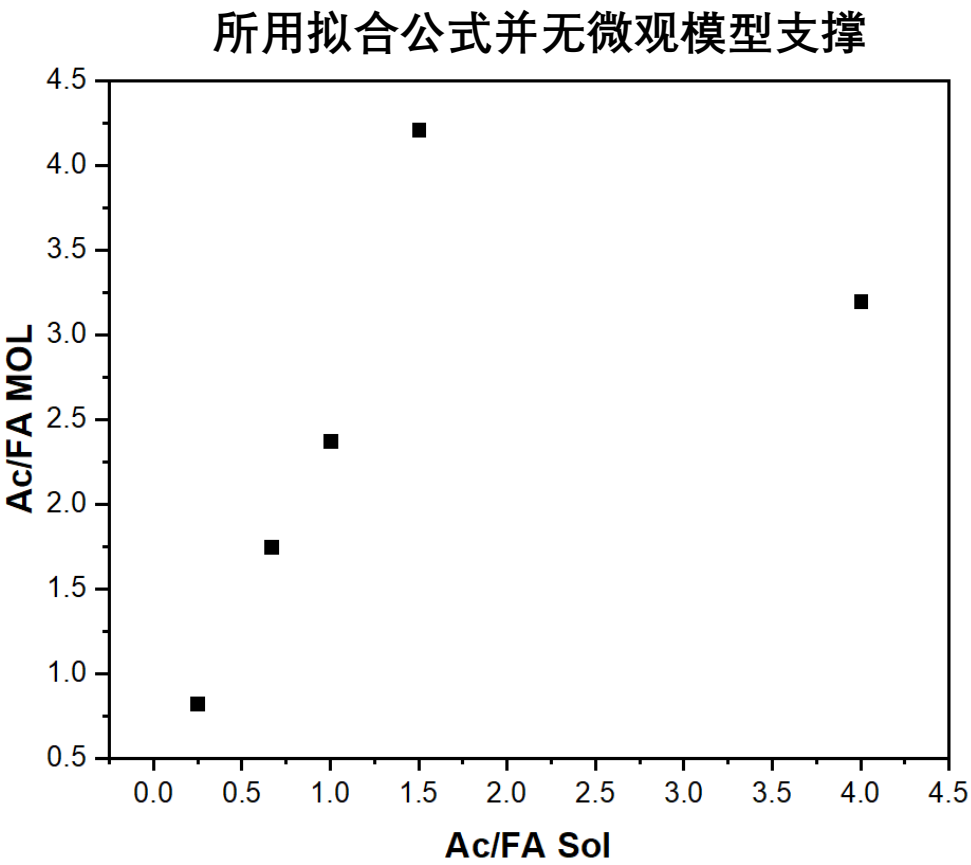
所用拟合公式并无微观模型支撑

	FA (mmol/L)	HPA (mmol/L)	FA (/SBU)	HPA (/SBU)
1	45	180	1.06	2.01
2	90	135	1.26	1.83
3	112.5	112.5	1.42	1.7
4	135	90	1.52	1.62
5	180	45	1.86	1.25



BTB-MOL 醋酸钠(NaAc) 修饰 (水)

	甲酸钠 (mmol/L)	NaAc (mmol/L)	甲酸钠 (/SBU)	NaAc (/SBU)
1	45	180	0.20	0.64
2	90	135	0.14	0.59
3	112.5	112.5	0.24	0.57
4	135	90	0.28	0.49
5	180	45	0.50	0.41



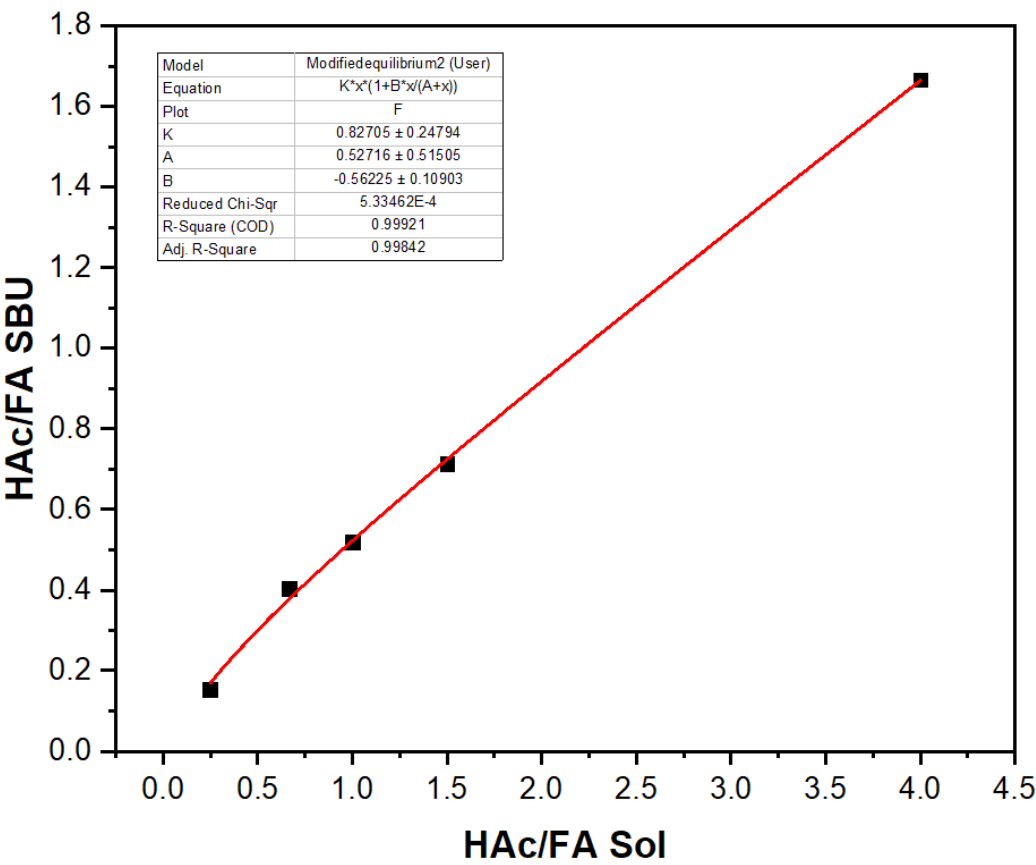
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-NaAc-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-NaAc-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-NaAc-3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-NaAc-4  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-NaAc-5

BTB-MOL 醋酸 修饰（水）

pKa : 4.76

	FA (mmol/L)	HAc (mmol/L)	FA (/SBU)	HAc (/SBU)
1	45	180	1.02	1.70
2	90	135	1.5	1.07
3	112.5	112.5	1.64	0.85
4	135	90	1.46	0.59
5	180	45	2.02	0.31

所用拟合公式并无微观模型支撑



D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241101-BTBMOL-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241101-BTBMOL-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241101-BTBMOL-3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241101-BTBMOL-4  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241104-BTBMOL-5

BTB-MOL 三氟乙酸钠(NaAc) 修饰

	甲酸钠 (mmol/L)	TFNa (mmol/L)	甲酸钠 (/SBU)	TFNa (/SBU)
1	45	180	0.06	0
2	90	135	0.06	0
3	112.5	112.5	0.04	0
4	135	90	0.16	0
5	180	45	0.36	0

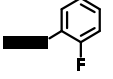
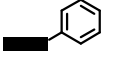
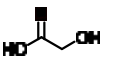
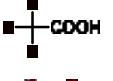
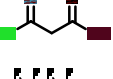
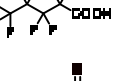
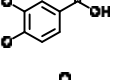
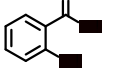
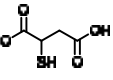

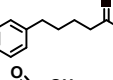
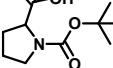
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-TFNa-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-TFNa-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-TFNa-3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-TFNa-4  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240808-BTB-TFNa-5

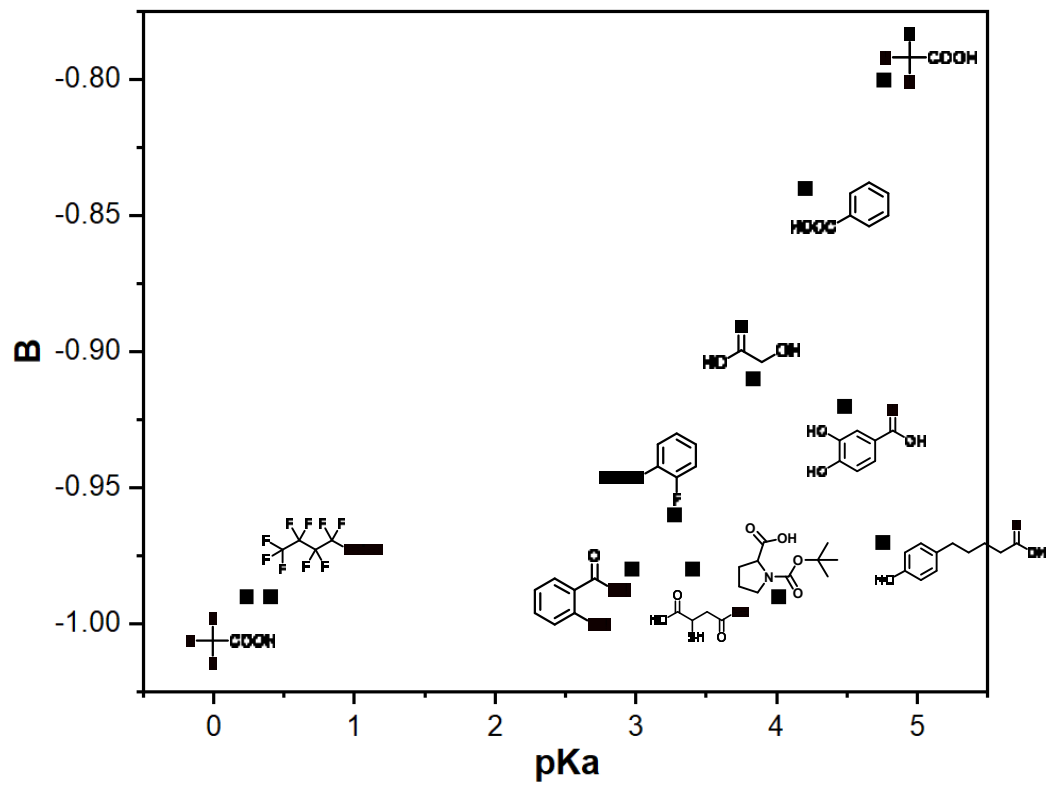
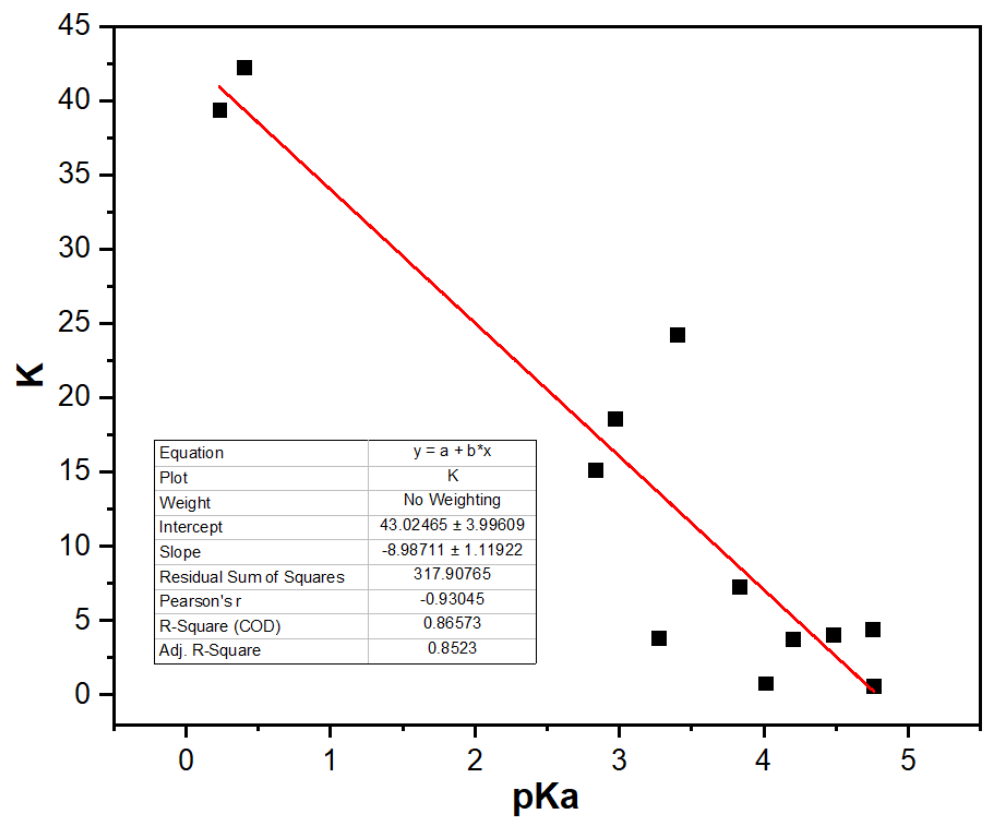
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240809-BTB-MOL-TFNa-1-F19  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240809-BTB-MOL-TFNa-2-F19  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240809-BTB-MOL-TFNa-3-F19  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240809-BTB-MOL-TFNa-4-F19  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240809-BTB-MOL-TFNa-5-F19



$$y=K*x*(1+B*x/(A+x)) \quad [A \geq 1/K, -2 \leq B < 0]$$

所用拟合公式并无微观模型支撑

CAS	结构式	缩写	pKa	K	A	B
445-29-4		2-FBA	3.27	3.85	0.64	-0.96
65-85-0		BA	4.20	3.77	0.16	-0.84
79-14-1		GA	3.83	7.29	1.24	-0.91
64-19-7		HAc	4.76	0.63	1.42	-0.80
141-82-2		MA	2.83 5.69	15.17	7.48	-2
2706-90-3		NFA	0.40	42.29	0.20	-0.99
99-50-3		PA	4.48	4.09	0.40	-0.92
69-72-7		SA	2.97	18.64	0.18	-0.98
70-49-5		TA	3.40 4.60	24.27	0.47	-0.98
76-05-1		TFA	0.23	39.39	0.16	-0.99
4654-08-4		HPA	4.75	4.44	0.35	-0.97
59433-50-0		Boc-P	4.01	0.80	1.16	-0.99



BTB-MOL 苯甲酸修饰（三乙胺）

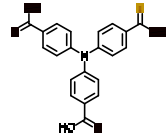
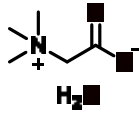
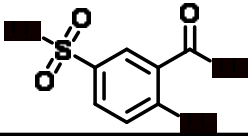
	苯甲酸 (mmol/L)	三乙胺 (mmol/L)	甲酸 (/SBU)	苯甲酸 (/SBU)
1	4.5	-	0.86	2.25
2	2.25	-	1.12	1.88
3	4.5	2.25	0.88	2.27
4	2.25	2.25	1.10	2.06

先用三氟乙酸修饰

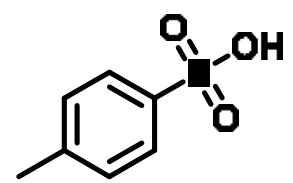
	苯甲酸 (mmol/L)	三乙胺 (mmol/L)	三氟乙酸 (/SBU)	甲酸 (/SBU)	苯甲酸 (/SBU)
1	-	-	2.72	0.26	-
2	4.5	-	2.08	0.16	0.72
3	4.5	2.25	0	0.26	2.94

D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240821-BTBMOL-TFA-0  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240821-BTBMOL-TFA-0-F19  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240821-BTBMOL-TFA-1-BA  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240821-BTBMOL-TFA-1-BA-F19  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240821-BTBMOL-TFA-2-BA-TEA  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20240821-BTBMOL-TFA-2-BA-TEA-F19

BTB-MOL 先用三氟乙酸修饰 再修饰其他羧酸分子（加三乙胺）

		小分子 (mmol/L)	三乙胺 (mmol/L)	小分子 (/SBU)
1		4.5	2.25	0.56
2	醋酸钠	4.5	2.25	0.32
3		4.5	2.25	0.07
4	甘氨酸	4.5	2.25	-
5		4.5	2.25	0.68

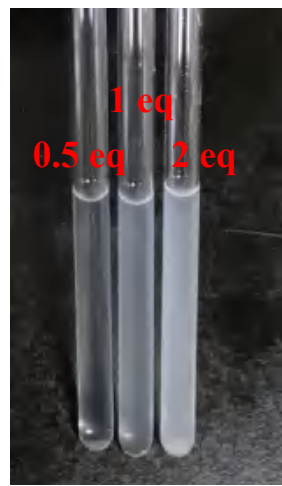
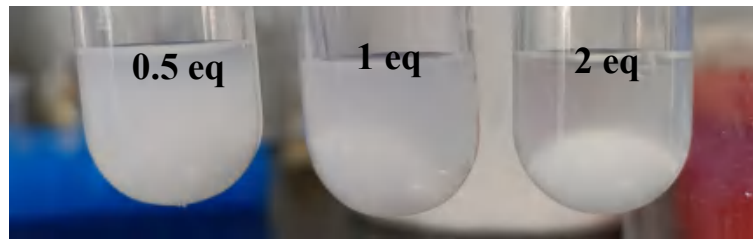
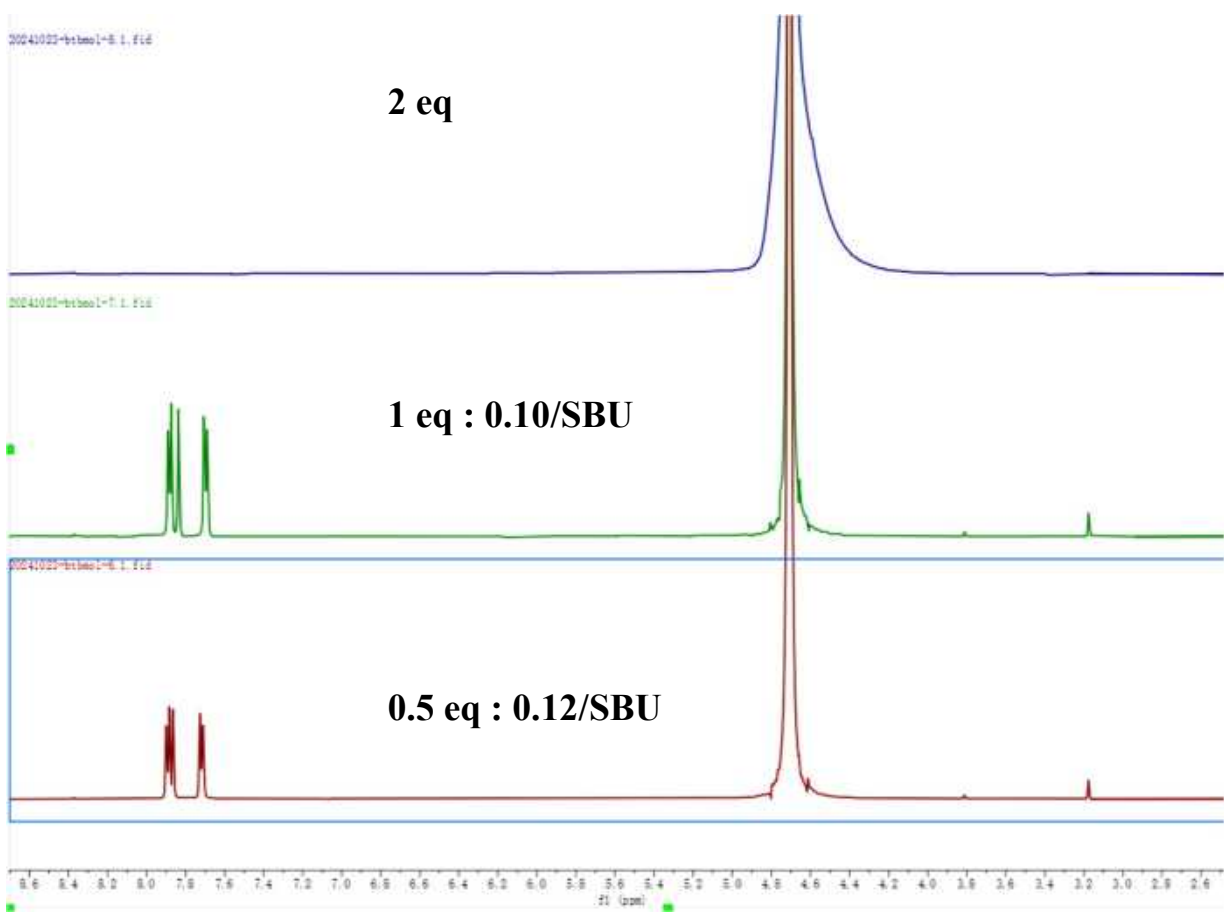
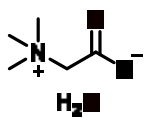
用酸性较强的酸处理



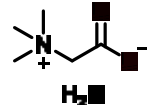
对甲苯磺酸 (PTSA)  
pKa = -0.43±0.5 (predicted)

	PTSA (mmol/L)	羧酸 (mmol/L)		PTSA (/SBU)	羧酸 (/SBU)
1	-	BMH 90			0.2
2	-	MA 90			1.77
3	-	HAc 90			2.35
4	90	BMH 90		0.67	0.48
5	90	MA 90		0.2	1.02
6	90	HAc 90		0.53	0.42

加入不同量的NaOH水溶液处理，修饰BMH

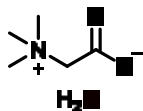


探究静电相互作用的影响

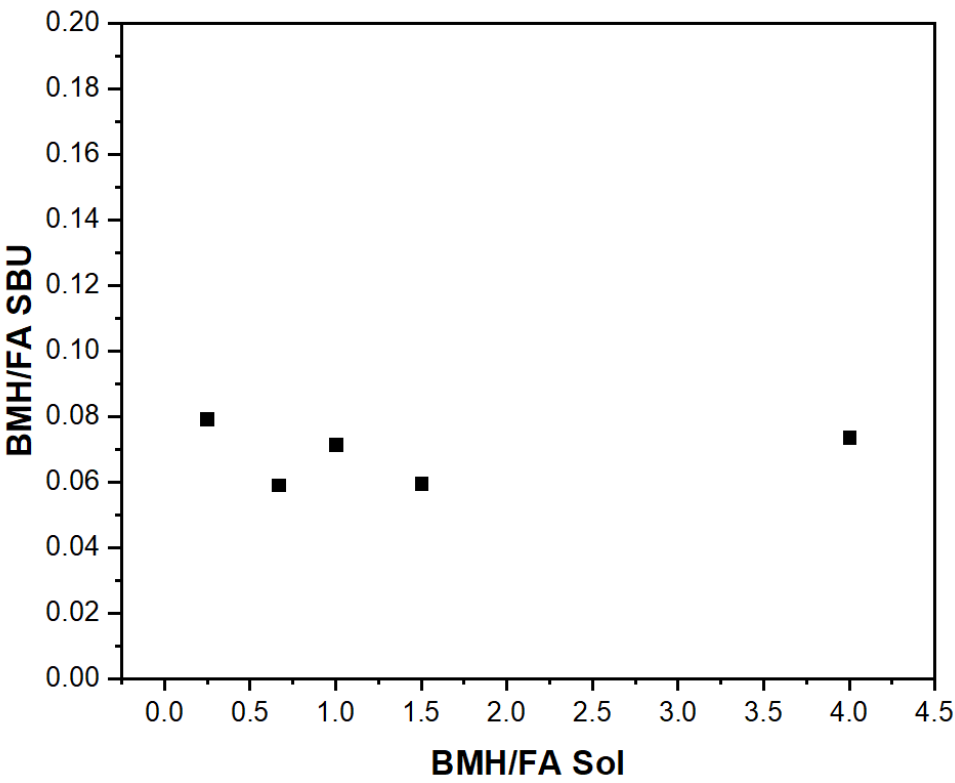
	羧酸 (mmol/L)	BMH (mmol/L) 	羧酸 (/SBU)	BMH (/SBU)
1		30	-	0.2
2	BA 30	30	2.38	0.28
3	BA 60	30	2.51	0.28
4	TFA 30	30	1.87	0.45
5	TFA 60	30	2.28	0.51
6	MA 30	30	1.79	0.37
7	MA 60	30	1.92	0.36

溶剂： 0.9 mL 乙腈 + 0.1 mL 水

BTB-MOL 一水甜菜碱 修饰



	FA (mmol/L)	BMH (mmol/L)	FA (/SBU)	BMH (/SBU)
1	45	180	1.90	0.14
2	90	135	1.68	0.10
3	112.5	112.5	2.10	0.15
4	135	90	2.20	0.13
5	180	45	2.02	0.16





BTB-MOL 甘氨酸 修饰

pKa : 2.35

	FA (mmol/L)	G (mmol/L)	FA (/SBU)	G (/SBU)
1	45	180	1.4	0
2	90	135	1.38	0
3	112.5	112.5	1.32	0
4	135	90	1.32	0
5	180	45	1.36	0

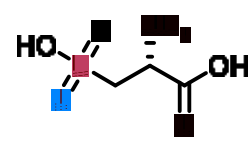
溶剂：水

	FA (mmol/L)	G (mmol/L)	FA (/SBU)	G (/SBU)
1	45	180	1.12	0
2	90	135	1.22	0
3	112.5	112.5	1.2	0
4	135	90	1.24	0
5	180	45	1.16	0

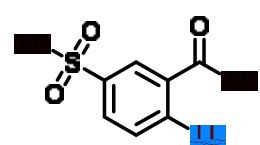
溶剂：0.2 M NaCl 水溶液

D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241114-btb-G1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241114-btb-G2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241114-btb-G3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241114-btb-G4  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241114-btb-G5

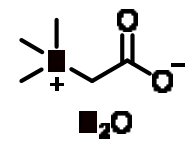
探究静电相互作用的影响



CA



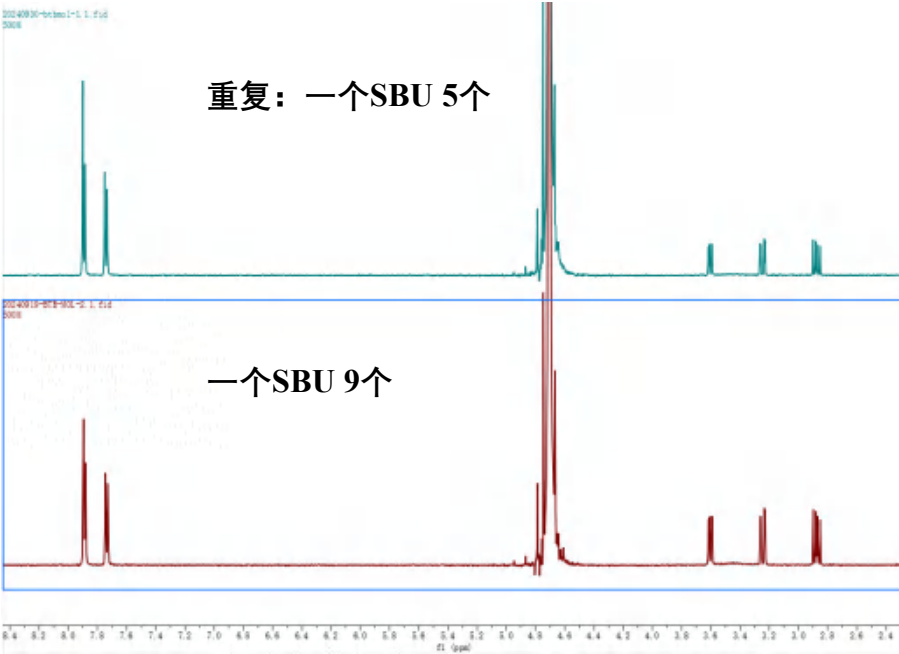
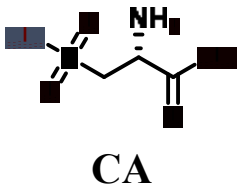
SSA



BMH

	磺酸 (mmol/L)	BMH (mmol/L)	磺酸 (/SBU)	BMH (/SBU)
1	-	90		0.2
2	CA 90	-	9	
3	SSA 90	-	0.9	
5	CA 90	90	2.1	0.2
4	SSA 90	90	0.8	0.78

溶剂： 0.7 mL 乙腈 + 0.3 mL 水



	FA (mmol/L)	CA (mmol/L)	FA (/SBU)	CA (/SBU)
1	45	180	0	5.60
2	90	135	0	5.14
3	112.5	112.5	0	4.68
4	135	90	0.08	4.38
5	180	45	0.26	2.88

溶剂: 0.6 mL 乙腈 + 0.4 mL 水

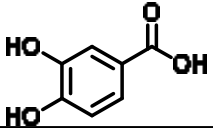
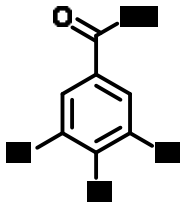
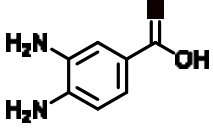
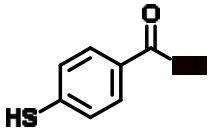
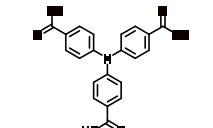
探究静电相互作用的影响

	SSA (mmol/L)	BMH (mmol/L)	SSA (/SBU)	BMH (/SBU)
1	45	180	0.39	0.31
2	90	135	0.38	0.30
3	112.5	112.5	0.36	0.31
5	135	90	0.44	0.34
4	180	45	0.48	0.35

	SSA (mmol/L)	BMH (mmol/L)	SSA (/SBU)	BMH (/SBU)
1	45	180	0.39	0.32
2	112.5	112.5	0.43	0.36
3	180	45	0.50	0.37

BTB-MOL EDA 分子对修饰

	Donor		Acceptor		solvent	D/SBU	A/SBU
1		0.045 M		0.045 M	DMF	0	2.42
2		0.045 M		0.045 M	DMF	0	1.93
3		0.045 M		0.045 M	DMF	0.36	2.34
4		0.045 M		0.045 M	DMF	0.42	2.28

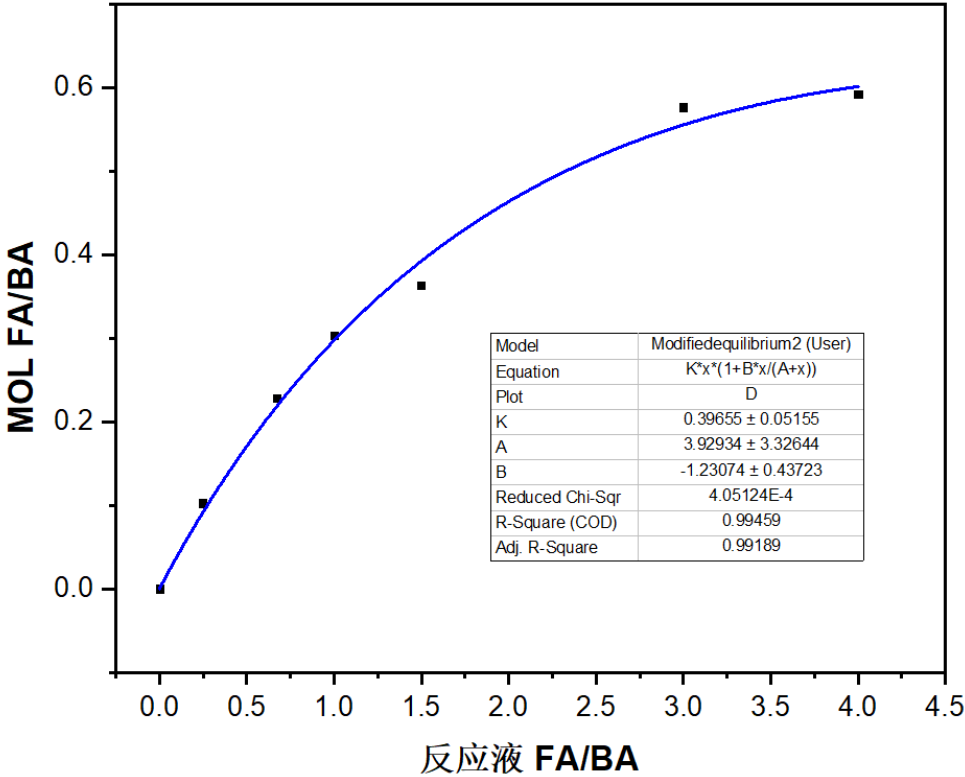
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241121-BTBMOL-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241121-BTBMOL-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241121-BTBMOL-3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\modifier\20241121-BTBMOL-4

**BTB-MOL-OH**



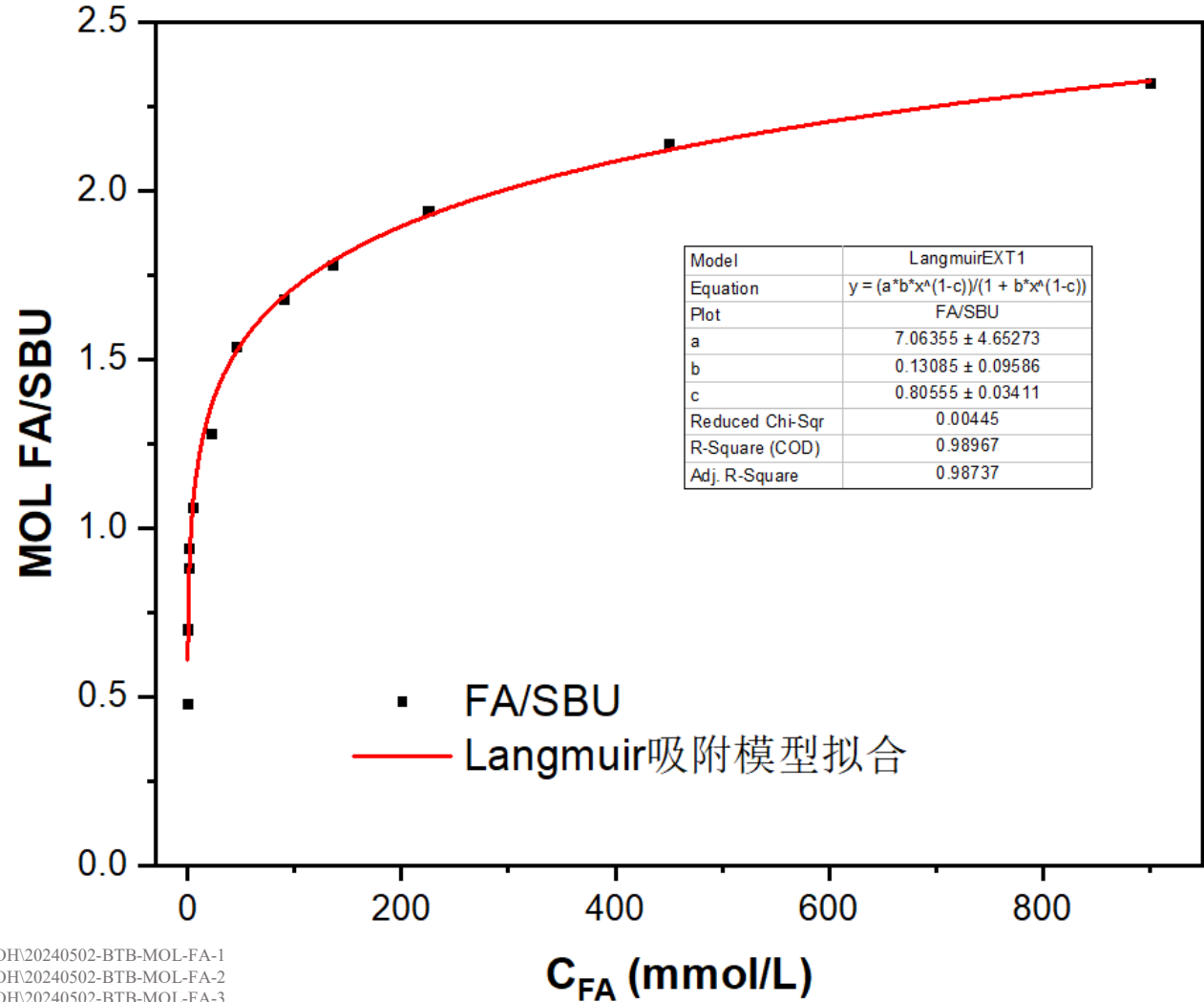
所用拟合公式并无微观模型支撑

反应液 FA/BA	FA/BTB	BA/BTB	FA/BA
0	0	0.41	0
0.25	0.04	0.39	0.1026
0.67	0.08	0.35	0.2286
1	0.10	0.33	0.3030
1.5	0.12	0.33	0.3636
3	0.15	0.26	0.5769
4	0.16	0.27	0.5926



# Hf-BTB-MOL-OH (H<sub>2</sub>O)

甲酸修饰（不加水）

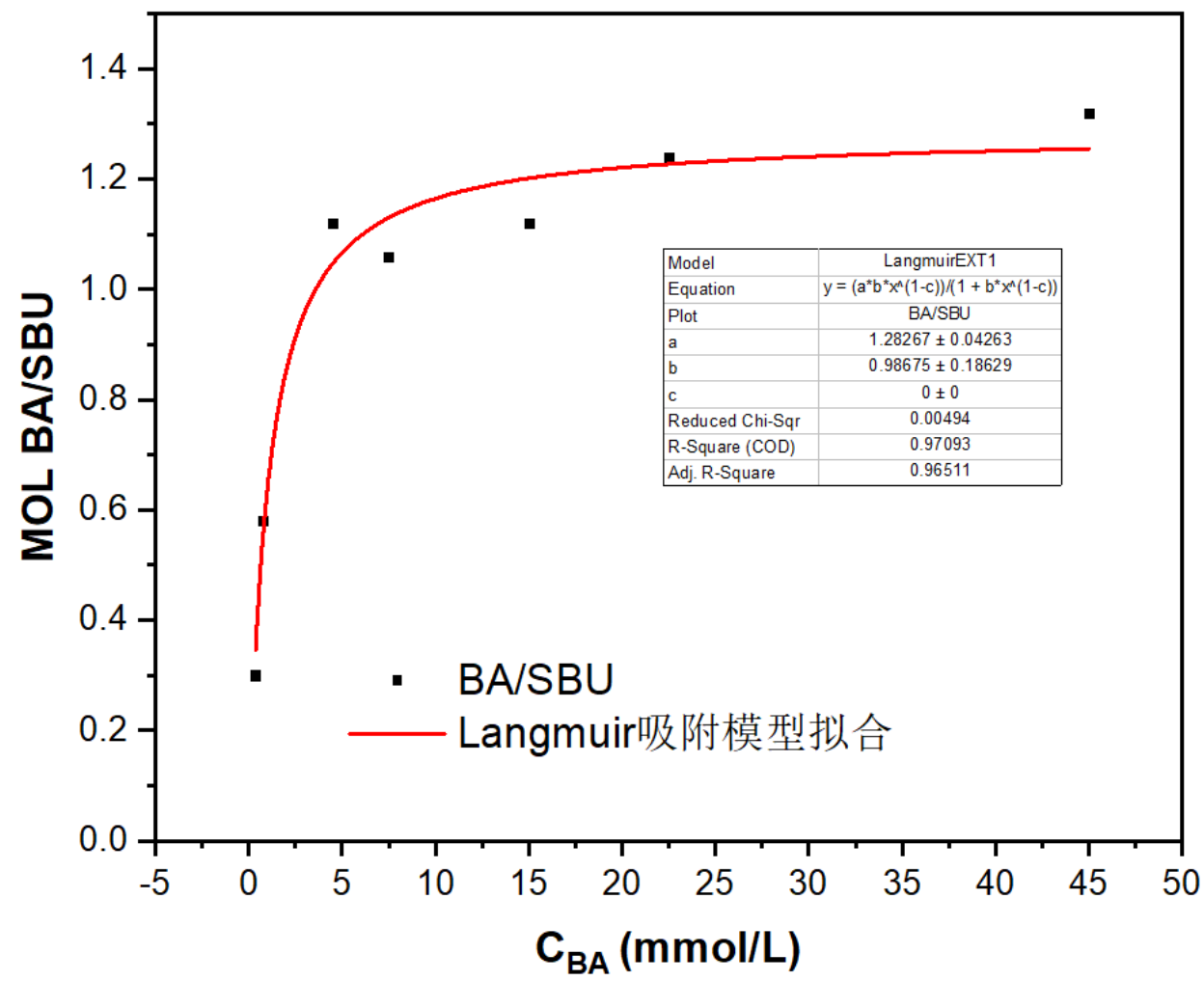


所用拟合公式并无微观模型支撑

D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240502-BTB-MOL-FA-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240502-BTB-MOL-FA-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240502-BTB-MOL-FA-3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240505-BTB-MOL-FA-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240505-BTB-MOL-FA-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240505-BTB-MOL-FA-3



苯甲酸修饰 (不加水)



探究水对甲酸修饰的影响

	FA	FA (mmol/L)	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O (mmol/L)	FA/SBU
0426	1 eq	4.5	-	-	1.06
1	1 eq	4.5	-	-	1.26
2	1 eq	4.5	30 eq	135	1.22
3	1 eq	4.5	300 eq	1350	0.94
4	1 eq	4.5	3000 eq	13500	0.82

D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240521-btb-mol-FA-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240521-btb-mol-FA-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240521-btb-mol-FA-3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240521-btb-mol-FA-4

探究水对甲酸修饰的影响

	FA	FA (mmol/L)	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O (mmol/L)	FA/SBU
0505	200 eq	900	-	-	2.32
1	200 eq	900	-	-	1.94
2	200 eq	900	90 eq	405	1.78
3	200 eq	900	900 eq	4050	1.92
4	200 eq	900	9000 eq	40500	1.60

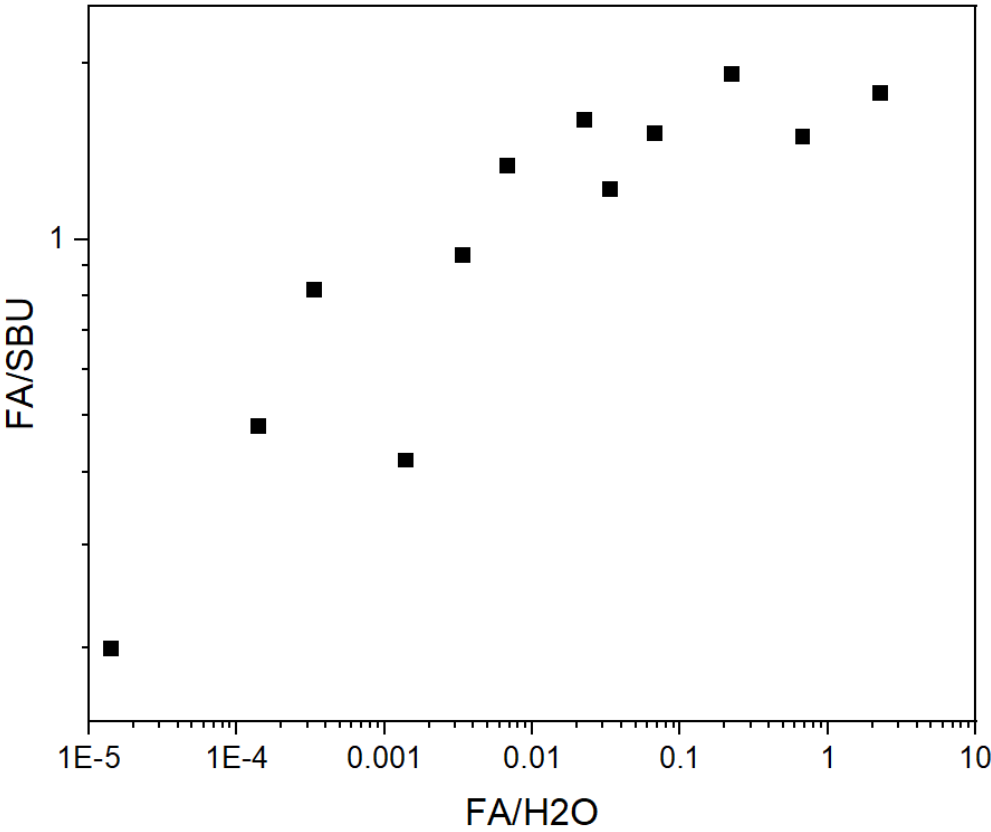
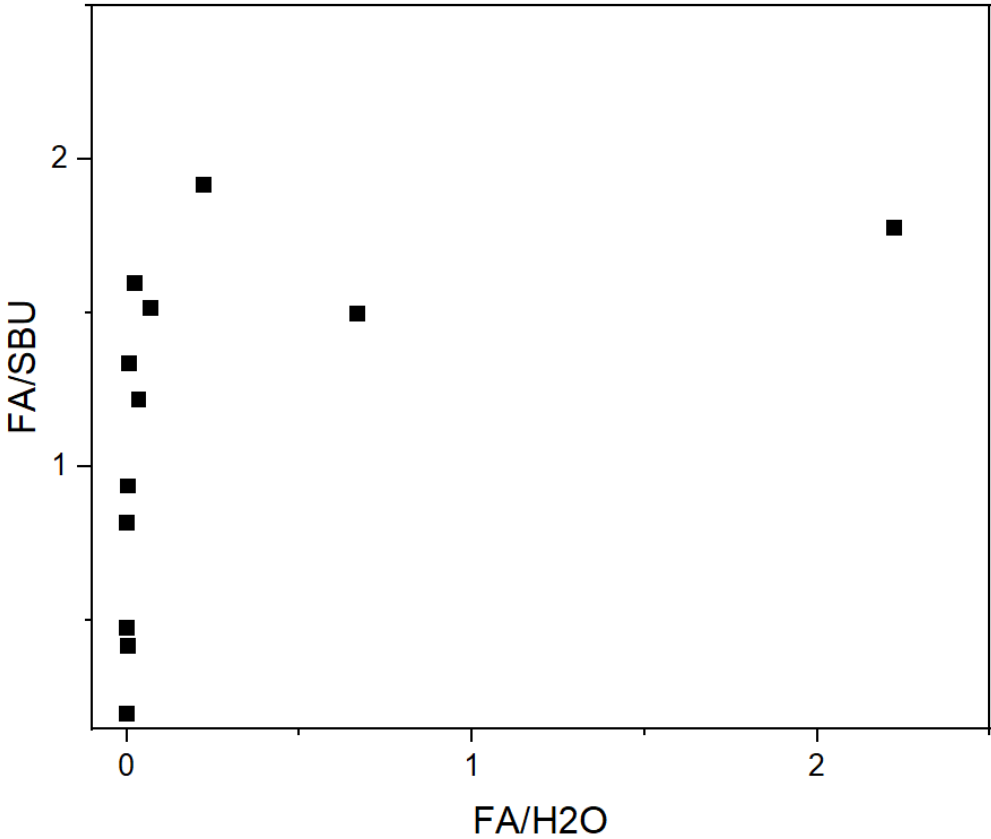
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240523-btb-mol-FA-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240523-btb-mol-FA-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240523-btb-mol-FA-3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240523-btb-mol-FA-4

探究水对甲酸修饰的影响

	FA	FA (mmol/L)	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O (mmol/L)	FA/SBU
1	1/24 eq	0.1875	30 eq	135	0.42
2	1/24 eq	0.1875	300 eq	1350	0.48
3	1/24 eq	0.1875	3000 eq	13500	0.20
4	20 eq	90	30 eq	135	1.50
5	20 eq	90	300 eq	1350	1.52
6	20 eq	90	3000 eq	13500	1.34

D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240602-btb-mol-h2o-FA-1  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240602-btb-mol-h2o-FA-2  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240602-btb-mol-h2o-FA-3  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240602-btb-mol-h2o-FA-4  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240602-btb-mol-h2o-FA-5  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240602-btb-mol-h2o-FA-6

探究水对甲酸修饰的影响 (12个点)



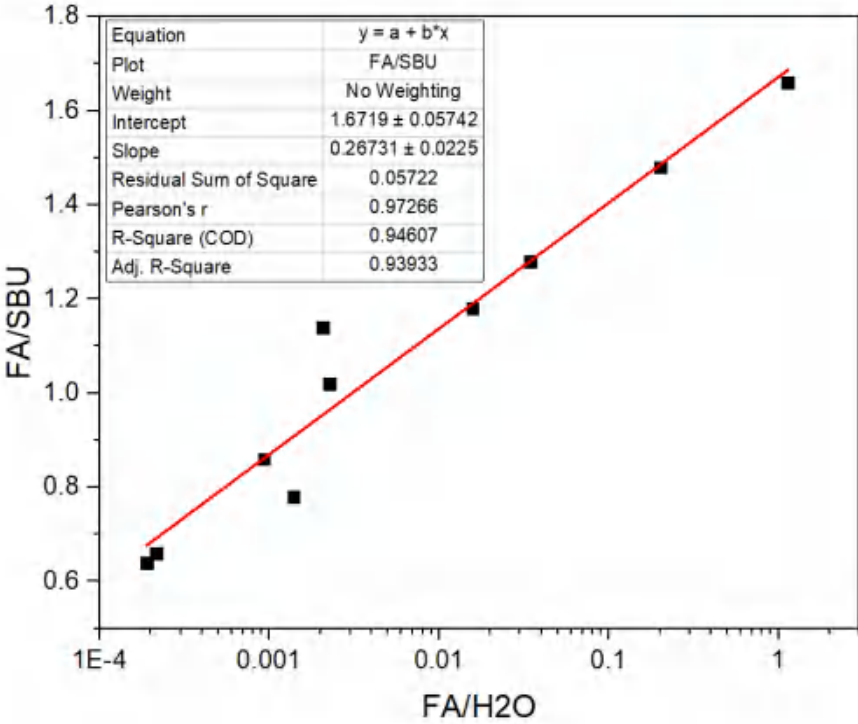
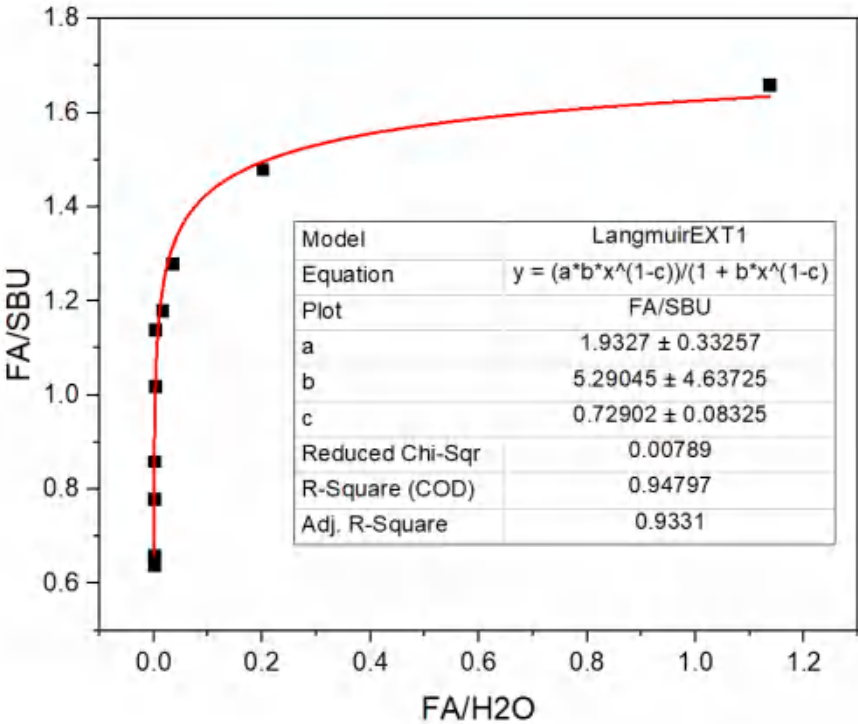
# Hf-BTB-MOL-OH (H<sub>2</sub>O)

探究水对甲酸修饰的影响（10个点）

林赫布点

	A(X1)	B(X2)	C(X3)	D(Y3)
Long Name	FA(mmol/L)	H2O(mmol/L)	FA/H2O	FA/SBU
Units				
Comments				
F(x)=	Col(A)/Col(B)			
1	0.56659	2936.92393	1.89516E-4	0.64
2	0.76663	554.13659	0.00139	0.78
3	2.57093	11913.9367	2.15792E-4	0.66
4	4.37323	4710.16102	9.28468E-4	0.86
5	8.74647	3878.95614	0.00225	1.02
6	12.19205	775.79123	0.01572	1.18
7	34.45579	997.44586	0.03454	1.28
8	50.35846	24382.00999	0.00207	1.14
9	55.65935	277.0683	0.20089	1.48
10	251.79231	221.65464	1.13597	1.66

所用拟合公式并无微观模型支撑



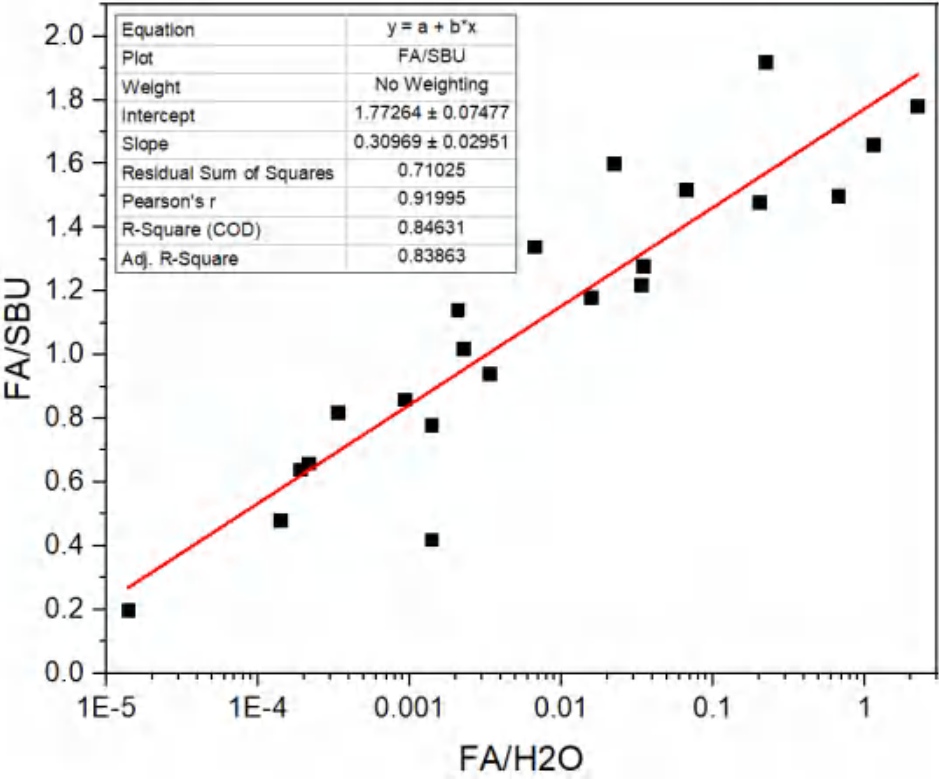
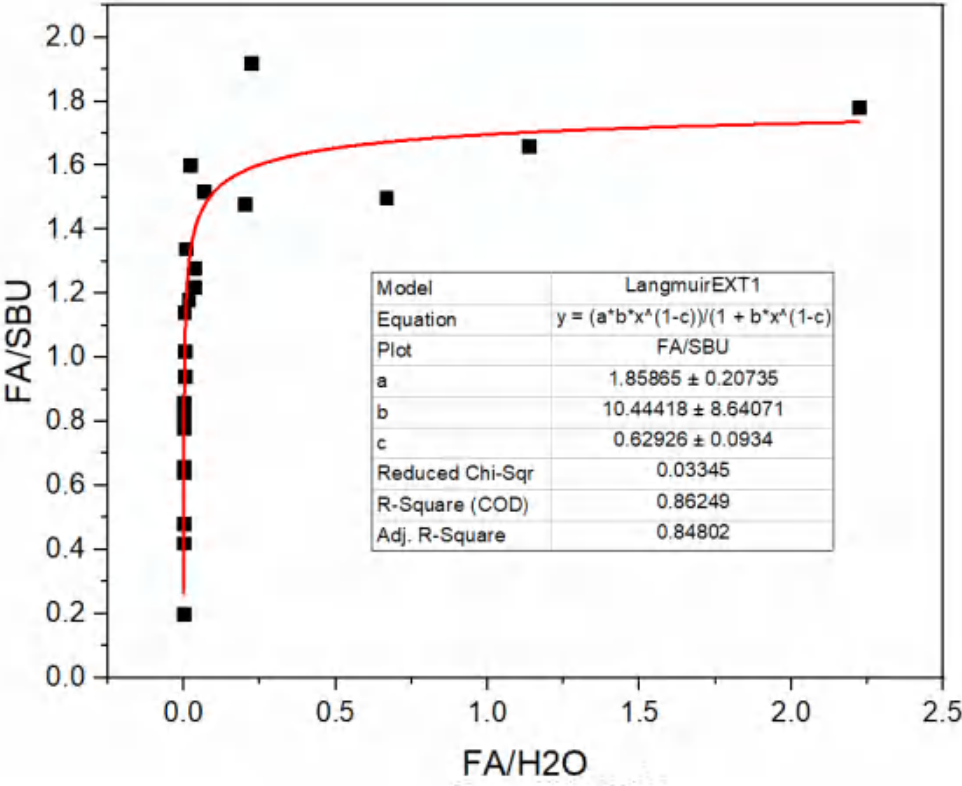
D:\642\MOL surface n  
D:\642\MOL surface n  
D:\642\MOL surface n  
D:\642\MOL surface n  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240616-5-btb-mol-fah2o

n\shuju\nmr\Hf-BTB  
n\shuju\nmr\Hf-BTB  
n\shuju\nmr\Hf-BTB  
n\shuju\nmr\Hf-BTB  
D:\642\MOL surface modification\shuju\nmr\Hf-BTB-MOL-OH\20240616-10-btb-mol-fah2o

# Hf-BTB-MOL-OH (H<sub>2</sub>O)

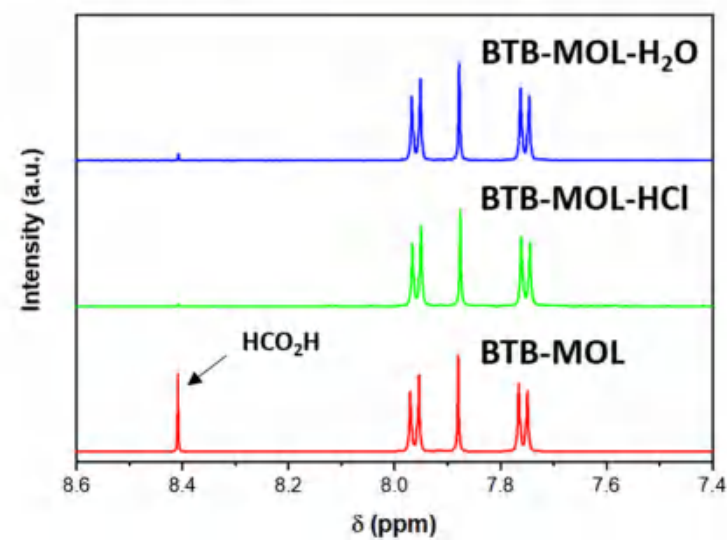
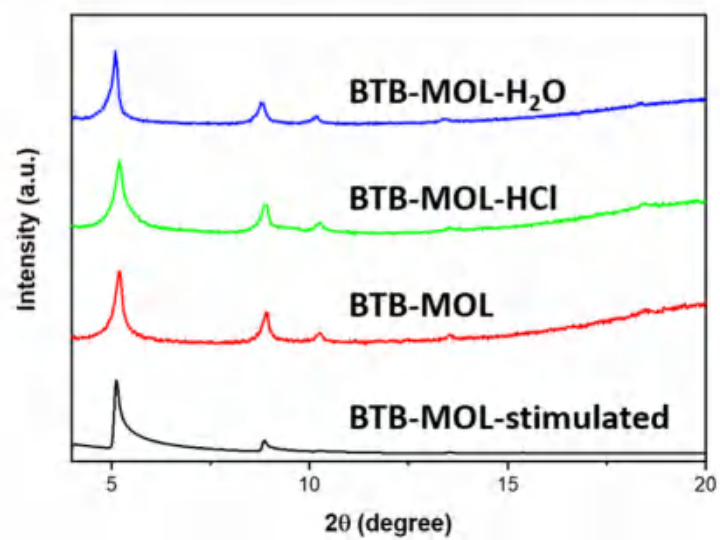
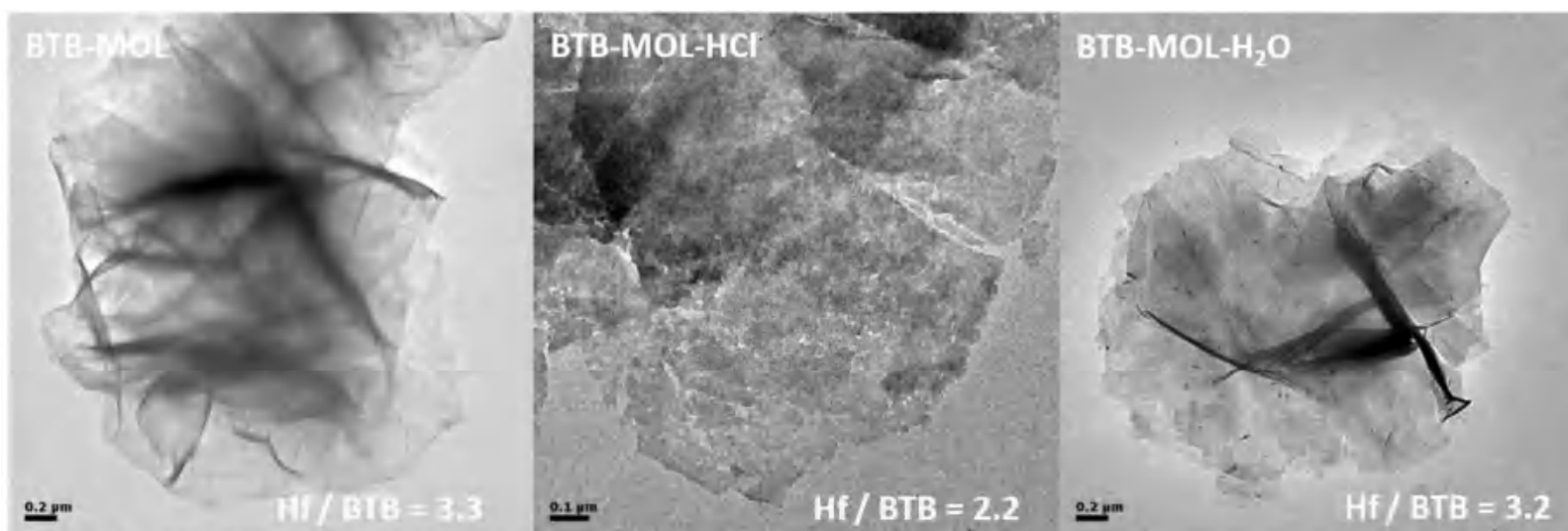
探究水对甲酸修饰的影响 (12+10个点)

所用拟合公式并无微观模型支撑



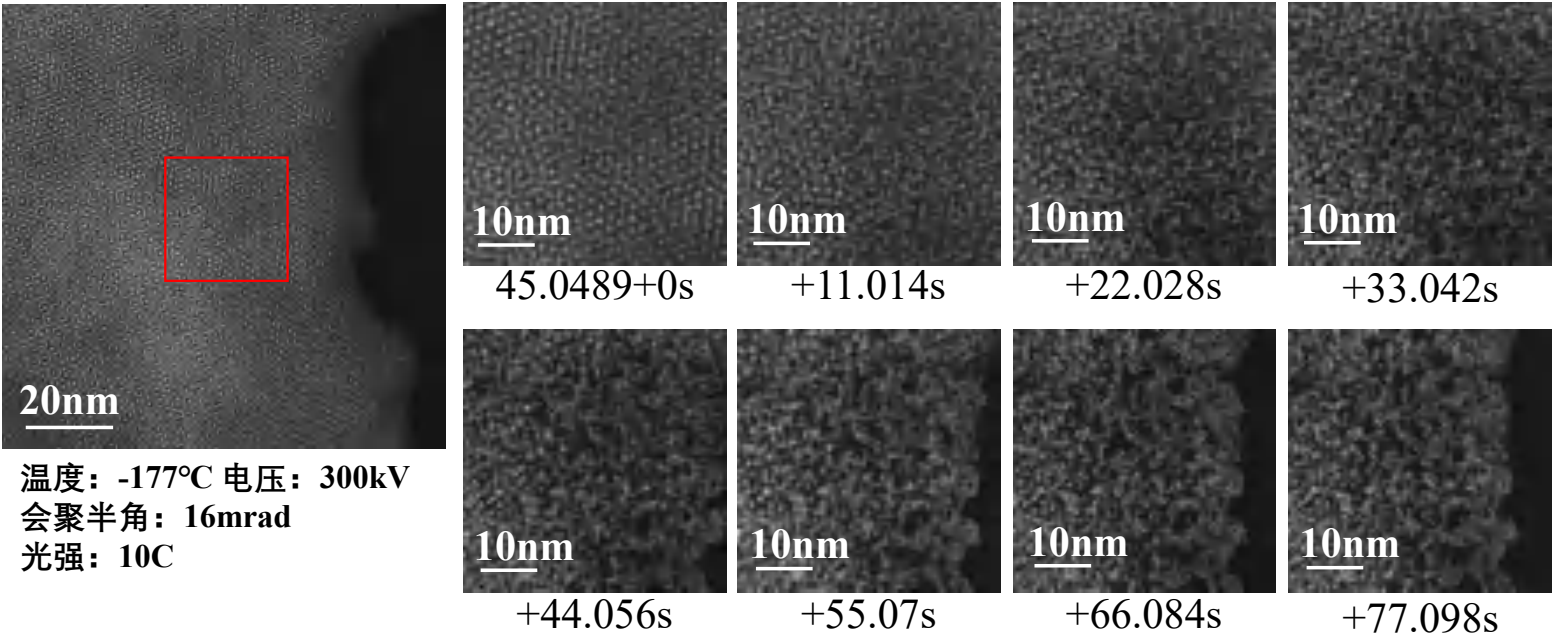
电镜、热质联用、原位红外等表征数据





样品: Hf-BTB-MOL-HCl

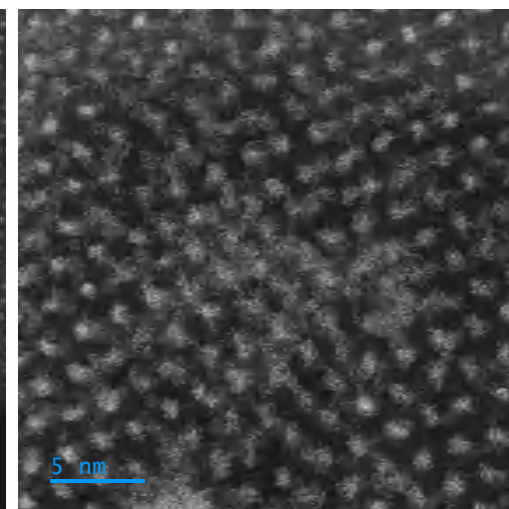
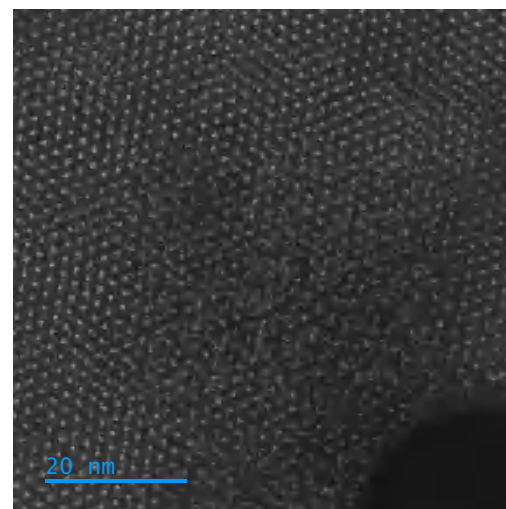
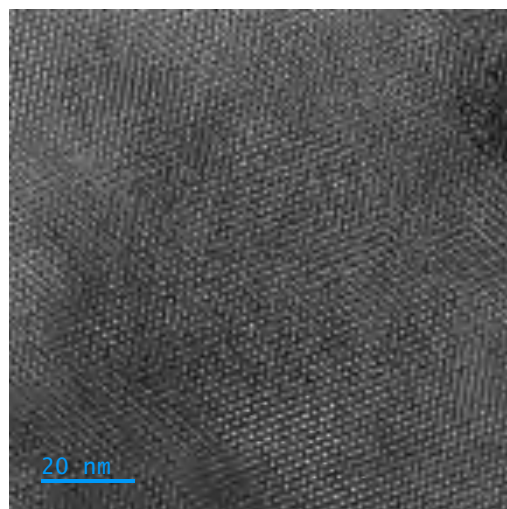
300kV条件下, MOL样品的辐照损伤过程:



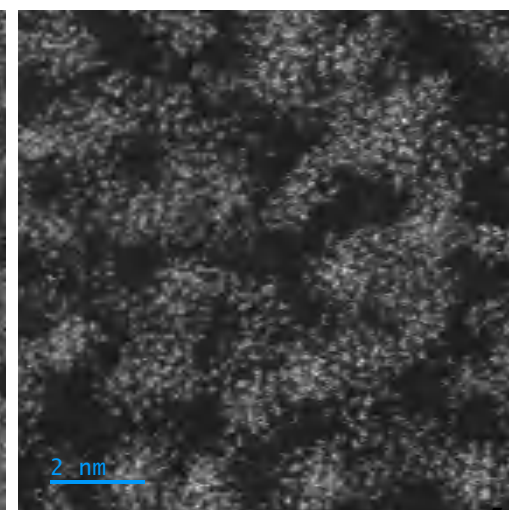
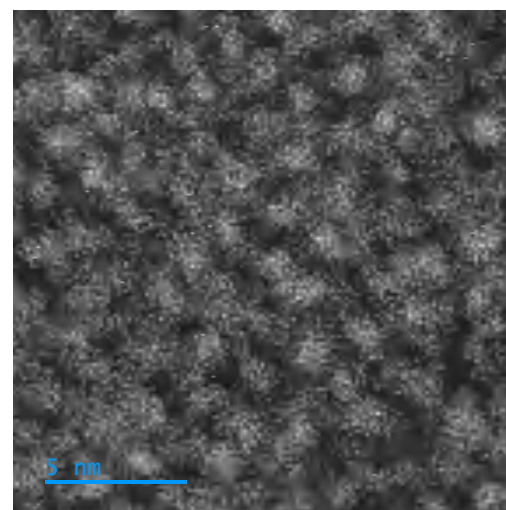
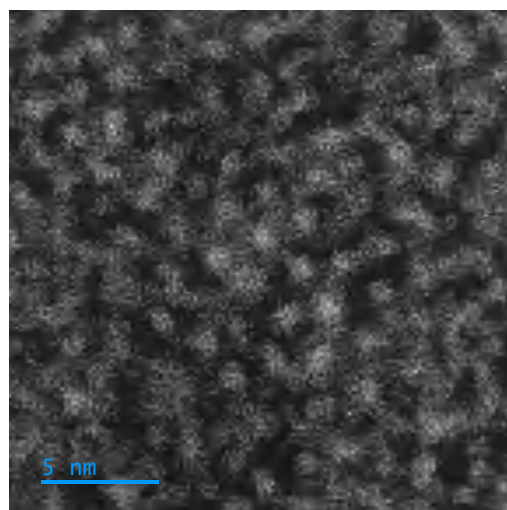
# 球差电镜表征 (梁智尧)

样品: Hf-BTB-MOL-HCl

自强不息 止于至善



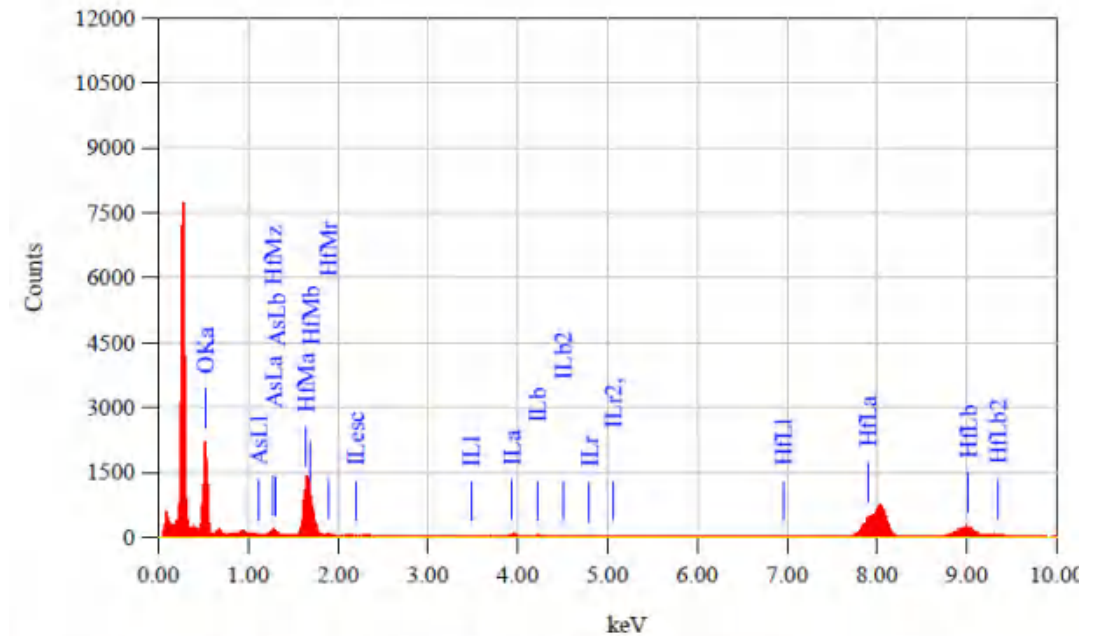
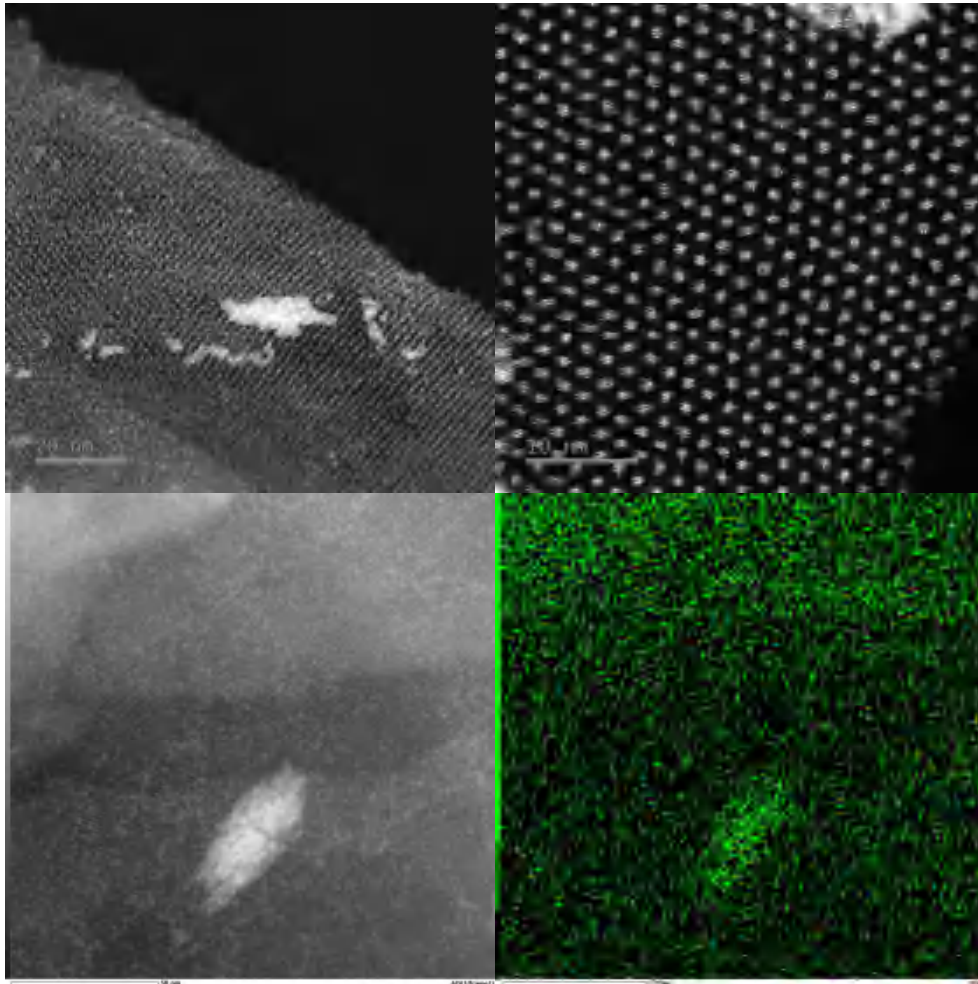
图中六边形纳米颗粒：  
实验中由于电子束损伤较为严重，掺入了部分合金纳米片以调节电镜的球差和像散，避免调解过程中打坏样品





# Hf-BTB-MOL-OH (H<sub>2</sub>O)

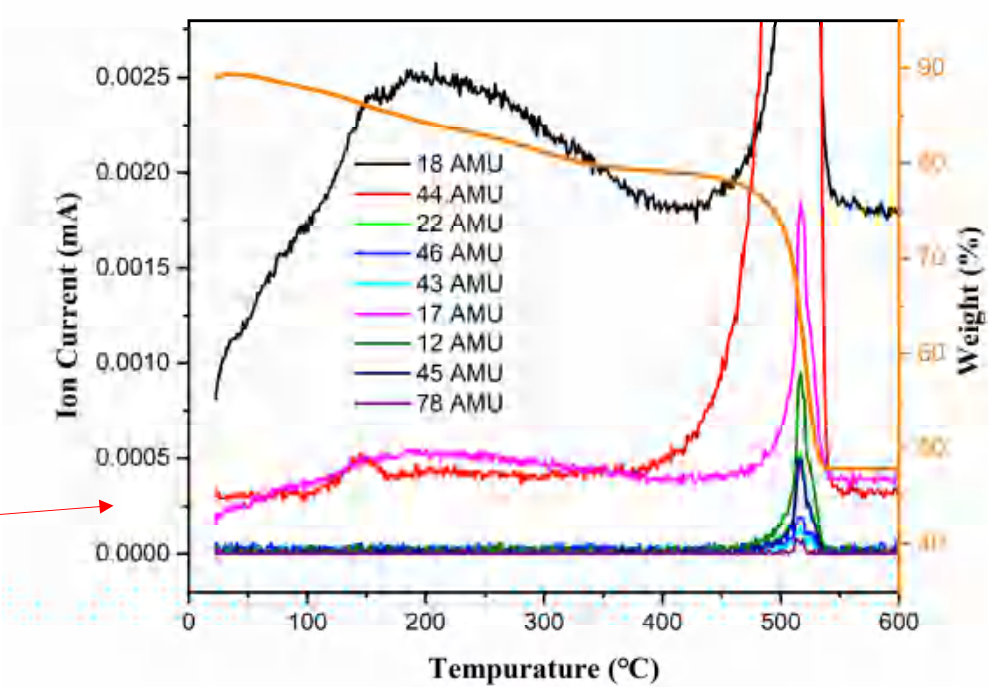
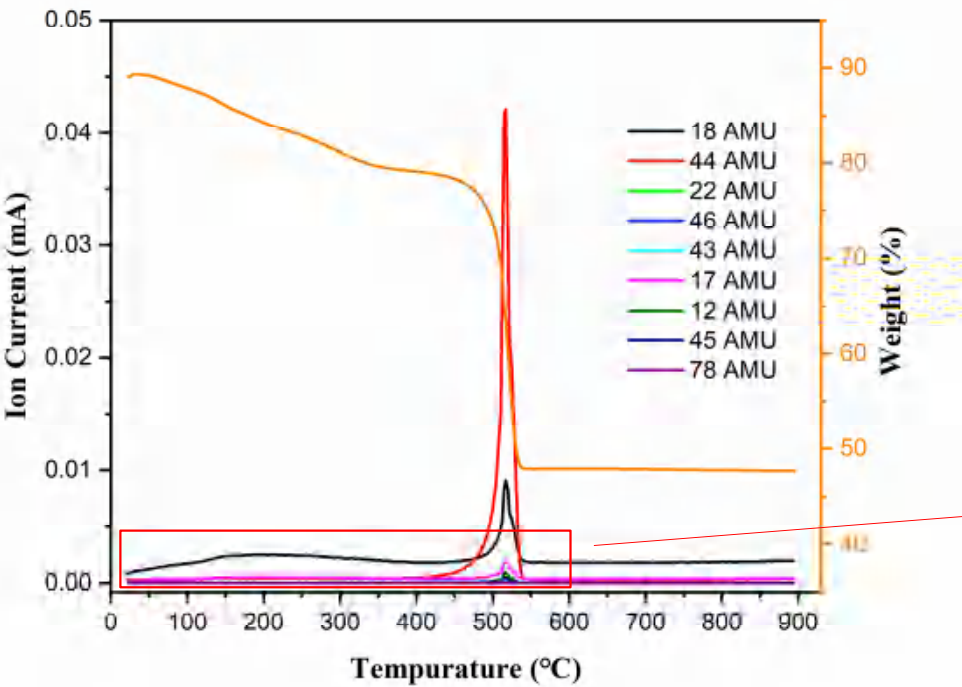
自強不息 止于至善



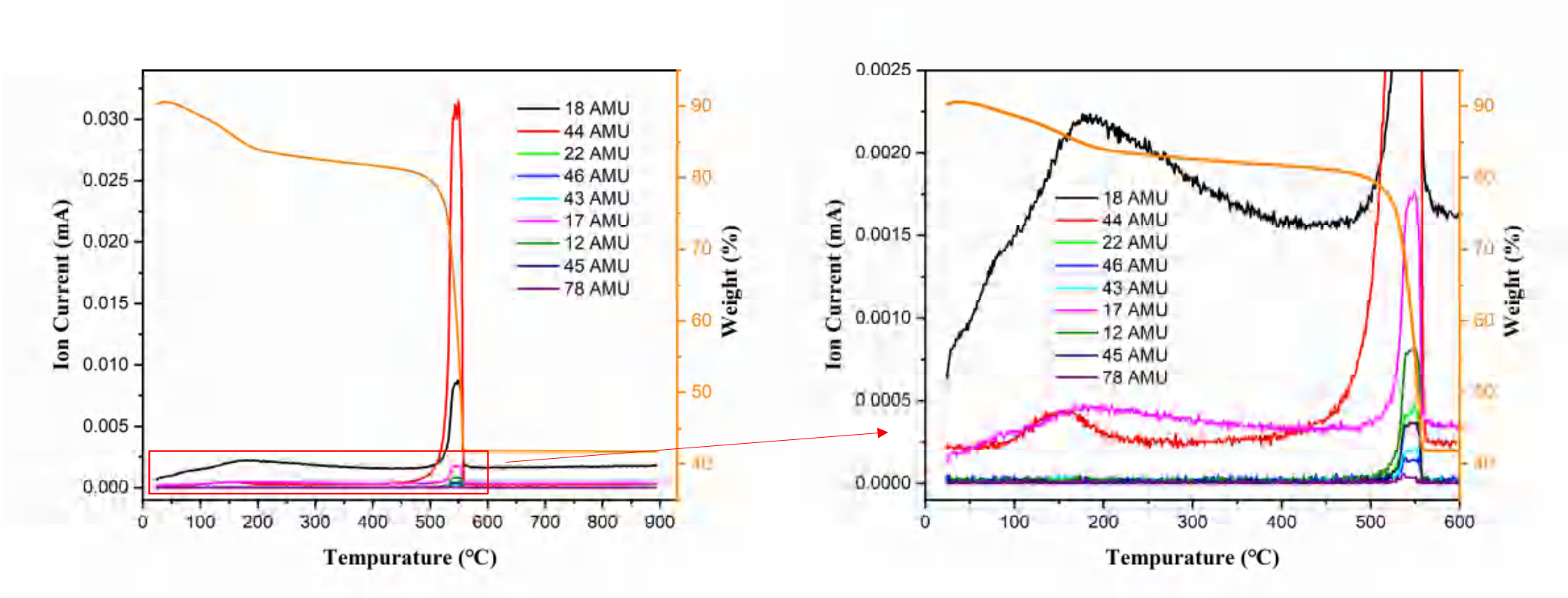
Thin Film Standardless Standardless Quantitative Analysis  
Fitting Coefficient : 0.7660

Element	(keV)	Mass%	Counts	Sigma	Atom%	Compound	Mass%	Cat
O K	(Ref.)	38.39	11994.43	0.57	86.72			
As K	10.530	1.35	253.26	0.20	0.65			
I L	3.937	5.24	722.40	0.34	1.49			
Hf M*	1.644	55.02	9989.92	1.07	11.14			
Total		100.00			100.00			

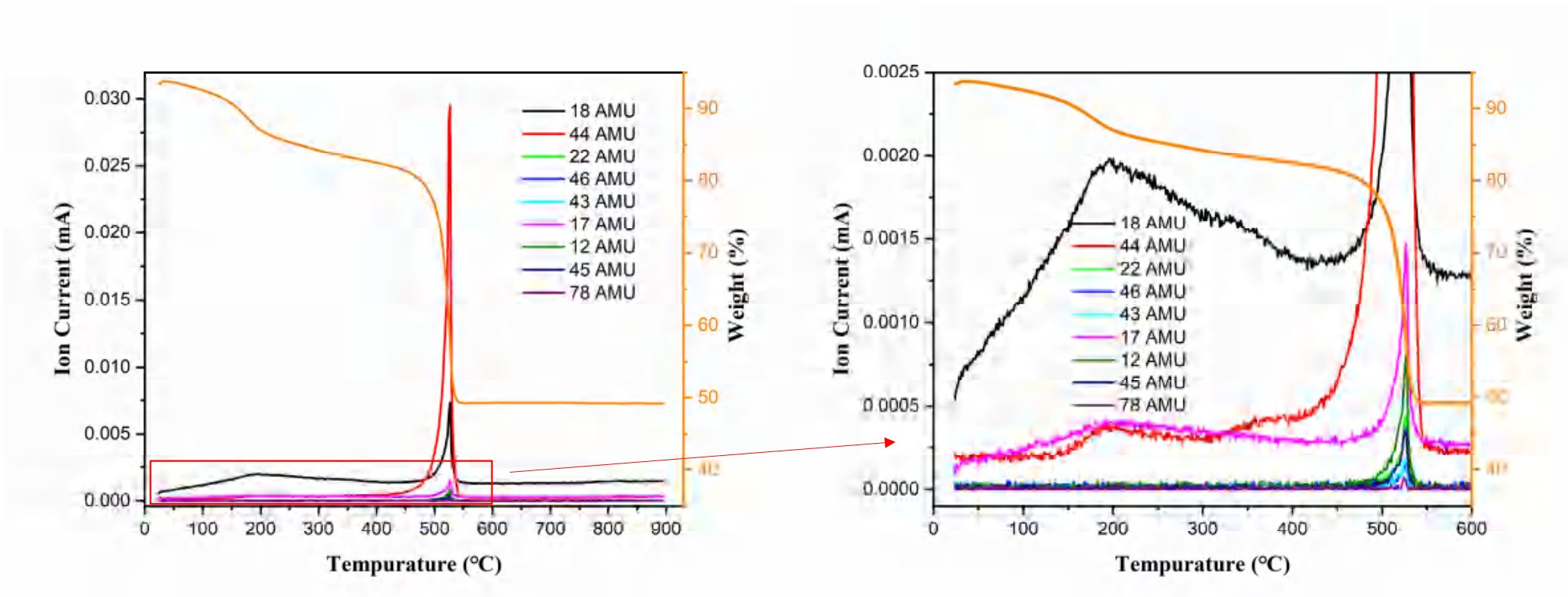
Hf-BTB-MOL



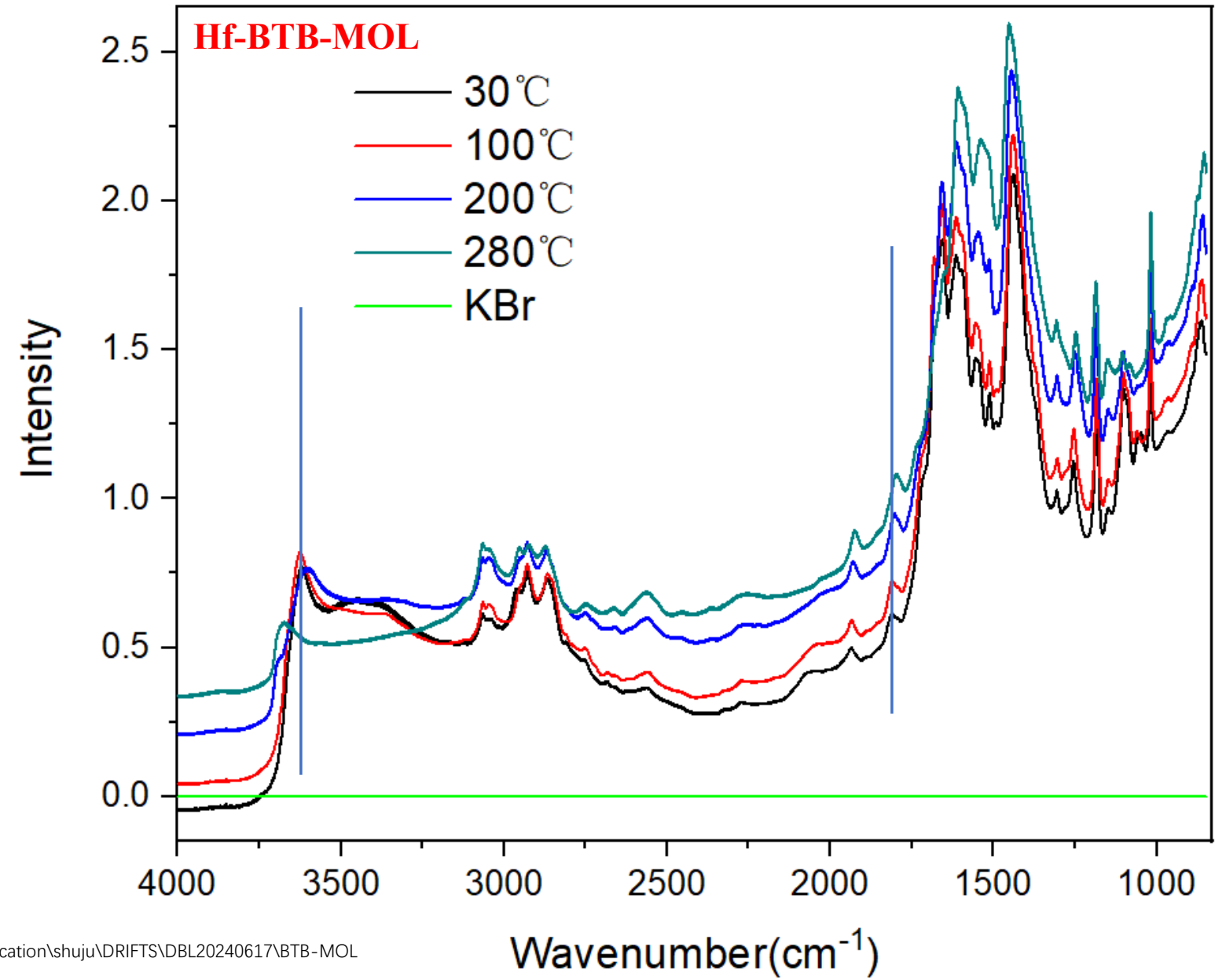
Hf-BTB-MOL-HCl



Hf-BTB-MOL-H<sub>2</sub>O

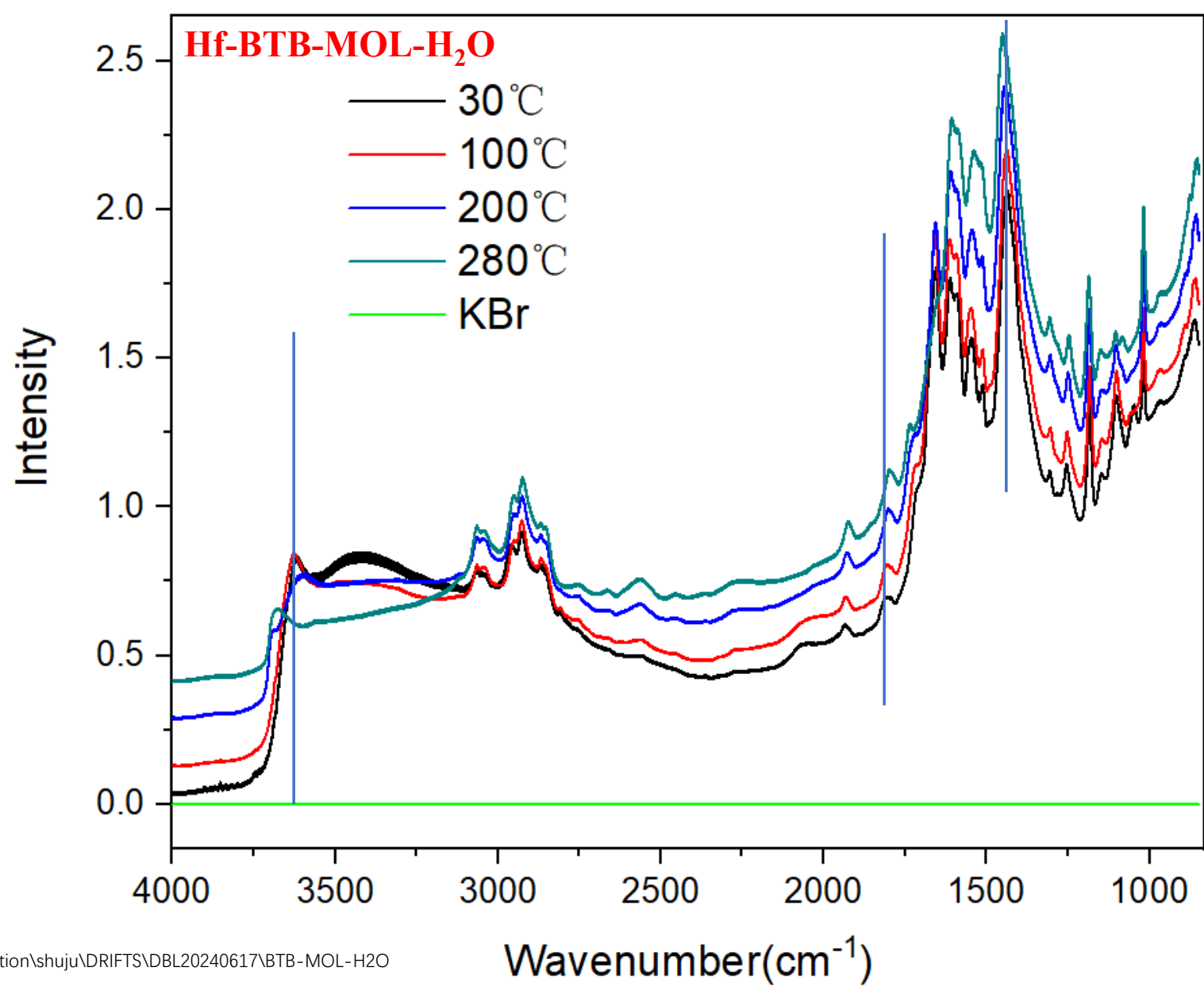


原位红外





原位红外



原位红外

