
精密测量院在分子筛限域传质机制研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13086.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院精密测量科学与技术创新研究院研究员郑安民团队在沸石分子筛限域空间内扩散机制研究领域取得进展，相关研究成果发表在Science Advances上。

化学化工生产是我国的重要产业之一，但其在生产过程中存在一定的弊端（如原料利用率低、生产技术落后、造成环境污染等问题），因此，提高化工过程的效率、建立可持续发展的化工生产是科技工作者追求的目标。化工过程的特征可概括为“三传一反”，其中，质量传递（传质）无论是在蒸馏、吸收、萃取、干燥，还是在催化等领域都具有无可替代的作用。沸石分子筛作为环境友好型催化剂，已广泛应用于工业催化和分离等领域，这和分子筛催化剂独特的传质性能密切相关。工业上通常基于高浓度进行分离和反应，但常规分子筛随着浓度增加，扩散系数急剧降低，因此，高浓度情况下保持快速扩散是当前亟需解决的难题。

郑安民团队长期致力于分子筛限域孔道中吸附和扩散行为的实验和理论研究，在前期工作中建立了沸石分子筛限域孔道结构及碰撞对扩散系数的定量关联（J. Catal. 2019, 377, 51; AIChE 2020, e16269.），阐明了吸附和扩散对甲醇制烯烃（J. Phys. Chem. C 2017, 121, 22872.）以及羰基化反应（J. Catal. 2019, 369, 335.）影响的微观机制。在此基础上，研究团队通过大规模高通量筛选，发现具有连续性交叉孔结构的SCM-15分子筛在高浓度下仍可保持较高的扩散性能。基于分子动力学模拟，研究团队发现，连续交叉孔与传统交叉孔（非连续）的性质存在较大差异，该类孔道结构具有较弱的吸附能和低的扩散能垒：在低浓度情况下，分子主要沿着具有强吸附位点的非连续交叉孔方向扩散，因此，扩散系数较小；随着浓度增加，分子逐渐吸附到具有较低扩散能垒的连续交叉孔方向，因此，在高浓度情况下，仍可保持良好的扩散性能。该研究首次提出了连续交叉孔结构，并揭示了该结构能够促进高浓度快速扩散的微观机理；为工业催化剂的合成、选择与提高分子筛寿命提供了借鉴和指导。

精密测量院特别研究助理/博士后刘志强为论文第一作者，郑安民为论文通讯作者。研究工作得到国家自然科学基金委、中科院、湖北省科技厅的支持。

[论文链接](#)

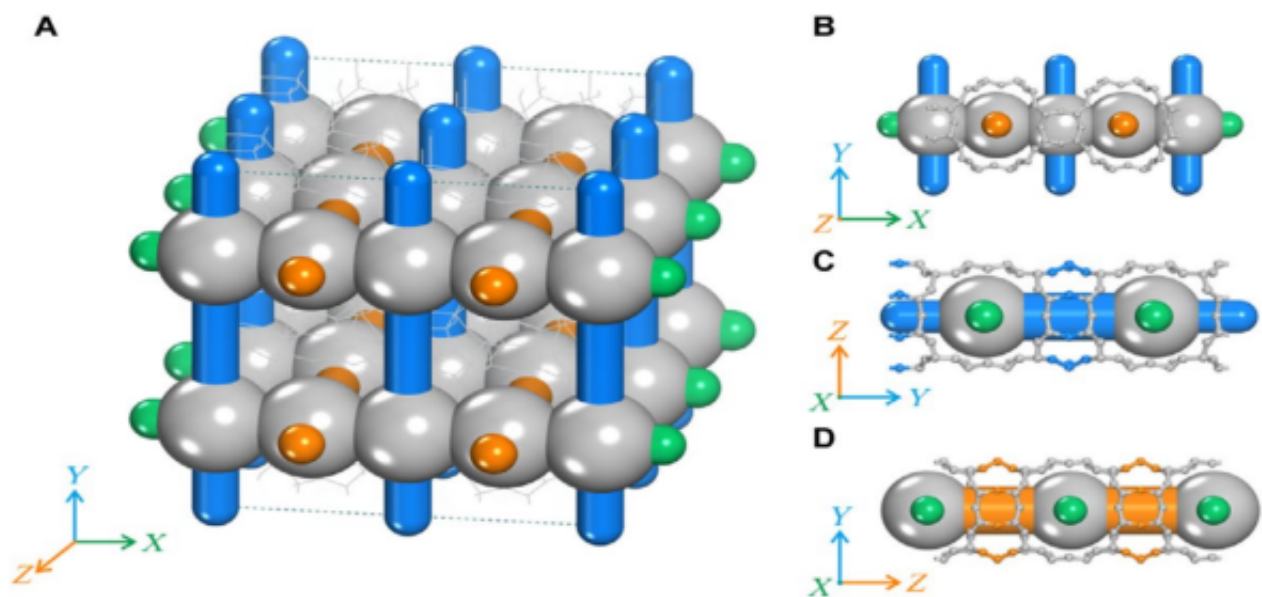


图1.SCM-15分子筛连续交叉孔道结构图

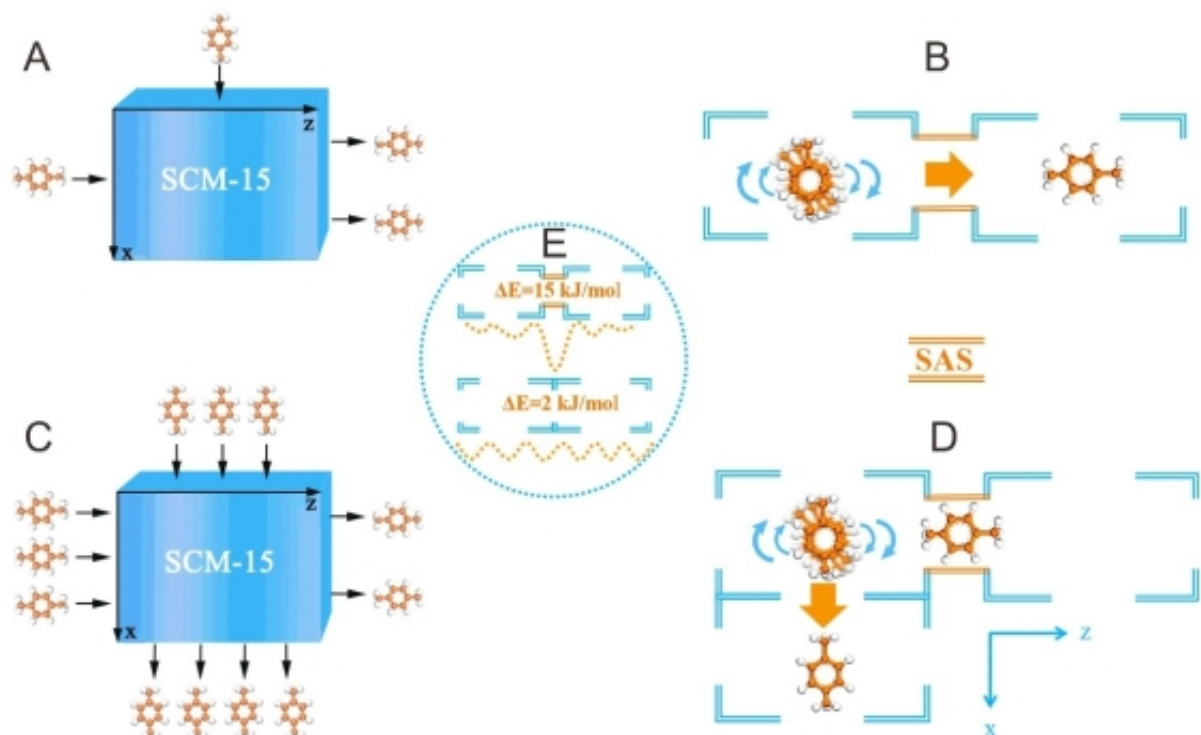


图2.不同浓度二甲苯在连续性交叉孔SCM-15分子筛中的扩散机理图

研究团队单位：精密测量科学与技术创新研究院

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发