

---

# 中科院大化所研究揭示金属—分子筛类酶催化特性

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/19244.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！**

中科院大化所研究揭示金属—分子筛类酶催化特性。近日，中科院大连化学物理研究所刘中民院士和研究员魏迎旭团队，与研究员肖建平团队合作，在金属—分子筛局域结构和微环境在烷烃脱氢中的作用机制研究方面取得新进展。相关研究成果发表在《美国化学会志》。

将金属引入到分子筛中，可以实现多种催化反应，如脱氢、加氢和氧化等。在某些反应中，分子筛不仅能够提供活性中心，还可以通过限域空间和局域微环境作用整个催化过程。这种催化作用与金属酶催化相似，通过金属中心和微环境共同实现了反应物分子的吸附活化，优化反应路径，从而实现整个催化循环。近期，Co基催化剂被发现具有一定的烷烃脱氢能力。然而，报道的催化剂性能迥异，如何构筑高性能的Co基烷烃脱氢催化剂仍不明确。在负载型Co基催化剂上，通常会同时存在单位点、团簇和纳米颗粒等多种Co物种，明确催化剂的活性中心和催化机理存在较大的挑战。将Co物种引入到分子筛骨架中，不仅可以调节活性中心的电子结构，构筑高效的催化剂体系，同时还可以得到结构明确的Co物种，实现活性中心结构、酸性和催化机理的精准解析。

本工作将孤立的Co位点构筑到纯硅MFI分子筛骨架中，通过多种表征技术结合理论模拟建立了活性中心 $\{(SiO)_2Co(HO-Si)_2\}$ 的微观结构。研究发现，Co位点主要位于MFI分子筛的T1(7)和T3(9)位，具有两个Co-O-Si键和两个类桥式羟基 $Co \cdots OH-Si$ 结构。和金属酶催化相似，金属—分子筛Co-MFI通过局域结构和微环境共同作用，实现了丙烷脱氢过程：分子筛微环境可以预活化丙烷分子，Co原子可以极化临近的氧原子（Co-O-Si）接受 $C_3H_7^*$ 和 $H^*$ ，Co原子和柔性的分子筛骨架能够稳定 $C_3H_7^*$ 中间物种；Co活性中心电子态和配位状态的连续动态演变和可逆恢复，满足PDH反应中一系列基元步骤，实现类酶催化作用过程。

该工作有助于理解金属—分子筛活性中心的作用方式、微环境的协同作用过程和分子筛动态催化机制。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.2c02636>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：[shouquan@stimes.cn](mailto:shouquan@stimes.cn)。

作者：刘中民等 来源：《美国化学会志》

---

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

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