揭示MFI型分子筛限域环境下芳烃受阻运动机理

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/21186.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！

揭示MFI型分子筛限域环境下芳烃受阻运动机理。近日，中科院大连化学物理研究所研究员侯广进、研究员陈魁智团队，利用固体核磁共振(ssNMR)技术，研究了客体芳烃分子运动行为，并对分子筛孔道的限域效应提出了新的理解。相关成果发表在ACS Catalysis上。

分子筛独特的微孔孔道结构赋予其限域效应，对吸附分离和择型催化发挥重要作用。通常，分子筛限域效应随吸附分子尺寸和分子筛孔道尺寸临近而愈发显著，但考虑到分子筛骨架结构、酸性位点分布和吸附分子构型之间的复杂关联，在分子尺度上借助实验研究分子筛限域效应较为困难。MFI型分子筛独特的直通孔道、zigzag孔道及孔道交叉共存的环境，对以甲基取代苯为代表的芳烃分子具有独特的限域效应，因此芳烃相关的反应和失活机理受到广泛关注。

本工作中，研究人员借助2H NMR并结合DFT计算发现，体积较大的偏三甲苯在室温下即可被MFI型分子筛吸附并占据孔道交叉处。偏三甲苯的传输扩散在纯硅silicate-1中表现为沿直通孔道的一维扩散，在孔道交叉处表现为孔道结构关联的三维受阻运动行为。动力学过程速率由快到慢的顺序为甲基C3转动、朝向zigzag孔口112o翻转、朝向zigzag孔口和直通孔口间90o翻转、延直通孔道的跨孔扩散运动。研究还发现，在H-
ZSM-5中，上述平动和转动行为受Br?nsted酸位吸附影响，进一步受阻。

该工作为MFI型分子筛对芳烃分子独特的限域效应提供了实验证据，对理解芳烃相关的反应和失活过程提供了新的见解。(来源：中国科学报 孙丹宁)

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/acscatal.2c04646

作者： 侯广进等 来源：《ACS催化》

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转发