

研究提出分子筛催化甲醇转化的动态催化反应机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24257.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！

研究提出分子筛催化甲醇转化的动态催化反应机制。近日，中国科学院大连化学物理研究所刘中民院士、研究员魏迎旭团队发表了分子筛催化甲醇转化制取烃类反应（MTH）动态催化反应机制的综述文章，系统总结了团队在分子筛催化甲醇转化反应机理研究方面的研究成果。团队基于反应过程中活性位点/活性物种动态演变，构建了多循环协同运行的动态催化反应超环网络，提出了分子筛催化甲醇转化的动态催化反应机制，对于深刻理解分子筛化学，尤其是真实催化反应条件下分子筛的催化本质具有重要意义。文章发表于《化学研究评述》上。

分子筛固有的酸性和择形性，赋予了其在MTH催化反应中的决定性角色，并展现出了较好的催化反应活性和选择性。然而，分子筛催化的MTH反应过程所展示出的动态演变、反应模式多样性、催化和扩散的耦合和解耦等复杂特征，使人们在全面理解MTH催化反应机制的研究中面临挑战。

团队借助于先进的原位谱学、同位素标记、计算化学等技术，对分子筛催化的甲醇转化的催化过程展开了深入研究，在捕捉和识别分子筛笼/孔中活性中间体、催化剂表面实时动态演变的原位观测与模拟等方面取得系列研究成果。

基于上述工作，该综述揭示了从传统认知的Brønsted酸位点到有机—无机杂化超分子复合活性位点中，分子筛催化的MTH反应过程活性位点的动态更替。反应中间体从表面甲氧基物种到活性离子对复合物，再到惰性复合物的动态演变，引导了C-C键形成由初始C-C直接偶连机制，到高效烃池自催化机制的转变。而催化循环构建了催化反应超环网络，以此引导了反应过程由自催化启动到自催化维持，再到自催化终止的反应演变规律。

通过上述研究，该综述深入阐释了分子筛催化MTH反应中的复杂机制，以及结构—活性关系，并由此提出了MTH化学的动态催化反应机制。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acs.accounts.3c00187>

作者：刘中民等 来源：《化学研究评述》

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