

# 分子筛活性中心具体位置研究取得重要进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31508.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！**

中国科学院精密测量科学与技术创新研究院邓风团队、香港理工大学曾适之团队、英国牛津大学研究团队，发表了关于H-ZSM-5沸石分子筛催化剂中活性中心落位的重要研究进展。该团队发展了基于中子粉末衍射-同步辐射X射线衍射-固体核磁共振（NMR）的联用技术，结合探针分子吸附，精确确定了H-ZSM-5沸石分子筛催化剂中骨架Al原子的具体落位，揭示了H-ZSM-5沸石分子筛中活性位的具体位置及其与探针分子、反应物间的主客体相互作用。

沸石分子筛作为多孔晶体材料，可通过Al原子取代惰性Si原子占据T位获得可调变的活性中心，在石油化工、生物质转化和精细化工等催化过程中得到应用。Al原子的落位与分布决定沸石分子筛的活性和催化位点，进而影响其物理化学特性和催化性能。精确测定活性中心在分子筛中的具体位置是分子筛研究领域的重要挑战。

沸石分子筛中Al原子的落位与分布受复杂的合成条件影响，难以单独通过X射线吸收谱、固体核磁共振、原子探针断层扫描等技术准确确定，限制了沸石分子筛构效关系的深入研究。

曾适之团队通过同步辐射X射线衍射方法，选择Al元素吸收边以区分Si原子、Al原子，结合结构精修，明确了H-ZSM-5沸石分子筛中Al原子主要分布于T4、T6、T8位点；进而，利用小尺寸碱性分子氨作为探针捕获活性中心的酸性质子，并结合粉末中子衍射和结构精修发现，与T8孤立Al位点不同，氨分子同时吸附于T4和T6两个Al位点。邓风团队对H-

ZSM-5沸石分子筛中氨分子

的吸附位点进行固体NMR研究，利用一维 $^{15}\text{N}$ 和二维 $^1\text{H}$ - $^{15}\text{N}$ 异核相关固体NMR技术，明确了H-ZSM-5沸石分子筛中来自硅羟基的弱吸附（-376.1

ppm）和来自酸性位点的强吸附（-372.7、-365.0、-358.8

ppm）两类氨分子吸附的 $^{15}\text{N}$ 信号；进一步通过 $^{15}\text{N}\{^{27}\text{Al}\}$ 双共振固体NMR技术测量了强吸附位点上 $^{15}\text{N}$ 、 $^{27}\text{Al}$

Al自旋系统的原子间距离。研究结合中子衍射实验结果发现，位于-358.8

ppm的氨分子上的 $^{15}\text{N}$ 原子可同时与两个 $^{27}\text{Al}$ 原子空间临近，其余两个 $^{15}\text{N}$

信号来自于与孤立 $^{27}\text{Al}$ 原子空间临近的 $^{15}\text{N}$ 原子。固体NMR实验测量的核间距离与粉末中子衍射的结果一致，证明H-ZSM-5沸石分子筛具有T8孤立Al位点和T4、T6双Al位点的活性中心。基于中子粉末衍射-同步辐射X射线衍射-固体核磁共振的联合技术同样适用于其他不同类型分子筛活性中心的表征。

N原子。固体NMR实验测量的核间距离与粉末中子衍射的结果一致，证明H-ZSM-5沸石分子筛具有T8孤立Al位点和T4、T6双Al位点的活性中心。基于中子粉末衍射-同步辐射X射线衍射-固体核磁共振的联合技术同样适用于其他不同类型分子筛活性中心的表征。

N原子。固体NMR实验测量的核间距离与粉末中子衍射的结果一致，证明H-ZSM-5沸石分子筛具有T8孤立Al位点和T4、T6双Al位点的活性中心。基于中子粉末衍射-同步辐射X射线衍射-固体核磁共振的联合技术同样适用于其他不同类型分子筛活性中心的表征。

1月23

日，相关研究成果以《H-ZSM-5分子筛中铝原子（对）的落位及其吸附相互作用》（Atomic locations and adsorbate interactions of Al single and pair sites in H-ZSM-5

---

zeolite) 为题, 发表在《科学》(Science) 上。

[论文链接](#)

分子筛活性中心具体位置研究取得重要进展

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/>

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