
研究揭示柔性分子筛CoS-1高效催化丙烷脱氢的分子机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/32899.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！

研究揭示柔性分子筛CoS-1高效催化丙烷脱氢的分子机制。

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员肖建平团队与浙江大学研究员王亮、教授肖丰收团队，以及宁夏大学教授刘晰团队合作，在丙烷脱氢制丙烯的研究中取得进展。研究开发出一种钴硅酸盐沸石催化剂（CoS-1），该催化剂具有稳定孤立四面体钴位点结构的独特分子筛骨架，展现出优异的催化性能，可实现丙烯产率达 $9.7 \text{ kg}_{\text{C}_3} = \text{kg}_{\text{cat}}^{-1} \text{ h}^{-1}$ 。此外，在工业条件下，其丙烷脱氢性能优于传统工业PtSn/Al₂O₃催化剂。

低碳烯烃是现代化学工业的重要原料。通过低碳烷烃脱氢，有望实现页岩气直接生产低碳烯烃，具有重要的研究价值。在前期的工作中，研究团队通过理论计算系统研究了硅质分子筛骨架稳定的不同孤立金属位点的烷烃脱氢特性，取得了系列研究成果。

该研究通过稳定性研究和催化动态模拟，揭示了CoS-1催化剂的活性中心结构及其高性能的化学根源。研究发现，分子筛骨架稳定的孤立Co位点，在反应过程中呈现(Si-O)-Co⁺-(OH-Si)₄配位结构，其柔性骨架在高温条件下的熵效应可显著降低Co⁺位点的丙烷脱氢能垒，使CoS-1催化剂具有比Pt₃Sn合金更低的能垒。研究团队通过微观动力学模拟计算了这两种催化剂上的烷烃脱氢速率，发现虽然CoS-1具有更低的能垒，但由于丙烷扩散到分子筛孔道内的过程会造成较大的熵损失，使得Co⁺位点附近的丙烷浓度远低于Pt₃Sn表面，从而导致在反应初期，CoS-1的总反应速率略低于Pt₃Sn。此外，研究还发现分子筛非键合吸附的特性有利于产物丙烯的快速脱附，降低了催化剂积碳速

率，从而使CoS-1表现出更优异的长期稳定性。

相关研究以Cobaltosilicate zeolite beyond platinum catalysts for propane dehydrogenation为题，发表在《自然-催化》（Nature Catalysis）上。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金等的支持。

[论文链接](#)

研究团队单位：大连化学物理研究所

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