

沸石分子筛催化反应机制研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/37418.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！

沸石分子筛催化反应机制研究取得进展

。碳正离子是分子筛催化碳氢化合物转化的关键反应中间体，在分子筛催化过程中，原料或催化剂再生过程中常含有微量氧气，其对催化反应的作用机制尚不明晰。

近日，中国科学院精密测量科学与技术创新研究院团队，揭示了微量分子氧可明显改变分子筛孔道限域环境中关键反应中间体——碳正离子的反应路径，进而调控甲醇制碳氢化合物等重要催化反应的选择性与催化剂寿命。

研究团队结合原位固体核磁共振谱、原位紫外—可见光谱、在线质谱等多种技术手段，探讨了ZSM-5分子筛上碳正离子中间体在含氧气氛中的反应行为。研究发现，即使是低至ppm级的微量氧气，也可明显促进环戊烯基碳正离子的转化。氧气可使环戊烯基碳正离子发生羟基化，继而转化为环戊烯酮类物种，进一步发

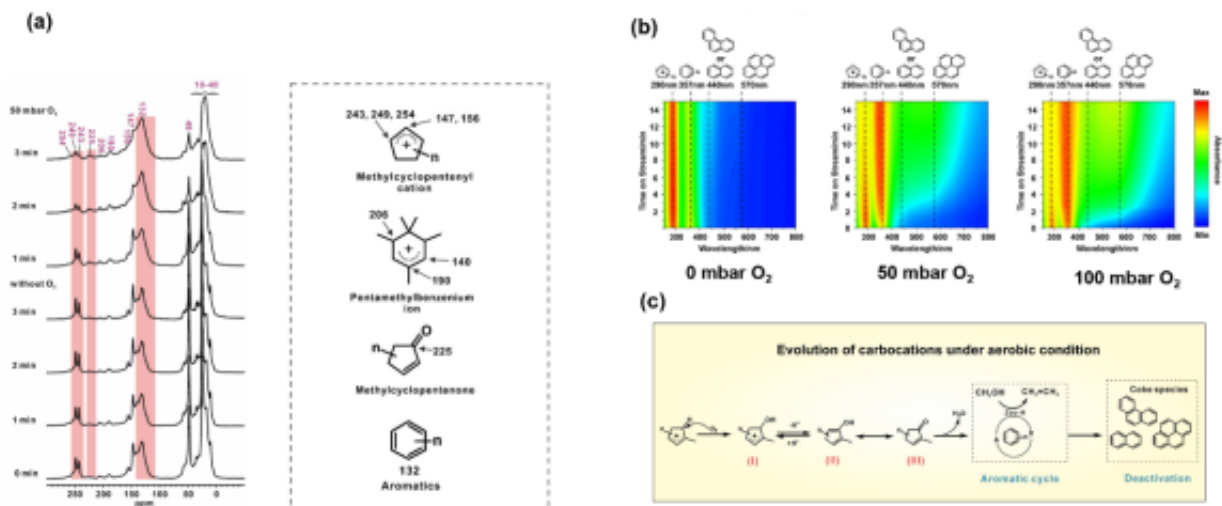
生芳构化反应生成芳烃。通过同位素 $^{17}\text{O}_2$ 标记实验，研究人员利用 ^{17}O NMR证实了分子氧中的氧原子进入环戊烯酮的羰基，为氧化机制提供了直接证据。

该研究揭示了氧气在分子筛催化反应中的双重作用：一方面，它通过氧化碳正离子中间体，促进了芳烃产物的生成，改变了烯烃/芳烃选择性分布；另一方面，氧化反应也加速了多环芳烃等积碳前驱体的生成，从而加速了催化剂的失活。这一氧化机理同样适用于乙烯转化等反应，表明氧气对碳正离子反应性的调控作用具有普适性。

该研究为学界理解实际催化体系中微量氧化剂对反应路径的调控机制提供了新见解，也为催化剂性能优化提供了新策略。

相关研究成果发表在《美国化学学会杂志》（*Journal of the American Chemical Society*）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会等的支持。

[论文链接](#)



(a)分子筛上碳正离子在含氧/无氧气氛下演化的原位¹³C MAS NMR图谱；(b)不同氧分压条件下碳正离子演化的原位UV-Vis图谱；(c)分子氧化碳正离子反应机制

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/>

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