研究揭示分子筛微孔道对荧光大分子作用机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/41582.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！

分子筛是一类具有规则纳米孔道的晶体材料，在催化、分离等领域广泛应用，能够依据分子尺寸、形状和性质对客体分子进行选择性吸附、分离与转化。传统观点认为，分子筛孔口尺寸决定了分子能否进入孔道。然而，越来越多实验现象表明，部分尺寸大于孔口的分子仍可能进入分子筛孔道，这对经典分子筛分理论提出了挑战。

以往学界对这一现象的解释多集中在分子筛骨架的柔性效应上，即孔道可能在客体分子作用下发生轻微形变，从而放宽进入条件。但客体分子自身能否主动改变构象以适应更小孔道，长期以来缺乏直接实验证据。该研究的关键瓶颈在于，分子在纳米孔道内的形变微弱且迅速，常规表征手段难以同时捕捉其空间位置、运动行为与结构变化。

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究团队在分子筛微孔道与荧光大分子作用机制研究方面取得进展。

团队聚焦
客体分子自身在限域条
件下的结构响应机制，选取荧光探针DB-
BODIPY作为模型分子，其最小投影直径约为11.08 Å
，结合单分子荧光追踪、时间分辨荧光、荧光寿命成像、iDPC-STEM、PXRD
Rietveld
精修及理论计算等方法，从多个
角度证实了该分子进入Silicalite-1（S-1）分子筛（孔口尺寸约5.4 Å
）的现象，并揭示了其背
后的结构适应机制。研究发现，DB-BODIPY
的进入并非仅依赖孔道形变，而是在空间限域作用下发生构象适应，两侧结构单元向分子中心收拢，使其最小投影尺寸降至约8.37 Å，缩小约18%至27%
，从而得以进入被轻微拉伸的亚纳米孔道。

团队进一步利用时间
分辨荧光技术研究该构象适应过程，发现D
B-BODIPY进入S-1
分子筛后，荧光寿命较溶液态发生明显分化，形成长、短两类寿命组分。长寿命组分主要分布于晶体内部，短寿命组分则更多位于外表面。这表明孔道内部分子受到的限域作用更强，构象适应更为明显，荧光寿命可作为表征分子受限程度与孔道微环境的敏感指标。该方法在多种拓扑结构的分子筛中同样适用，孔道限域程度越强，长寿命组分的寿命延长越明显。

该研究从实验和理论两方面证实，除分子筛骨架自身柔性外，客体分子也可通过自身构象适应突破传统孔径限制，进入更小的分子筛孔道。这一成果深化了学界对分子筛主客体相互作用与限域传递机制的认知，也为探测微孔材料孔道可达性提供了新思路。

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

论文链接

研究揭示分子筛微孔道对荧光大分子作用机制

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