

沸石分子筛催化剂活性位研究取得进展

近日，中国科学院精密测量科学与技术创新研究院在沸石分子筛活性位研究方面取得进展。该研究发现，水能诱导超稳Y（USY）分子筛中“NMR-Invisible”铝物种形成协同活性位，提高催化剂对二乙醚制乙烯的反应活性。

沸石分子筛凭借规则有序的微孔结构和可调控的酸性，在石油化工与精细化工领域广泛应用。在分子筛的应用过程中，水可作为溶剂、反应物、产物，也能充当反应促进剂，同时能通过改变分子筛的酸性来影响催化性能。沸石分子筛普遍存在的“NMR-invisible”铝物种如三配位骨架和非骨架铝是主要的Lewis酸物种，但其与水的作用机制尚未明确，导致其对催化反应的贡献常被忽略。

该团队利用多核固体NMR结合理论计算，探究了脱水USY分子筛中“NMR-invisible”铝物种与水作用以及转变过程。研究发现，水分子在“NMR-invisible”铝位点上易发生解离吸附，生成大量Brønsted酸位和Brønsted/Lewis协同酸位，提升USY分子筛的催化活性。团队利用一维²⁷Al MAS NMR，分析不同含水量下脱水USY分子筛中铝物种转变过程，发现水会在“NMR-invisible”铝上发生解离吸附，转变为“NMR-visible”铝物种（四配位、五配位和六配位铝），产生大量Brønsted酸位。进一步，团队利用二维1H-1H DQ-SQ NMR实验研究了水解离生成的氢物种的空间分布，揭示了新生成的Brønsted酸质子和Al-OH空间邻近而导致Brønsted/Lewis协同酸位。

基于以上实验结果，该团队揭示了水与“NMR-invisible”铝物种的作用机制，阐明了由水驱动修饰分子筛活性位点的调控机制，为水存在时分子筛催化行为提供了新见解。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（JACS）上。研究工作得到科学技术部、国家自然科学基金委员会、中国科学院的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/228552.html>