

搜索

□

[\(http://www.apm.cas.cn/\)](http://www.apm.cas.cn/)当前位置: [首页\(../..\)](#) >> [科研动态\(../\)](#)

■ 科研动态

精密测量院应邀撰写分子筛限域孔道中碳正离子化学的综述性论文

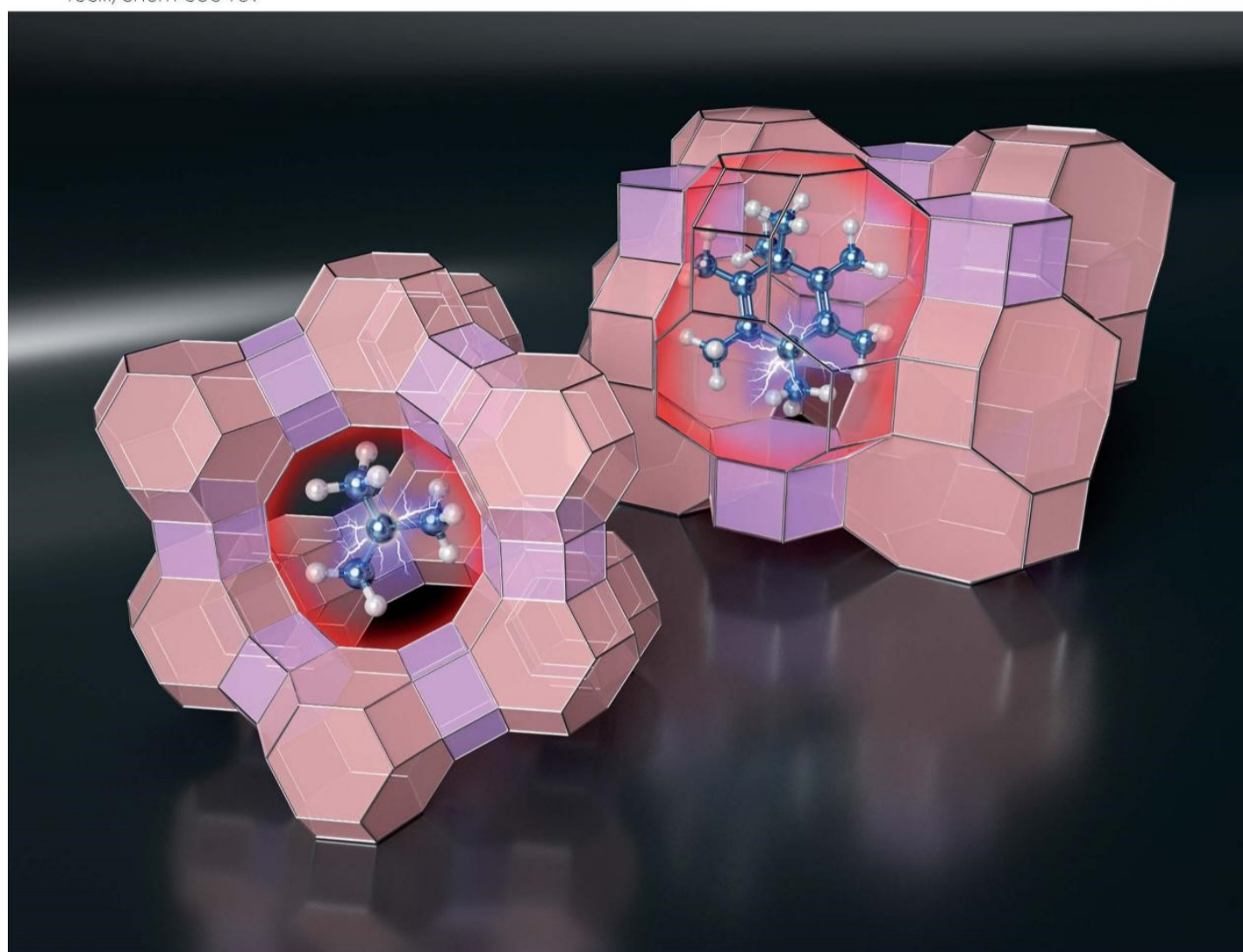
来源: 时间: 2022-06-09

精密测量院郑安民研究团队近期应英国皇家化学会旗下Chemical Society Reviews 期刊的邀请, 撰写了题为“Carbocation chemistry confined in zeolites: spectroscopic and theoretical characterizations”的综述论文, 并被遴选为封面文章。论文从课题组围绕分子筛限域孔道中碳正离子催化的相关工作出发, 系统地介绍谱学实验和理论计算在分子筛限域孔道中碳正离子化学的研究前沿与进展, 阐述了分子筛限域孔道特性对碳正离子稳定性和反应性能的影响机制。

微信
公众号

Chem Soc Rev

Chemical Society Reviews
rsc.li/chem-soc-rev



ISSN 0306-0012



ROYAL SOCIETY
OF CHEMISTRY

REVIEW ARTICLE
Anmin Zheng *et al.*
Carbocation chemistry confined in zeolites: spectroscopic
and theoretical characterizations

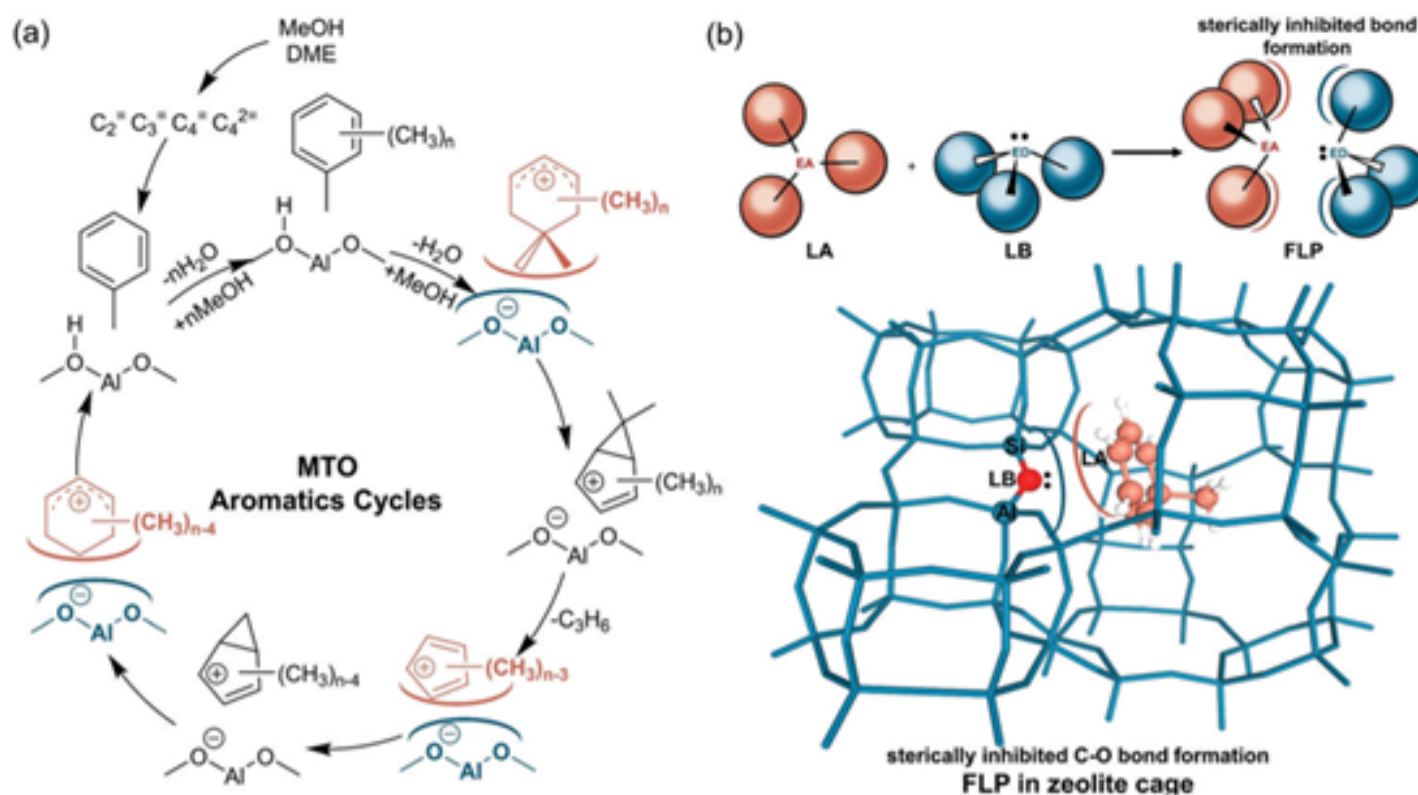


微信
公众号

论文封面

烷烃、烯烃和醇等碳氢化合物的酸催化转化是重要的工业反应过程，碳正离子则是这些反应中最常见也最重要的中间体。酸性分子筛催化剂的催化效率、选择性和失活都与其中涉及的碳正离子稳定性、演化过程和寿命密切相关。因而，对于分子筛限域环境中碳正离子的深刻认识不仅有利于解释催化反应机理，还对分子筛催化剂酸性和孔道结构的设计和调控起到至关重要的作用。

论文根据碳正离子的几何结构、电子结构及其稳定性出发确定了分子筛中碳正离子的类型，系统介绍了用于碳正离子表征的各种谱学实验（固体核磁共振、紫外可见光谱、红外/拉曼光谱、荧光光谱等）和理论计算方法，指出了这些方法在分子筛孔道中碳正离子结构表征和反应机理研究上的优势和局限性。论文进一步以甲醇制备烯烃和烯烃裂解反应为例，探讨了影响分子筛孔道中碳正离子稳定性的两个因素——酸性和限域效应，并从受阻的路易斯酸碱对角度讨论了分子筛中碳正离子的稳定性与反应活性之间的关系。



图：(a) 分子筛限域孔道中芳香性碳正离子参与的甲醇转化机理；(b) 分子筛限域孔道中芳香性碳正离子与骨架形成的FLP结构

基于对分子筛限域孔道中碳正离子化学的认识，论文总结了碳正离子在不同类型分子筛催化反应中所起到的关键作用，阐明了分子筛限域孔道与碳正离子结构匹配性对碳正离子稳定性所起到的重要作用，并指出原位谱学表征与从头算分子动力学结合方法将是确定分子筛限域孔道中碳正离子超快演化动力学行为研究的强有力研究手段。

文章的第一作者是精密测量院特别研究助理/博士后陈伟。

该工作得到了国家自然科学基金委与科技部的支持。

论文链接：<https://doi.org/10.1039/D1CS00966D> (<https://doi.org/10.1039/D1CS00966D>)



下一篇：[精密测量院等在芳烃进出分子筛孔道展现亚单胞拓扑柔性研究中取得新进展](https://doi.org/10.1039/D1CS00966D)
([./202205/t20220526_6454354.html](https://doi.org/10.1039/D1CS00966D))



中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

地址：武汉市武昌小洪山西30号 电话：027-87199543 邮政编码：430071

ICP备案号：[鄂ICP备20009030号-1](https://beian.miit.gov.cn) (<https://beian.miit.gov.cn>) 鄂公网安备 42011102003884号