



(<http://www.apm.cas.cn/>)

当前位置: [首页](#) (>>) [科研动态](#) (>>)

## 科研动态

# 精密测量院在分子筛限域传质机制研究领域取得新进展

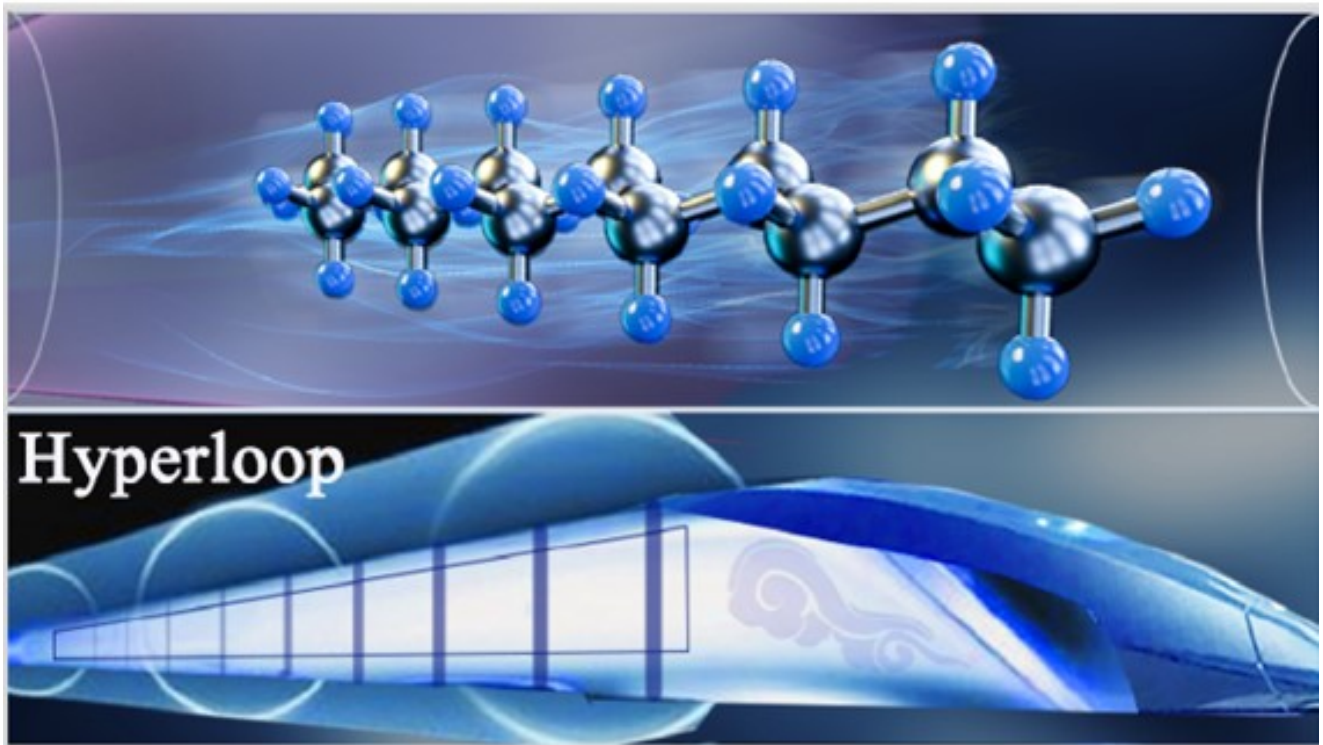
来源: 时间: 2023-04-06

近日, 精密测量院郑安民研究团队在沸石分子筛限域扩散领域取得新进展, 利用分子筛限域环境实现长链烷烃分子自由度的精准调控, 通过分子“悬浮”效应实现其超快扩散。相关研究成果发表在《自然·通讯》(Nature Communications) 上。

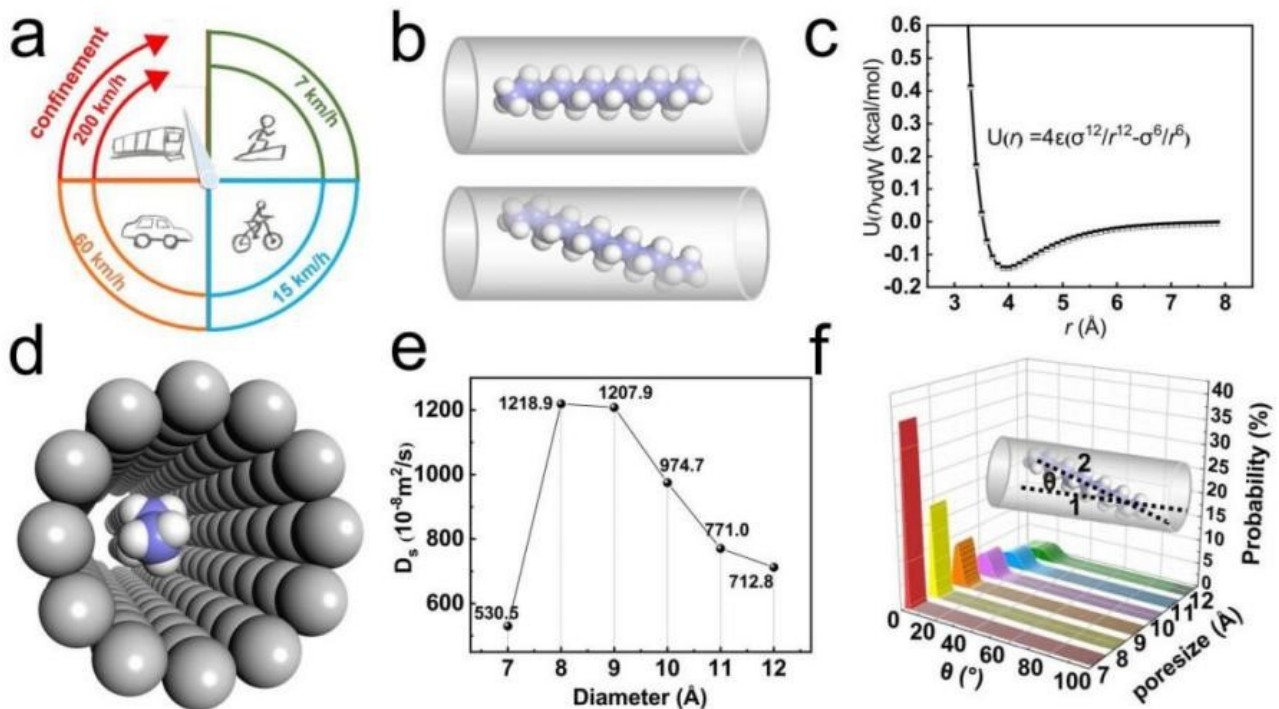
亚纳米级别的多孔材料是典型的限域反应器, 其中吸附质的物理化学性质与常规体相下有着显著差异。前期研究表明, 分子筛限域孔道中的扩散系数与常规体相下呈现出跨越数量级的区别, 常规情况下限域孔道会抑制分子的扩散, 进而影响催化剂的反应和分离效率。如何在这种限域空间中实现快速的扩散是催化和分离工艺中亟待解决的难题, 也是近年来科学家们一直致力于实现的目标。

团队基于多尺度理论模拟, 发现在一定孔径范围内, 分子筛限域孔道中存在孔径越大长链烷烃扩散越慢的反常扩散现象。受到超级高铁运行原理的启发, 建立了一系列亚纳米直孔道模型, 确定了长链烷烃实现快速扩散的条件—客体分子“悬浮”在孔道正中心运行并保持线性构型(图1)。根据该模型筛选出一系列真实存在的孔径适中的分子筛(TON、MTW、AFI和VFI), 验证了该理论模型的正确性。进一步基于主客体相互作用、弯曲角度、扩散轨迹和扩散自由能分析(图2), 揭示了调控长链分子自由度达到分子“悬浮”的条件从而实现超快扩散的微观机理。进一步与中科院大连化物所叶茂研究团队合作, 基于吸附速率法扩散实验验证了分子筛中长链烷烃的超快扩散行为。在TON、MTW和AFI分子筛中短链(C4)和长链烷烃(C12)的扩散趋势与孔径呈现出完全相反的状态: 短链烷烃的扩散系数随着孔径的增大而增

加，而长链烷烃的扩散系数随着孔径的增大而减小。利用红外实验验证了不同孔径中长链分子的形变差异（小孔径中分子形变较小，大孔径与之相反），这些结果与分子动力学模拟的结论一致，从而揭示了线性长链烷烃在限域孔道中的超快扩散机制。



长链烷烃的“超级高铁式”扩散机理



不同类型孔道中长链烷烃吸附结构特性和扩散性能

本工作根据超级高铁的运行原理结合限域分子的扩散“悬浮”效应，设计出长链烷烃的超快扩散模型，并将其推广到分子筛筛选体系中，结合理论和实验证实了该模型的可行性和准确性。这为限域孔道中长链分子的扩散调控提供了新的视角，为分子筛的设计和筛选提供了理论指导。文章第一作者是精密测量院博士生袁家敏和大连化物所博士高铭滨，通讯作者是精密测量院特别研究助理刘志强，大连化物所研究员叶茂、和精密量院研究员郑安民。

该研究工作得到了科技部和国家自然科学基金的资助。

文章链接：<https://doi.org/10.1038/s41467-023-37455-3> (<https://doi.org/10.1038/s41467-023-37455-3>)

下一篇：[精密测量院利用高灵敏F-19探针实现人源细胞内的蛋白质结构及相互作用观测](https://doi.org/10.1038/s41467-023-37455-3)  
([/t20230403\\_6726346.html](https://doi.org/10.1038/s41467-023-37455-3)).



中国科学院

CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

(<http://www.cas.cn>)

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