

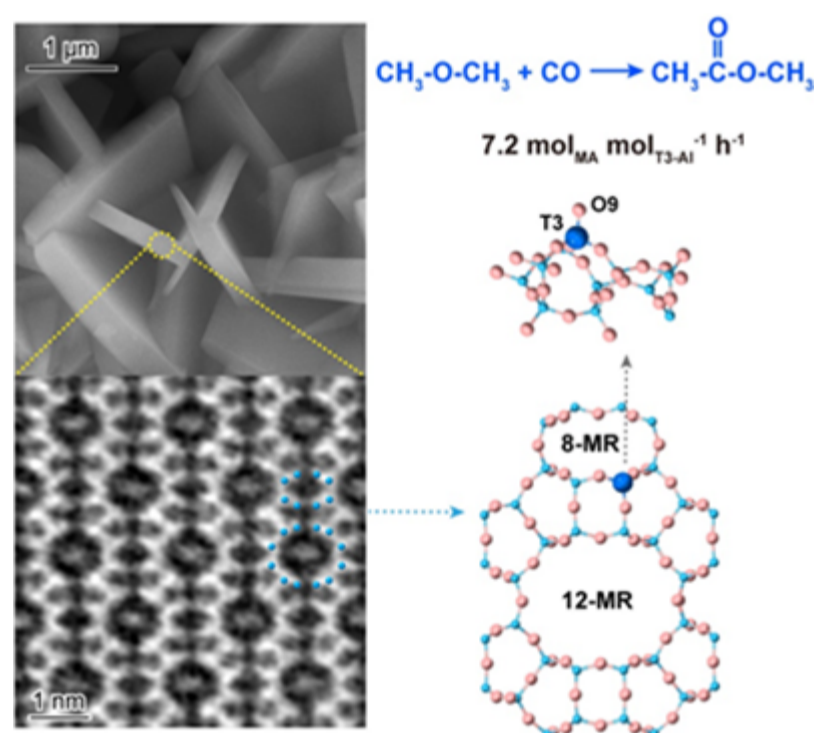
请输入关键字

[首页](#) (</>) > [新闻动态](#) (</>) > [科研进展](#) (</>)

## 我所揭示丝光沸石分子筛孔道酸性位催化二甲醚羰基化分子机制

发布时间: 2022-09-30 | 供稿部门: 501组 | [【放大】](#) | [【缩小】](#) | [【打印】](#) | [【关闭】](#)

近日, 我所催化基础国家重点实验室催化反应化学研究组 (501组) 展恩胜副研究员、申文杰研究员等与中科院精密测量科学与技术研究院徐君研究员、邓风研究员等合作, 在丝光沸石 (MOR) 催化二甲醚羰基化反应的活性位点鉴别和调控方面取得新进展。



MOR是二甲醚羰基化反应的重要催化剂, 其活性与8-MR孔道的总酸量相关。尽管理论计算表明, T3-O9是唯一活性位点, 但实验上鉴别和定量描述不同T位点酸性特征和催化机制仍面临挑战。

本工作中, 科研人员首先通过分步晶化法合成了片状结构MOR, 该MOR表现出优异的催化活性, 醋酸甲酯收率达到 $0.72 \text{ gMA} \cdot \text{gcat}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$  (473K、2MPa)。随后, 科研人员利用二维固体核磁技术和DFT计算确定了骨架铝原子在T1至T4分布, 发现该片状结构丝光沸石8-MR孔道的铝原子富集在T3位, 动力学研究发现该酸性位的反应速率高达 $7.2 \text{ mol}_{\text{MA}} \cdot \text{mol}_{\text{T3-Al}}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$  (473K、1MPa)。随后, 科研人员调变不同MOR样品的T1至T4位分布, 发现位于8-MR窗口的T4酸性位也具有催化作用, 但其活性只有T3位的1/4, 从实验上证明T3位在催化二甲醚羰基化反应中的主导作用。该工作从原子尺度定量描述了丝光沸石分子筛8-MR孔道T位的催化反应化学, 也深化了对沸石分子筛催化剂活性位结构的认知。

相关研究成果以“Experimental Identification of the Active Sites over a Plate-Like Mordenite for the Carbonylation of Dimethyl Ether”为题, 于近日发表在Chem上。该工作的共同第一作者是我所501组博士研究生熊志平和中科院精密测量科学与技术研究院齐国栋副研究员。上述工作得到了国家自然科学基金等项目的支持。(文/王宁 图/熊志平)

文章链接: <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2022.09.002>  
(<https://doi.org/10.1016/j.chempr.2022.09.002>)



---

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

地址：辽宁省大连市沙河口区中山路457号 邮编：116023  
电话：+86-411-84379163 / 9198 传真：+86-411-84691570  
邮件：[dicp@dicp.ac.cn](mailto:dicp@dicp.ac.cn)  
(<mailto:dicp@dicp.ac.cn>)



官方微信



化学之美



(<https://bszs.cas.ac.cn/>  
method=shov)

---

版权所有 © 中国科学院大连化学物理研究所 本站内容如涉及知识产权问题请联系我们 备案号：辽ICP备05000861号-1  
(<https://beian.miit.gov.cn/>) 辽公网安备21020402000367号

