高等学校化学学报
CHEMICAL JOURNAL OF CHINESE UNIVERSITIES
研究论文

# 不同元素组成分子筛结构与有机结构导向剂主客体相互作用的高通量计算

李　霖[1,2], 王　晨[2], 王嘉泽[1,2], 李　莉[1]
(1. 吉林大学无机合成与制备化学国家重点实验室, 化学学院,
2. 吉林大学未来科学国际合作联合实验室, 长春 130012)

**摘要**　分子筛是一种具有规则孔道结构的无机微孔晶体材料, 广泛应用于工业吸附分离和催化过程. 本文从已知的260余种分子筛拓扑结构中选取了14种能够以纯硅、硅铝和磷酸铝形式合成的拓扑结构, 通过高通量计算方法探究了有机结构导向剂(OSDA)对这些不同元素组成的分子筛骨架的结构导向作用. 研究结果表明, 不同的OSDA对元素组成结构的导向作用有显著差异, 某些OSDA倾向于导向纯硅或硅铝结构, 而另一些则更倾向于导向纯磷酸铝结构. 本文所得结果不仅有助于加深对OSDA在分子筛合成中作用机制的理解, 还可为设计和合成具有特定元素组成的分子筛提供理论依据.

**关键词**　分子筛; 元素组成; 有机结构导向剂; 主客体相互作用
**中图分类号**　O614　　**文献标志码**　A　　doi: 10.7503/cjcu20240497

# High-throughput Calculations of Host-guest Interactions Between Organic Structure-directing Agents and Zeolite Structures with Different Elemental Compositions

LI Lin[1,2], WANG Chen[2], WANG Jiaze[1,2], LI Li[1*]
(*1. State Key Laboratory of Inorganic Synthesis and Preparative Chemistry, College of Chemistry,*
*2. International Center of Future Science, Jilin University, Changchun* 130012, *China*)

**Abstract**　Zeolites are inorganic microporous crystalline materials with regulated channel structures, which are widely used in industrial adsorption separation and catalytic processes. This work selected 14 topologies that can be synthesized in the form of pure silica, aluminosilicate, and aluminophosphate from over 260 known zeolite topologies, and explored the structure-directing effects of different organic structure-directing agents (OSDAs) for zeolite frameworks with different compositions *via* high-throughput computational methods. Results show that the OSDAs significantly affects the elemental composition of zeolites, with certain OSDAs tending to direct the formation of pure silica or aluminosilicate structures, while others preferentially direct towards pure aluminophosphate structures. These findings not only deepen the understanding of the synthetic mechanism of zeolites, but also provide a theoretical basis for the design and synthesis of zeolites with specific elemental compositions.

**Keywords**　Zeolite; Elemental composition; Organic structure-directing agent; Host-guest interaction

分子筛是一种具有规则有序孔道结构的无机微孔晶体材料, 其骨架主要由$TO_4$四面体(T通常指四

收稿日期: 2024-11-08. 网络首发日期: 2025-01-16.
联系人简介: 李　莉, 女, 博士, 高级工程师, 主要从事分子筛合成方面的研究. E-mail: lili_jlu@jlu.edu.cn
基金项目: 吉林省教育厅科学研究项目(批准号: JJKH20231127KH)和吉林大学实验技术项目(批准号: SYXM2024a002)资助.
Supported by the Scientific Research Project of the Education Department of Jilin Province, China(No. JJKH20231127KH) and the Project on Experimental Technique of Jilin University, China(No. SYXM2024a002).

配位的硅、铝或磷)构成，并通过共享氧顶点形成环状、笼状及孔道结构. 这种独特的孔道特征使分子筛能够选择性地吸附和分离特定大小、形状或极性的客体分子[1~4]. 此外，得益于孔道的限域效应和活性位点的特定分布，分子筛还能作为择形催化剂用于高效且选择性地生产特定化学品[5]. 由于具备卓越的形状选择性、可调变的酸度、出色的热稳定性和相对低廉的生产成本，分子筛已成为工业领域中至关重要的吸附分离材料，尤其在石油化工行业中作为核心固体催化剂而被广泛应用[1,2,6~9]. 不仅如此，随着科技的发展，分子筛的应用范围也在不断扩展，并在电子器件、光学设备乃至医疗健康等多个新兴领域也展现出了巨大的潜力[1,5].

由于分子筛的合成受到原料配比、有机模板剂、温度、pH值以及反应时间等多种复杂因素的影响，其详细的合成机理至今仍不完全明了. 这使得开发具有工业应用价值的新型分子筛材料面临诸多挑战. 在分子筛合成过程中，有机结构导向剂(OSDAs)发挥着至关重要的作用，它们通过占据孔道位置来导向特定结构的形成，是实现所需拓扑结构和精确孔径控制的关键因素[10]. 目前，研究人员已开发了多种新型OSDAs，这些OSDAs能够导向形成具有新颖或改进性能的分子筛结构. 通过使用特定的OSDAs，可以制备出具有独特孔道结构的沸石分子筛. 例如，Chen等[11,12]使用三环己基甲基膦($C_{19}H_{36}P^+$和tCyMP)作为模板合成了一系列具有独特超大孔结构的新型硅基分子筛ZEO-1，ZEO-2和ZEO-3. 其中，ZEO-1由三维的16元环和12元环通道组成，是第一个具有三维超大孔隙的纯硅分子筛. 在ZEO-1的结构中，研究人员发现有3个晶体学上独立的tCyMP分子位于16×16，16×12和12×12元环的超大笼中. 该分子筛在催化裂化反应中显示出比商用Y型分子筛更好的催化性能. Corma等[13]利用高通量模拟、文献挖掘和机器学习相结合的方法，预测了对分子筛合成中共生生长的控制，并在实验中合成了AEI/CHA共生分子筛，提供了一种新的分子筛设计和优化方法.

近年来，关于分子筛OSDAs的研究取得了一系列重要进展，深化了对于分子筛合成机理的理解[3,10,14~17]. 然而，分子筛的元素组成具有高度可调性，同一种拓扑结构可以采用纯硅、硅铝或磷酸铝等不同的化学组成来实现. 目前，大多数理论研究倾向于集中在特定元素组成的分子筛上(如纯硅分子筛)，而对于OSDAs与不同元素组成分子筛之间相互作用机制的研究较少[18]. 这种研究上的局限性限制了对OSDAs在多样化分子筛体系中作用的全面理解，进而影响到新型材料的设计与开发. 本文从已知的260余种分子筛拓扑结构中挑选出14种能够同时以纯硅、硅铝和磷酸铝形式合成的拓扑类型，并通过高通量计算方法系统探究了OSDAs对这些不同元素组成分子筛骨架的结构导向作用，旨在更深入地揭示OSDAs调控分子筛结构的机制，从而为分子筛合成机理提供更加全面的认识，并促进新型高性能分子筛材料的研发.

## 1 实验部分

目前，国际分子筛协会(IZA)已收录了265种不同的分子筛拓扑结构[19]. 本文选择了14种能够同时以纯硅、硅铝和磷酸铝形式合成的拓扑类型作为初始结构，并基于这些拓扑搭建了纯硅、磷酸铝以及不同硅铝比的硅铝分子筛模型. 这14种拓扑结构包括AEI，AFX，BPH，CHA，FAU，GIS，GME，LAU，LEV，LOS，LTA，MER，PHI和RHO，结构如图1所示. 其中，部分分子筛拓扑(如FAU和LAU)的磷酸铝形式必须引入Co，Mn，Zn等杂原子掺杂才能成功合成[20,21]. 由于这些杂原子不在本工作考虑范围内，因此我们仅考虑了各个拓扑的纯磷酸铝模型. 在后续的工作中，我们将针对特定杂原子掺杂模型的主客体相互作用进行更加系统的计算.

为了更好地与实验合成相结合，并更好地解释实验和指导分子筛合成，我们选用的OSDAs均为已报道的化合物[22]. 同时，为了探究不同OSDAs对不同元素组成结构导向性的差异，在保证OSDAs与分子筛孔道相匹配的前提下，对同一种分子筛拓扑结构选择了具有不同分子量和尺寸的5种OSDAs分子. 对于LOS、MER和PHI 3种拓扑结构，实验合成中使用的OSDAs种类较少，考虑到OSDAs与孔道尺寸的匹配关系，分别选取了1种、2种和3种OSDAs. 每种拓扑结构对应OSDAs的信息及结构构象分别见表S1和表S2(见本文支持信息)，分子筛孔道维度、孔道开口、内部最大可及球体直径及OSDAs尺

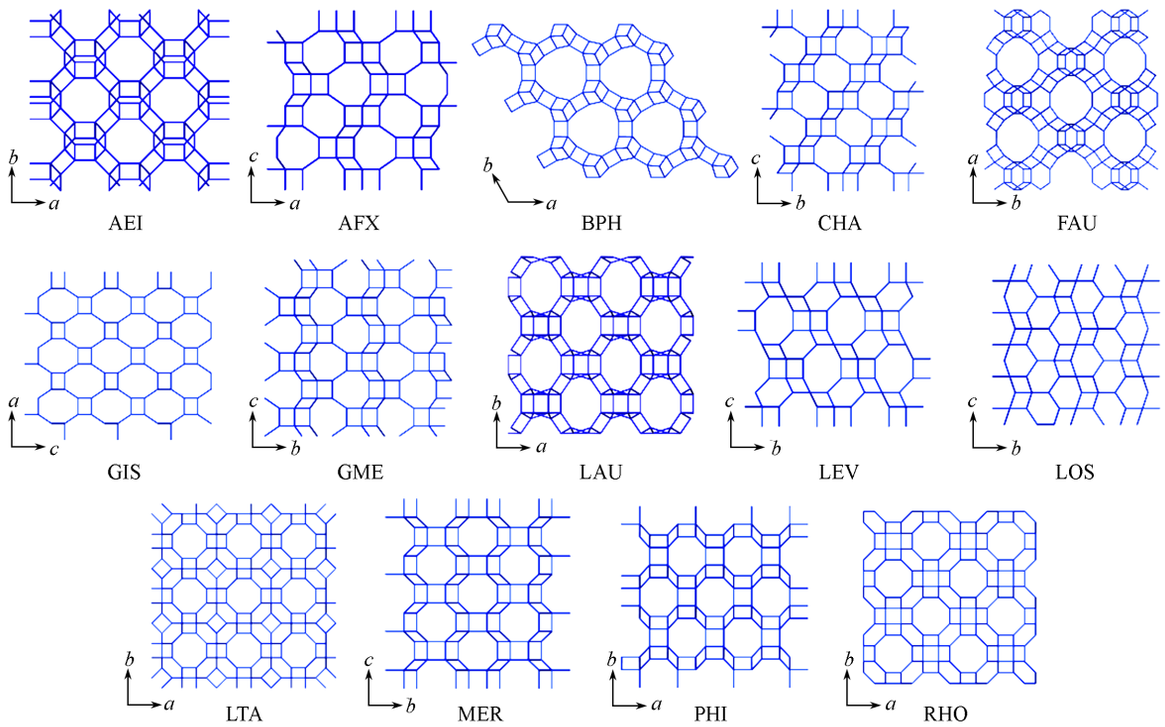


**Fig. 1　Structures of the 14 zeolite topologies**

寸信息见表S3(见本文支持信息). 所有OSDAs模型使用Materials Studio软件中的Dmol$^3$模块进行结构优化[23], 采用广义梯度近似下的Perdew-Burke-Ernzerhof(GGA-PBE)泛函, 并计算其Mulliken电荷[24~26].

硅铝分子筛模型的构建是在遵循Löwenstein规则的前提下进行的[27], 在相应的纯硅模型中随机引入铝(Al)来替换骨架中的硅(Si). 我们设定了5种不同的硅铝比梯度, 即Al的引入量在总T原子中所占的比例分别为5%, 10%, 20%, 30%和50%. 对于每种拓扑结构, 在5%, 10%, 20%和30%的Al引入量下, 分别构建了10个随机取代模型. 由于Löwenstein规则的限制, 在50%的Al引入量下, 每种拓扑结构仅存在一种可能的硅铝分子筛模型. 硅铝分子筛模型的生成利用了Materials Studio软件内置的Perl脚本程序进行批量处理[23]. 最终, 共搭建了14种纯硅分子筛模型、574种不同硅铝比的硅铝分子筛模型以及14种磷酸铝分子筛模型. 在引入OSDAs分子前, 需要对搭建的纯硅、硅铝和磷酸铝分子筛进行充分的结构弛豫, 以保证初始结构构型的合理性. 这些模型使用GULP程序在恒压条件下进行结构优化[28], 原子间的相互作用采用专门针对分子筛结构的Sanders-Leslie-Catlow(SLC)力场进行描述[29], 力场参数列于表S4(见本文支持信息)中.

将优化后的OSDAs组装进相应分子筛的孔道及笼结构中, 共搭建了2623个主客体相互作用模型, 其中纯硅、硅铝和磷酸铝分子筛分别有61、2501和61个模型. 针对每个客体分子, 尝试了不同的初始位置和方向. 使用Materials Studio软件的Forcite模块[23]进行结构优化, 选择了具有最低能量的构象用于后续的模拟退火计算. 主客体模型的结构优化和模拟退火均采用Dreiding力场. 为了降低计算量, 计算过程中均固定骨架原子, 客体分子不固定. 在本文中, 体系总体保持中性. OSDAs阳离子的电荷采用经过DFT优化后得到的Mulliken原子点电荷, 根据分类不同, 分别带有+1或+2电荷. 对于主体骨架, 用统一电荷背景法来补偿阳离子的正电荷, 使得骨架总体带负电荷. 骨架Si, Al, P原子电荷保持固定, 分别为0.38, 0.55和0.23. 骨架O原子电荷逐渐降低至体系电荷呈电中性.

采用模拟退火计算得到稳定的主客体模型, 用于计算OSDAs与分子筛的主客体相互作用. 模拟退火使用Materials Studio软件的Forcite模块[23], 退火温度范围设置为300~1000 K, 增量为10 K. 在每个升温和降温循环中进行1.0 fs的分子动力学模拟, 每个循环重复10次. 在每个循环结束时, 对所有构象都进行结构优化. 在非键作用能的计算中, 范德华和静电相互作用分别采用Atom based方法和

Ewald求和法计算. 主客体非键相互作用能($E_{int}$, kJ/mol)的计算采用Dreiding力场, 根据下式进行计算:

$$E_{int}=E_{zeo+OSDA}-nE_{OSDA}-E_{zeo} \quad (1)$$

式中: $E_{zeo+OSDA}$(kJ/mol)为主客体模型的能量; $E_{OSDA}$(kJ/mol)为OSDA的能量; $n$为主客体模型中引入的OSDA数量; $E_{zeo}$(kJ/mol)为分子筛模型的能量. 由于在5%, 10%, 20%和30%的Al引入量下, 每种硅铝分子筛分别构建了10个随机取代模型, 对于每种OSDA, 取这10个$E_{int}$值的平均值, 以提高结果的可靠性和统计意义.

## 2 结果与讨论

分别计算了纯硅、硅铝(Al引入量5%, 10%, 20%, 30%和50%)和纯磷酸铝分子筛与OSDAs的主客体相互作用能. 计算结果如图2所示, 具体数值见表S2. 对于AEI拓扑, OSDA2对纯硅、Al引入量为50%的硅铝和纯磷酸铝结构表现出较强的导向作用. 其余4种OSDAs对不同元素组成结构的$E_{int}$无明显差异, $E_{int}$极差范围为3. 54~9. 97 kJ/mol, 表明这些OSDAs对不同元素组成的AEI结构没有明显的偏好性. 对于AFX拓扑, OSDA4对纯硅、Al引入量为50%的硅铝和纯磷酸铝结构的导向作用显著更强, $E_{int}$极差为22. 87 kJ/mol, 其它4种OSDAs的$E_{int}$极差范围为6. 10~11. 54 kJ/mol. 对于BPH拓扑, 5种OSDAs对Al引入量为30%的硅铝分子筛结构导向作用略弱于其它元素组成的结构, 但$E_{int}$极差范围仅为3. 55~12. 47 kJ/mol, 说明OSDAs对不同元素组成结构的导向作用差异不大. 对于CHA拓扑, 除OSDA5倾向于导向Al引入量为10%~30%的硅铝结构外, 其余4种OSDAs均倾向于导向纯硅、纯磷酸铝及Al引入量为5%的硅铝结构, 其$E_{int}$极差范围为12. 26~18. 35 kJ/mol. 对于FAU拓扑, OSDA1、OSDA3和OSDA5均倾向于导向Al引入量为30%的硅铝分子筛结构, $E_{int}$极差分别为46. 04, 33. 50和31. 37 kJ/mol. 而OSDA2和OSDA4则更倾向于导向纯磷酸铝结构, $E_{int}$极差分别为8. 34和14. 96 kJ/mol. 对于GIS拓扑, 5种OSDAs的结构导向作用差异均较小, $E_{int}$极差范围为4. 77~13. 79 kJ/mol. 其中, OSDA3和OSDA4均倾向于导向Al引入量为50%的硅铝和纯磷酸铝结构, $E_{int}$极差分别为13. 79和11. 00 kJ/mol, 其余3种OSDAs的结构导向作用无明显差异. 对于GME拓扑, 5种OSDAs的结构导向作用差异均较小, $E_{int}$极差范围为2. 31~13. 23 kJ/mol. 其中, OSDA2略倾向于导向Al引入量为50%的硅铝结构, $E_{int}$极差为13. 23 kJ/mol, 其余4种OSDAs的结构导向作用无明显差异. 对于LAU拓扑, 5种OSDAs对不同元素组成结构的$E_{int}$均表现出较大的差异, 对Al引入量为30%的硅铝结构导向作用最弱, 对纯硅、Al引入量为50%的硅铝和纯磷酸铝结构的导向作用最强, $E_{int}$极差范围为14. 30~22. 75 kJ/mol. 对于LEV拓扑, $E_{int}$极差范围为19. 16~44. 13 kJ/mol, 不同元素组成结构的导向作用表现出明显差异. 其中, OSDA3倾向于导向纯硅、Al引入量为5%和10%的硅铝结构, 其余4种OSDAs则更倾向于导向纯磷酸铝结构. 对于LOS拓扑, 仅考虑了1种OSDA, 结构导向作用由强到弱分别为纯磷酸铝、Al引入量50%, 20%, 30%, 10%, 5%的硅铝和纯硅结构, $E_{int}$极差为13. 54 kJ/mol. 对于LTA拓扑, 5种OSDAs对不同元素组成结构的导向作用差异均不明显, $E_{int}$极差范围为3. 06~8. 92 kJ/mol. 5种OSDAs对纯硅结构的导向作用均略强于其它元素组成的结构. 对于MER拓扑, 考虑了2种OSDAs, $E_{int}$极差分别为10. 43和3. 57 kJ/mol, 对不同元素组成结构的导向作用差异不明显. 2种OSDAs对纯磷酸铝的导向作用均略强与其它元素组成的结构. 对于PHI拓扑, 考虑了3种不同的OSDAs, 它们对纯磷酸铝的PHI结构导向作用较强, $E_{int}$极差分别为16. 47、6. 08和4. 88 kJ/mol. 对于RHO拓扑, 5种OSDAs均对Al引入量50%和纯磷酸铝结构表现出较强的导向作用, $E_{int}$极差范围为5. 58~14. 54 kJ/mol.

选取部分对特定元素组成结构表现出较明显导向作用的OSDAs与实验结果进行对比验证. 其中, OSDA4对AFX拓扑的纯硅、Al引入量为50%的硅铝和纯磷酸铝结构的导向作用显著更强, 在实验报道中, OSDA4主要用于硅掺杂磷酸铝分子筛SAPO-56的合成, 与计算结果基本一致[30]. 对于CHA拓扑, 计算结果显示OSDA2倾向于导向纯硅、纯磷酸铝及Al引入量为5%的硅铝结构. 在实验合成中, 该模板剂被报道用于硅铝分子筛SSZ-13的合成, 其Al引入量为3. 2%~4%[31]. 对于FAU拓扑, OSDA1对Al引入量为30%的硅铝分子筛结构表现出较强的倾向性, 实验中报道的Al引入量约为25%[32]. OSDA1对

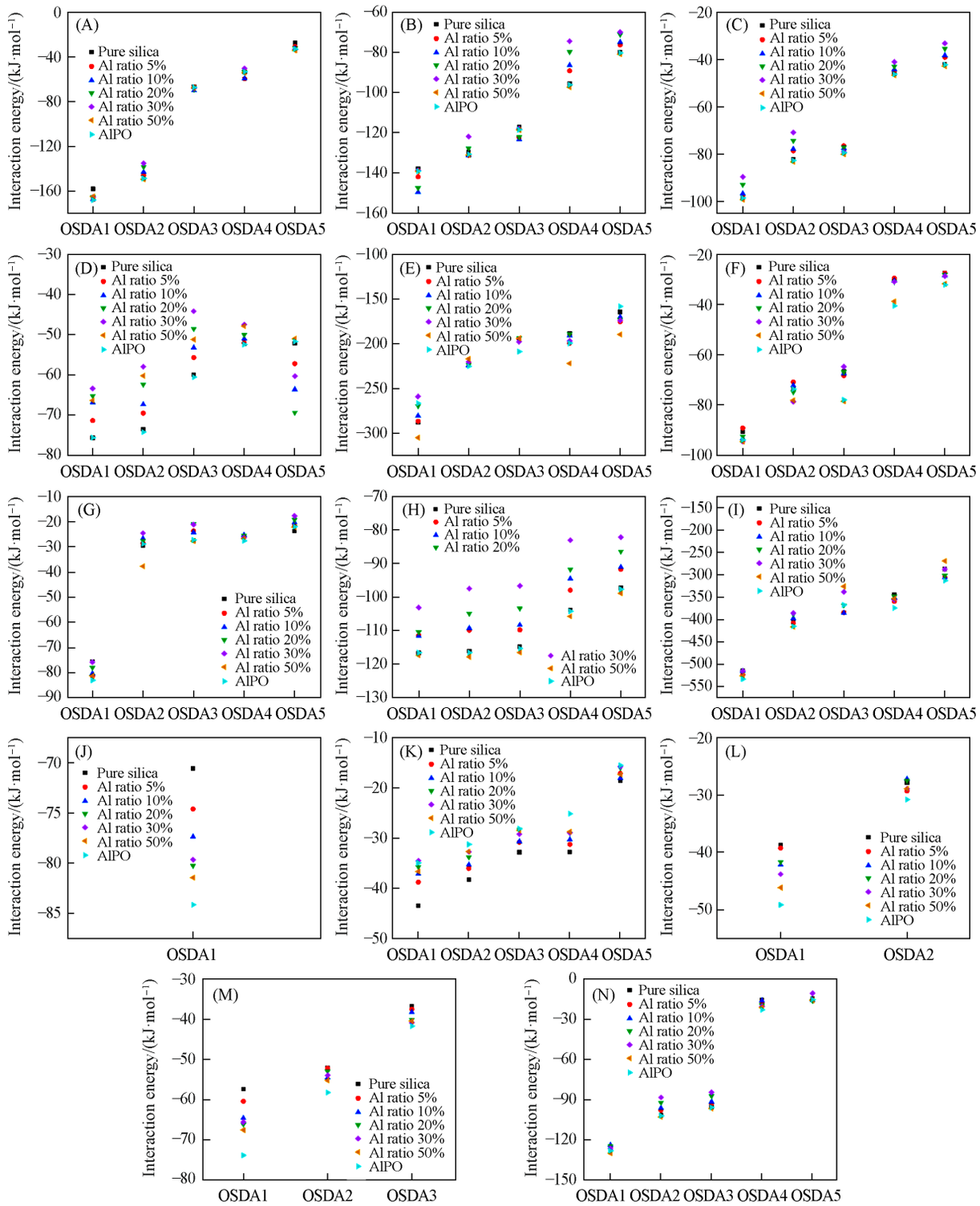


**Fig. 2 Host-guest interaction energy of 14 zeolite topologies in the forms of pure silica, aluminosilicate, and AlPO with OSDAs**

(A) AEI; (B) AFX; (C) BPH; (D) CHA; (E) FAU; (F) GIS; (G) GME; (H) LAU; (I) LEV; (J) LOS; (K) LTA; (L) MER; (M) PHI; (N) RHO.

LAU拓扑的纯硅、Al引入量为50%的硅铝和纯磷酸铝结构的导向作用较强，该模板剂在实验中被用于合成杂原子掺杂的磷酸铝分子筛[21]. 对于LEV拓扑，OSDA1对磷酸铝结构表现出较强的导向性，该模板剂在实验中同样被报道用于硅掺杂磷酸铝分子筛SAPO-35的合成[33].

从以上结果可以看出，OSDAs对一些分子筛结构的元素组成具有显著的影响．例如，对于AEI，AFX，CHA，FAU，LAU，LEV和RHO拓扑结构，一些OSDAs倾向于导向纯硅或硅铝结构；对于AEI，AFX，CHA，GIS，LEV，LOS，MER，PHI和RHO拓扑结构，部分OSDAs则倾向于导向纯磷酸铝结构；而对于BPH、GIS、GME和LTA拓扑结构，本工作考虑的OSDAs对不同元素组成的结构均未表现出明显的导向性差异．可见，对于同一种分子筛拓扑结构，特定的OSDAs更加倾向于导向某种特定元素组成的结构．

通过选择合适的OSDAs，可以更有针对性地合成出具有特定元素组成的分子筛，从而满足特定的应用需求[10,15]．这些计算结果不仅有助于加深不同OSDAs对特定元素组成分子筛结构导向作用的理解，还可为研究人员在实验中更有效地选择和使用OSDAs提供指导，从而提高分子筛定向合成的成功率和效率．此外，通过OSDAs调控分子筛的元素组成，可以开发出具有新功能或改进性能的分子筛材料，从而拓宽其在催化、吸附、分离等领域的应用．

然而，本工作仅探讨了不同元素组成结构与OSDAs的关系，并未深入研究不同元素在分子筛孔道中特定位点分布的影响．在后续的研究中，我们将针对硅铝和硅掺杂磷酸铝分子筛体系开展高通量计算，通过设计Al或Si在孔道中的不同分布位点，进一步探究OSDAs对特定元素位点分布的导向性作用，为优化分子筛的设计提供更为全面的理论依据．

## 3 结　　论

通过系统计算不同元素组成对OSDAs与分子筛主客体相互作用的影响，揭示了特定OSDAs对特定元素组成的偏好性．结果表明，部分OSDAs对一些特定元素组成的拓扑结构具有显著的导向作用，如，某些OSDAs倾向于导向纯硅或硅铝结构，而另一些则更倾向于导向纯磷酸铝结构．这些发现不仅深化了我们对OSDAs在分子筛合成中作用机制的理解，还为设计和合成具有特定元素组成的分子筛提供了理论依据．通过选择合适的OSDAs，可以更有针对性地合成出满足特定应用需求的分子筛材料，从而提高定向合成的成功率和效率，并开发出具有新功能或改进性能的分子筛．未来的研究将深入探讨不同元素在分子筛孔道中的特定位点分布与OSDAs的关系，为进一步优化分子筛的定向设计及合成提供理论依据．

支持信息见http://www.cjcu.jlu.edu.cn/CN/10.7503/cjcu20240497.

## 参　考　文　献

[1] Li Y., Yu J., *Nat. Rev. Mater.*, **2021**, *6*(12), 1156—1174
[2] Zhang Q., Yu J., Corma A., *Adv. Mater.*, **2020**, *32*(44), 2002927
[3] Xu H., Wu P., *Natl. Sci. Rev.*, **2022**, *9*(9), nwac045
[4] Sun Q., Wang N., Yu J., *Adv. Mater.*, **2021**, *33*(51), 2104442
[5] Li Y., Li L., Yu J. H., *Chem*, **2017**, *3*(6), 928—949
[6] Xie J., Olsbye U., *Chem. Rev.*, **2023**, *123*(20), 11775—11816
[7] Wang Y., Tong C., Liu Q., Han R., Liu C., *Chem. Rev.*, **2023**, *123*(19), 11664—11721
[8] Velty A., Corma A., *Chem. Soc. Rev.*, **2023**, *52*(5), 1773—1946
[9] Chen G. N., Liu G. Z., Pan Y., Liu G. P., Gu X. H., Jin W. Q., Xu N. P., *Chem. Soc. Rev.*, **2023**, *52*(14), 4586—4602
[10] Luan H., Wu Q., Wu J., Meng X., Xiao F. S., *Chin. J. Struc. Chem.*, **2024**, *43*(4), 100252
[11] Li J., Gao Z. R., Lin Q. F., Liu C., Gao F., Lin C., Zhang S., Deng H., Mayoral A., Fan W., Luo S., Chen X., He H., Camblor M. A., Chen F. J., Yu J., *Science*, **2023**, *379*(6629), 283—287
[12] Lin Q. F., Gao Z. R., Lin C., Zhang S., Chen J., Li Z., Liu X., Fan W., Li J., Chen X., Camblor M. A., Chen F. J., *Science*, **2021**, *374*(6575), 1605—1608
[13] Schwalbe-Koda D., Kwon S., Paris C., Bello-Jurado E., Jensen Z., Olivetti E., Willhammar T., Corma A., Román-Leshkov Y., Moliner M., Gómez-Bombarelli R., *Science*, **2021**, *374*(6565), 308—315
[14] Zhang Q., Gao S., Yu J., *Chem. Rev.*, **2023**, *123*(9), 6039—6106
[15] Wu Q., Luan H., Xiao F. S., *Natl. Sci. Rev.*, **2022**, *9*(9), nwac023
[16] Hu Z. P., Han J., Wei Y., Liu Z., *ACS Catal.*, **2022**, *12*(9), 5060—5076

[17] Gao X. Y., Yeo S., Gounder R., Moini A., Schneider W. F., *Chem. Mater.*, **2024**, *36*(23), 11558—11569
[18] Mallette A. J., Shilpa K., Rimer J. D., *Chem. Rev.*, **2024**, *124*(6), 3416—3493
[19] Baerlocher C., McCusker L. B., Database of Zeolite Structures, http://www.Iza-structure.org/databases/
[20] Feng P., Bu X., Stucky G. D., *Nature*, **1997**, *388*(6644), 735—741
[21] Song X., Li J., Guo Y., Pan Q., Gan L., Yu J., Xu R., *Inorg. Chem.*, **2009**, *48*(1), 198—203
[22] Jensen Z., Kwon S., Schwalbe-Koda D., Paris C., Gómez-Bombarelli R., Román-Leshkov Y., Corma A., Moliner M., Olivetti E. A., *ACS Cent. Sci*, **2021**, *7*(5), 858—867
[23] Materials Studio 2018, *Dassault Systèmes*, San Diego, CA, **2017**
[24] Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M., *Phys. Rev. Lett.*, **1996**, *77*(18), 3865—3868
[25] Perdew J. P., Ruzsinszky A., Csonka G. I., Vydrov O. A., Scuseria G. E., Constantin L. A., Zhou X., Burke K., *Phys. Rev. Lett.*, **2008**, *100*(13), 136406
[26] Tkatchenko A., Scheffler M., *Phys. Rev. Lett.*, **2009**, *102*(7), 073005
[27] Löwenstein W., *Am. Mineral.*, **1954**, *39*, 92—96
[28] Gale J. D., Rohl A. L., *Mol. Simul.*, **2003**, *29*(5), 291—341
[29] Sanders M. J., Leslie M., Catlow C. R. A., *J. Chem. Soc., Chem. Commun*, **1984**, (19), 1271—1273
[30] Xie Z., Zhu M., Nambo A., Jasinski J. B., Carreon M. A., *Dalton Trans*, **2013**, *42*(19), 6732—6735
[31] Sarker M., Khan N. A., Yoo D. K., Bhadra B. N., Jun J. W., Kim T. W., Kim C. U., Jhung S. H., *Chem. Eng. J.*, **2019**, *377*, 120116
[32] Vaughan D. E. W., Strohmaier K. G., *Microporous Mesoporous Mater.*, **1999**, *28*(2), 233—239
[33] Lok B. M., Messina C. A., Patton R. L., Gajek R. T., Cannan T. R., Flanigen E. M., *J. Am. Chem. Soc.*, **1984**, *106*(20), 6092—6093

(Ed.: N, K, M)