研究揭示甲醇制烯烃反应中C-C键的生成机理

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/14429.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

研究揭示甲醇制烯烃反应中C-C键的生成机理。近日，中国工程院院士、中科院大连化学物理研究所研究员刘中民，中科院大连化学物理研究所研究员魏迎旭、徐舒涛团队，与中科院精密测量科学与技术创新研究院研究员郑安民团队合作，在甲醇制烯烃初始碳—碳（C—C）键生成机理研究方面取得新进展，揭示了甲醇制烯烃反应中C—C键的生成机理。相关研究成果发表在《化学》上。

作为重要的煤化工过程，甲醇制烯烃（MTO）是C1化学的重要反应。在这个反应中，从C1物种甲醇或者二甲醚生成第一个C—C键的反应机理一直是C1化学中极具挑战性和争议性的课题。由于转化发生在反应的最初始阶段，难以捕获中间物种，一直以来缺乏直接证据解释反应机理。团队在前期的工作中实现了原位观测MFI结构ZSM—5分子筛上催化C1物种生成的类亚甲氧基物种，由此获取了C1物种活化生成第一个C—C键的直接谱学证据。

该研究中，团队进一步研究了八元环CHA笼结构分子筛SSZ—13催化甲醇转化反应初始阶段C—C键的形成机理：通过原位固体核磁共振技术，实现了催化剂表面C1反应物、C1反应中间体、C1物种活化态的观测；特别是首次在真实MTO反应过程中实现了初始烯烃前驱体表面乙氧基的捕获，由此构成了从C1反应物出发生成初始C—C键的完整反应链条。此外，团队还采用从头计算分子动力学技术，理论模拟了由甲醇/二甲醚和甲氧基/三甲基氧鎓离子出发形成C—C键的反应路径，并可视化地再现了反应历程。综合实验证据和理论计算结果，团队建立了完整可行的表面甲氧基/三甲基氧鎓离子与分子筛骨架氧协同活化甲醇/二甲醚并生成初始C—C键的直接反应机理。该工作不仅完善了MTO反应机理，也丰富了C1催化化学的基本理论。（来源：中国科学报 卜叶）

相关论文信息：https://doi.org/10.1016/j.chempr.2021.05.023

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：刘中民等 来源：《化学》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发