
科学家揭示乙烯酮转化为低碳烯烃反应网络及机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/33620.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！

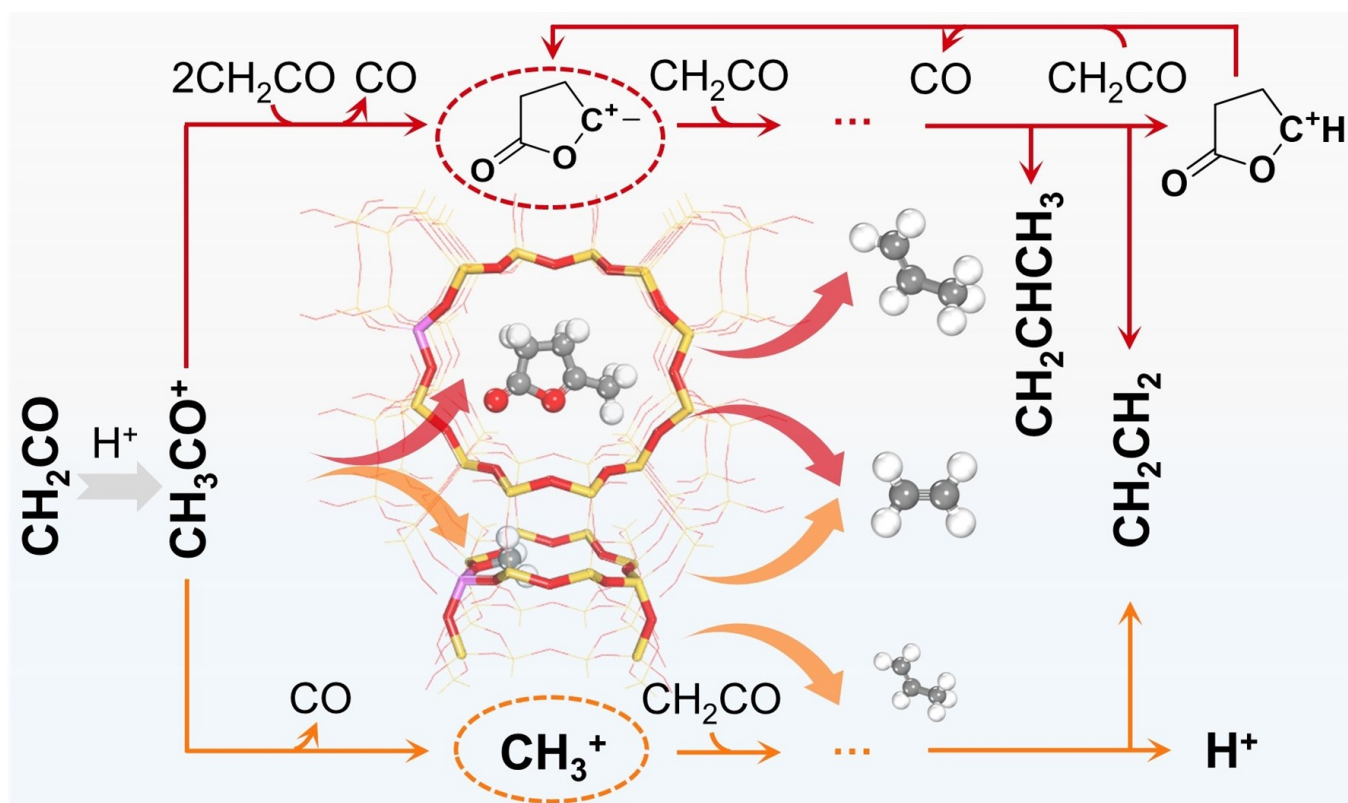
科学家揭示乙烯酮转化为低碳烯烃反应网络及机制。华东理工大学教授王海丰课题组，揭示了与孔道类型有关的乙烯酮（ CH_2CO ）转化为低碳烯烃的反应网络，对 CH_2CO 催化转化化学提供了定量的机制理解，有助于高效分子筛催化剂的设计。相关研究近日发表于《美国化学会志》。

双功能金属氧化物-分子筛（OX-ZEO）催化剂因其具有将合成气转化为低碳烯烃的优异选择性而受到广泛关注。其中，分子筛组分能够打破传统费托合成中的Anderson-Schulz-Flory（ASF）分布，从而实现低碳烯烃的高选择性生成。

研究表明，氧化物上生成的 CH_2CO 可作为关键的反应中间体，扩散到分子筛中，进一步转化为低碳烯烃。然而， CH_2CO 在原子层面上如何转化为低碳烯烃的微观机制仍不清楚，阻碍了OX-ZEO催化剂的优化。

为解决此问题，研究团队聚焦于丝光沸石（MOR）分子筛进行探索。研究结果表明， CH_2CO 的转化遵循由Brønsted酸（B酸）位点引发的自催化过程，涉及反应中间体的生成及其后续的催化转化，在十二元环（12MR）和八元环侧袋（8MR）有着不同的特征。研究团队进一步分析发现，该反应机理和产物选择性差异归因于8MR较小的孔道结构对环状/长链中间体形成所施加的热力学和动力学限制。

第一性原理微观动力学模拟结果显示，尽管8MR对于 CH_2CO 转化具有较高的自由能垒，但由于其对 CH_2CO 压力的依赖性较低，因此8MR更可能是形成低碳烯烃的关键活性位点。同时，该工作也阐明了影响低碳烯烃生成选择性和活性的关键因素，为优化MOR催化剂提供了理论见解。
（来源：中国科学报 江庆龄）



丝光沸石分子筛催化乙烯酮转化的示意图。图片由研究团队提供

?

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c03687>

作者：王海丰等 来源：《美国化学会志》

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](http://www.iikx.com)转发