
二氧化碳与炔烃反应生成炔酸机理研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/37250.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！

二氧化碳与炔烃反应生成炔酸机理研究取得进展。CO₂与炔烃反合成炔酸，可将CO₂完全转化为高值化学品，兼具环境效益与经济效益。目前关于CO₂与炔反应合成炔酸的研究多集中于使用金、银、铜作为活性金属设计多相催化剂来实现末端炔烃的羧化反应。

近日，中国科学院兰州化学物理研究所通过实验结合理论模拟的方法，推导并验证了银为活性金属设计多相催化剂来实现末端炔烃羧化反应的反应过程，阐明了CeO₂载体中O_v浓度与CO₂参与的末端炔烃羧化反应催化活性之间的构效关系。

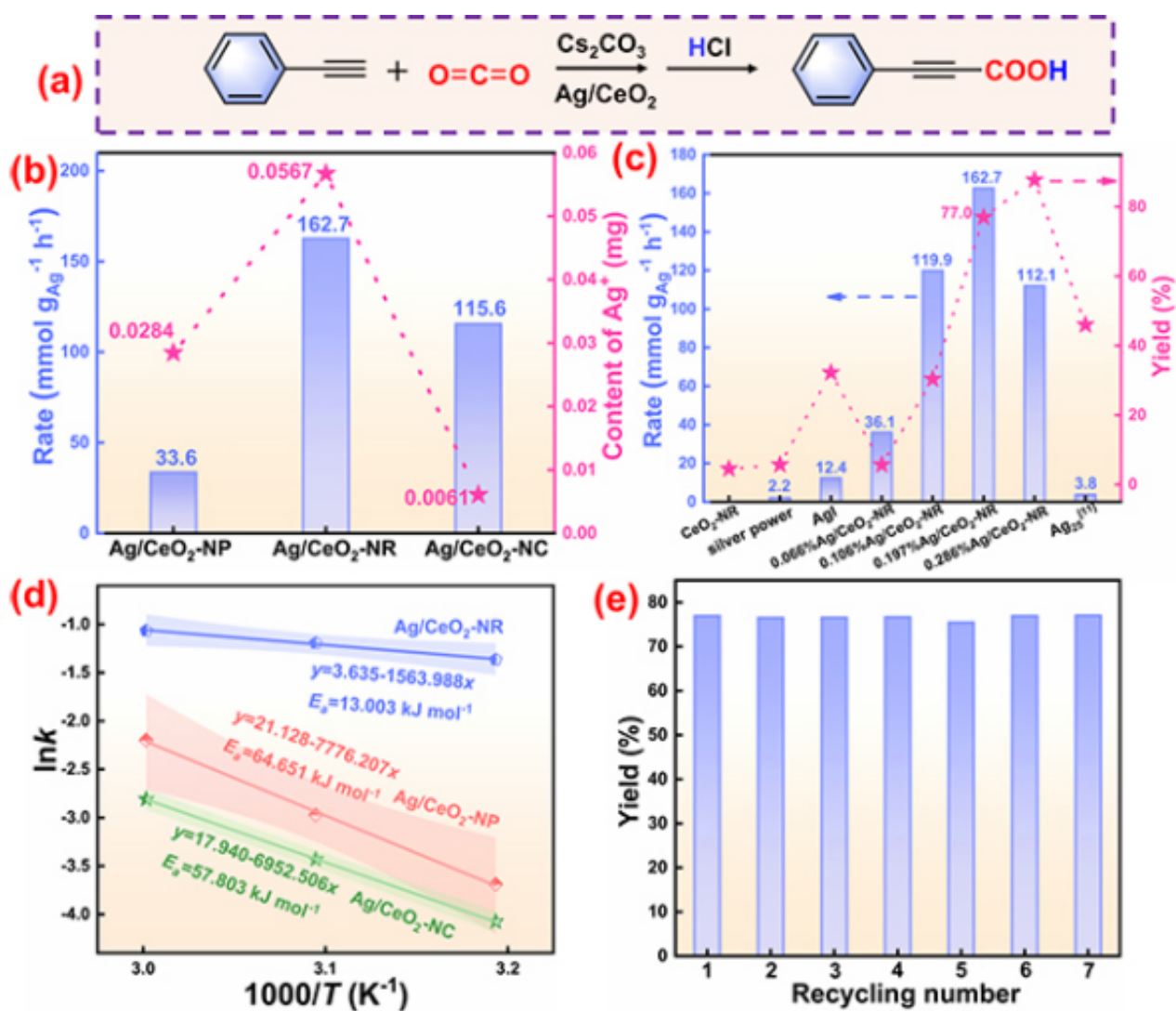
通过在缺陷可控的CeO₂上原位锚定超小银团簇，团队构建了Ag/CeO₂催化剂。团队利用DFT计算进一步证实了O_v是CO₂极化的活性位点，而银的掺入通过电子调制提高了空位浓度。带正电荷的银团簇作为炔烃的去质子活化中心，在CO₂插入过程中起到稳定炔基阴离子的作用。

团队发现，在Cs₂CO₃的协助下，苯乙炔中的酸性C(sp)⁻H键被去质子化，形成末端炔基阴离子，同时与银簇（Ag⁺）配位，生成银炔中间体；CO₂在CeO₂表面的O_v位点上吸附并发生极化，活化的CO₂插入到C—C---Ag键中，生成羧酸银中间体，随后用盐酸酸化获得产物苯丙炔酸。

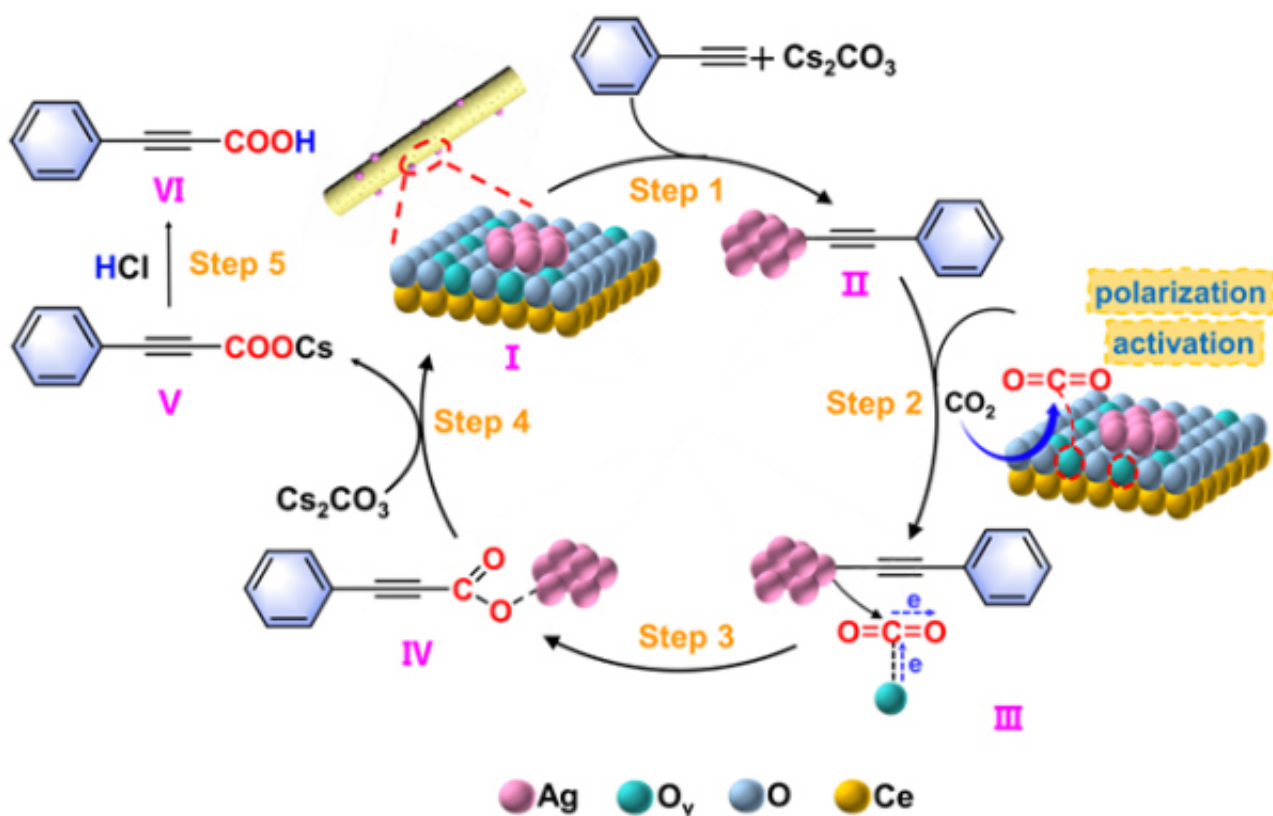
该研究成果证实了CO₂与炔反应生成炔酸为双位点协同催化机制，为未来构筑更高效的C-H羧化反应体系提供了可靠支撑。

相关研究成果发表在《能源化学》（Journal of Energy Chemistry）上。研究工作得到国家自然科学基金、中国科学院青年创新促进会、甘肃省科技重大专项等的支持。

论文链接



CO₂与端炔羧化反应的催化活性、活化能和循环性能研究



Ag/CeO₂催化CO₂与端炔发生羧化反应的机理

研究团队单位：兰州化学物理研究所

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