

---

# 有机硅单体合成反应催化机理研究取得新进展

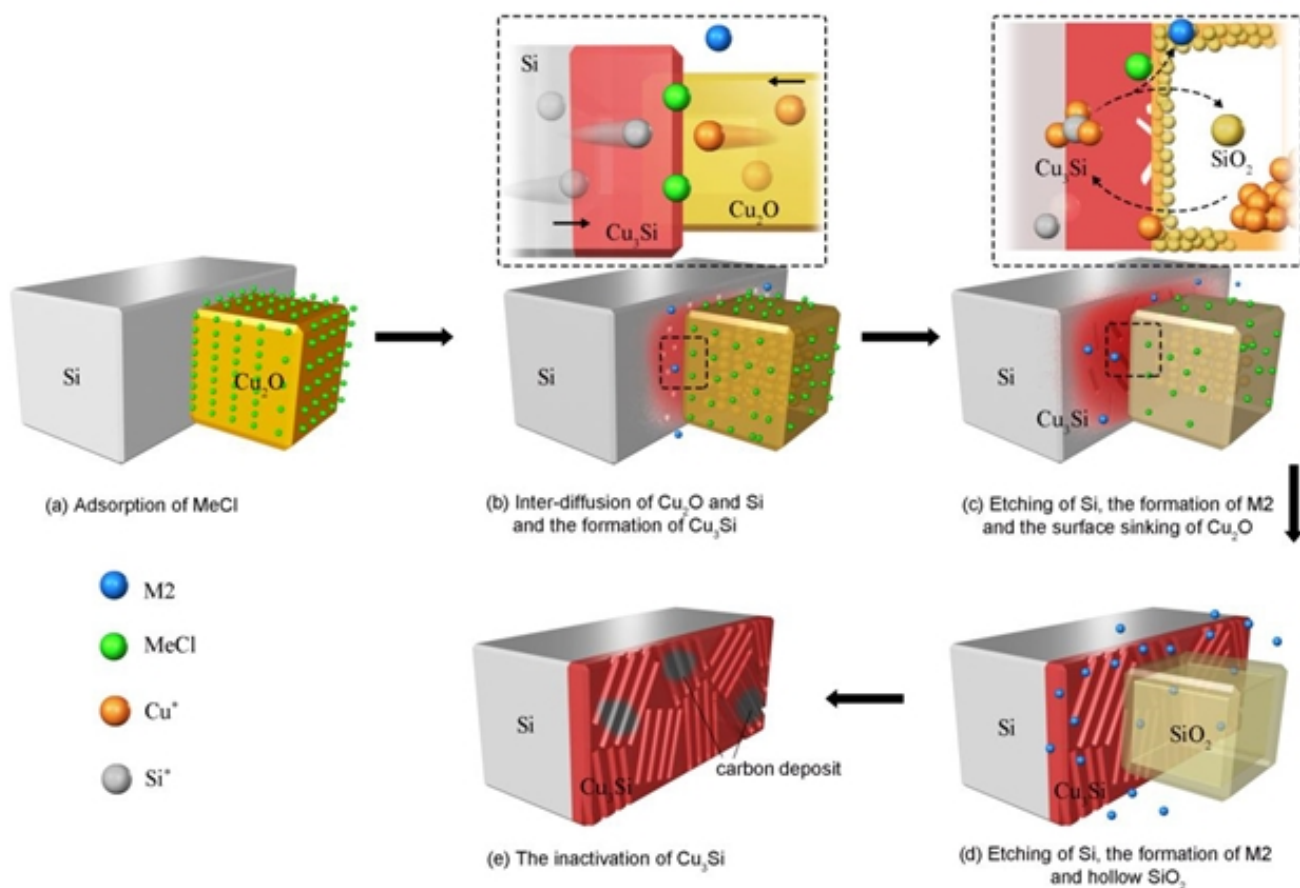
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/761.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！*

有机硅作为一种小众化学产品，对大多数人来说，可能有些陌生。其实，有机硅产品的应用范围遍及我们生产生活的各个领域：航空、建筑、电子电气、纺织、汽车、机械、皮革造纸、化工轻工、金属和油漆、医药医疗等等。其中，有一种单体——二甲基二氯硅烷(简称M2)是合成有机硅产品最重要且用量最大的单体，主要作为硅橡胶、硅树脂、密封胶、塑料等的原料，约占有机硅行业单体产量的90%，它的生产技术和水平是决定有机硅工业的关键。

目前M2单体合成的主流工艺仍然采用1941年由美国通用电气公司发现的罗乔反应。问题在于该反应在得到M2的同时，还会生成大量其他副产物，因此提高M2的选择性和收率一直以来都是工业界和学术界长期关注的热点和难点。然而，到目前为止，M2选择性和收率仍不够高，主要是由于关键催化剂——Cu基催化剂效果不够理想。另一方面催化机理到迄今为止尚不明确，致使高性能Cu基催化剂的研制仍主要依靠工业经验。



Cu<sub>2</sub>O催化剂在Rochow反应中的催化机理示意图

日前，中科院过程工程研究所苏发兵研究员团队和华东理工大学龚学庆教授团队合作，以暴露特定晶面的亚微米级Cu<sub>2</sub>O晶体作为模型催化体系，采用实验和理论计算相结合的方法在分子原子水平初步揭示了罗乔反应中铜催化剂的催化机理。他们首先通过模拟有机硅单体合成工艺实验发现了具有最高M2选择性和收率的催化剂——暴露{100}晶面的Cu<sub>2</sub>O立方体，之后采用理论计算揭示了性能提升的主要原因是反应物一氯甲烷在{100}晶面上具有更强的解离吸附。这项工作不仅揭示了Cu基催化剂在罗乔反应中微观尺度上的催化机理，而且提供了一种通过调控金属氧化物催化剂的暴露晶面来提高反应选择性的新理念，有助于有机硅工业中Cu基催化剂的研制和革新。

相关结果于2018年5月1日发表在Journal of Catalysis[Impact of the Cu<sub>2</sub>O microcrystal planes on active phase formation in the Rochow reaction and an experimental and theoretical understanding of the reaction mechanism.]。纪永军副研究员，龚学庆教授，钟子宜教授和苏发兵研究员为共同通讯作者，李晶博士和尹莉莉博士为共同第一作者。该研究得到了国家自然科学基金(Grant No. 21506224)等项目支持。(来源：科学网)

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://iikx.com)转发