

新型镍催化剂催化乙烯聚合的阳离子机理

刘跃;刘佳雯;杨小震

哈尔滨师范大学化学系,哈尔滨 150080; 中国科学院化学研究所高分子物理实验室,北京 100080

摘要:

含氮氧配位原子的镍催化剂是一类新型催化剂.文章以配体为 $[\text{NH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{O}]$ 的镍催化剂为模型,用密度泛函方法(DFT)在B3LYP/LANL2MB水平上研究了该类乙烯聚合催化的反应机理.计算结果表明,催化的反应过程中,中心原子镍最先形成带空位的四边形阳离子配合物,乙烯以垂直于催化剂平面的方式占据空位,然后旋转到催化剂平面内以利于插入反应的进行;插入反应发生后,在催化剂中Ni和 β -C之间形成一种氢桥键,协助新空位的形成,实现链的增长.

关键词: 镍催化剂 乙烯聚合 密度泛函(DFT)

收稿日期 2002-04-18 修回日期 2002-06-08 网络版发布日期 2002-12-15

通讯作者: 刘跃 Email: yuesd@0451.com

本刊中的类似文章

1. 杨咏来;徐恒泳;李文钊.Ni基催化剂上 CH_4 、 C_2H_6 和 C_2H_4 的裂解积炭性能 [J]. 物理化学学报, 2001,17(09): 773-775
2. 徐斌;朱崇业;李全芝.钨镍负载催化剂表面组份及其活性的研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(06): 543-548
3. 刘迎新;未作君;陈吉祥;张继炎;李新学;魏雄辉.溶胶-凝胶法制备Ni-SiO₂催化剂的表征与性能[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 780-784
4. 李雪玲 岳宝华 汪学广 于飞 孔令华 鲁雄刚 丁伟中.NiO/Mg_xSi_{1-x}O_y催化剂的制备及其在高温焦炉煤气中焦油组分催化裂解中的应用[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 762-766
5. 艾馨鹏 岳宝华 汪学广 杨军 鲁雄刚 丁伟中.Ni/MgO-Al₂O₃催化剂上高温焦油组分的催化转化[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
6. 金荣超;陈燕馨;崔巍;李文钊;于春英;江义.甲烷催化部分氧化制合成气的反应机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(04): 313-318

扩展功能

本文信息

PDF(1095KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 镍催化剂

▶ 乙烯聚合

▶ 密度泛函(DFT)

本文作者相关文章

▶ 刘跃

▶ 刘佳雯

▶ 杨小震