

[\[PDF全文\]](#)

研究论文

HSAPO-34 分子筛上氧鎓叶立德机理的第一性原理研究

[王仰东](#) [王传明](#) [刘红星](#) [谢在库](#)

(中国石油化工股份有限公司上海石油化工研究院, 上海 201208)

摘要 采用基于周期性边界条件的密度泛函理论研究了 HSAPO-34 分子筛上甲醇通过氧鎓叶立德机理直接耦合生成乙烯的可能性. 结果表明, 二甲醚和三甲基氧鎓离子在 HSAPO-34 分子筛上的生成能垒分别为 1.68 和 0.93 eV, 中间体氧鎓叶立德不能稳定存在, 同时表明 C-C 键通过协同反应形成的能垒均超过 3.0 eV. 因此, 甲醇制烯烃催化过程不可能遵循氧鎓叶立德机理.

关键词 [HSAPO-34 分子筛](#); [甲醇制烯烃](#); [氧鎓叶立德机理](#); [密度泛函理论](#); [三甲基氧鎓离子](#)