

Название подразделения:

Отдел физико-химических методов исследования, НТК ЯМР спектроскопия каталитических превращений углеводородов

Ф.И.О. руководителя дипломной работы	Габриенко А.А., к.х.н., с.н.с.
Координаты руководителя дипломной работы	89039027099, gabrienko@catalysis.ru
Тема дипломной работы	Исследование механизмов превращения C2-C4 алканов и алкенов цеолитах модифицированных металлами групп 11-13 с применением методов ЯМР, ИКС и теории функционала плотности (DFT)

Аннотация к дипломной работе:

Цеолиты, модифицированные катионными и оксидными частицами металлов групп 11–13, демонстрируют интересные свойства по селективному превращению C2-C4 углеводородов в ценные ароматические продукты, а также по химической активации метана в относительно мягких условиях. Для дальнейшей разработки катализаторов на основе металл-модифицированных цеолитов необходимы данные о свойствах различных металлсодержащих частиц, а также механизмах превращения углеводородов. Для получения такой информации мы используем современные методы спектроскопии ЯМР высокого разрешения в твердом теле (MAS NMR) и ИК-Фурье спектроскопии, а также проводим квантово-химические расчеты методом теории функционала плотности (DFT).

В нашей группе ведутся активные исследования по изучению механизмов активации и превращения легких (C1-C4) алканов и алкенов на металл-модифицированных цеолитных катализаторах. Мы изучаем цеолиты структурных типов MFI (ZSM-5) и BEA, а в качестве модифицирующих добавок используем катионные и оксидные частицы Zn, In, Ag, Cu, Ga. Нами накоплен большой опыт экспериментальной работы: получение спектров ^1H и ^{13}C углеводородов и

поверхностных интермедиатов на различных цеолитах, кинетических параметров реакций дейтеро-водородного (H/D) обмена алканов с брэнстедовскими кислотными центрами цеолитов, кинетических параметров реакций ароматизации и гидрогенолиза алканов на цеолитах. В настоящий момент имеется возможность применения метода функционала плотности (DFT) для расчета спектральных характеристик (химический сдвиг, частоты колебаний) и стабильности возможных интермедиатов превращения алканов и алкенов на цеолитных катализаторах для уточнения природы экспериментально наблюдаемых углеводородных частиц.

Предлагаемый проект, в рамках дипломной работы, будет включать следующие основные этапы. Охарактеризование цеолитных образцов различными физико-химическими методами. Разработка методологии спектроскопических экспериментов, дизайн и создание специальных систем из стекла, работа с газовой горелкой. Работа с вакуумной техникой и реагентами, содержащими изотопы ^2H , ^{13}C . Работа на спектрометрах ЯМР и ИК, обработка получаемых спектров и их анализ. Расчет химических сдвигов и частот колебаний возможных поверхностных интермедиатов, а также энергетических профилей реакций с их участием с использованием методов DFT. Разработка механизма действия металл-содержащего цеолита с учетом данных об активности разных центров и наблюдаемых интермедиатов превращения.