

Исследование методом функционала плотности механизмов активации и превращения C1-C4 алканов и алкенов на металл-модифицированных цеолитах

В нашей группе ведутся активные исследования по изучению механизмов активации и превращения легких (C1-C4) алканов и алкенов на металл-модифицированных цеолитных катализаторах. Нами накоплен большой объем экспериментальных данных: спектры 1H и 13C углеводородов и поверхностных интермедиатов на различных цеолитах, кинетические параметры реакций дейтеро-водородного (H/D) обмена алканов с брэнстедовскими кислотными центрами цеолитов, кинетические параметры реакций ароматизации и гидрогенолиза алканов на цеолитах. В настоящий момент имеется возможность применения метода функционала плотности (DFT) для расчета химических сдвигов и стабильности возможных интермедиатов превращения алканов и алкенов на цеолитных катализаторах для уточнения природы экспериментально наблюдаемых углеводородных частиц. Пока что остается нерешенным вопрос о механизме реакции H/D обмена алканов на цеолитах, реакции дегидрирования и олигомеризации алканов и алкенов. Все это требует применения метода DFT для уточнения возможных механизмов на основе имеющихся экспериментальных данных. Предлагаемый проект включает в себя разработку методологии расчетов химических сдвигов возможных поверхностных интермедиатов с использованием методов DFT. Помимо расчетов химических сдвигов, в рамках проекта будет проведен расчет энергетических профилей реакций H/D обмена, дегидрирования, олигомеризации по предполагаемым путям превращений.