

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КАТАЛИЗАТОРА VO_x на TiO_2 ДЛЯ ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА

Агафонов А.А.¹, Никитина Н.А.¹, Голосная М.Н.¹, Пичугина Д.А.¹

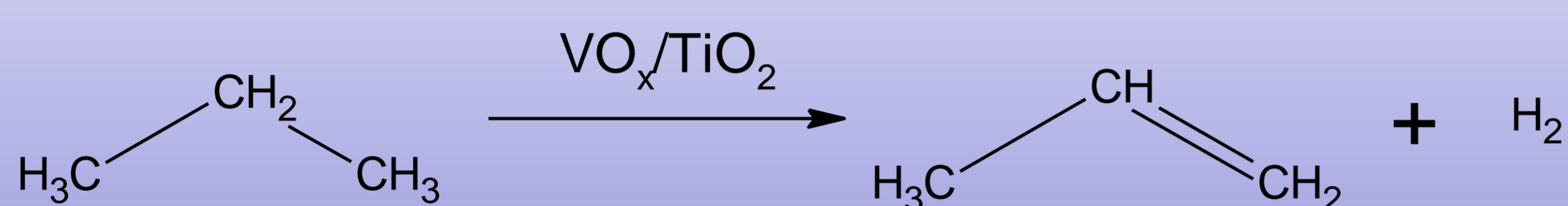
¹ Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

*andrew.a.agafonov@gmail.com



Актуальность работы

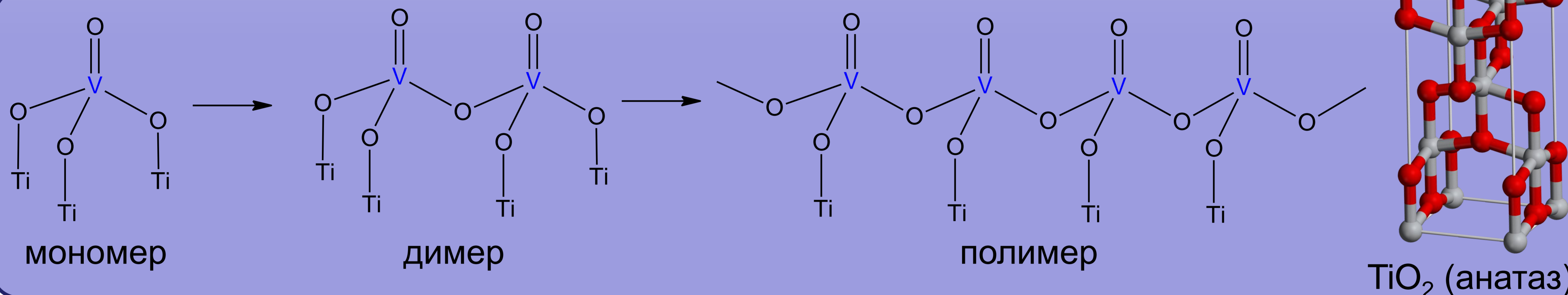
Актуальность изучения механизма каталитического действия оксидных катализаторов в реакции дегидрирования пропана определяется необходимостью создания новых катализаторов, позволяющих организовать экологически чистое производство пропилена. Пропилен является сырьем для полипропилена, потребность которого постоянно растет.



Модель катализатора

Ванадий-содержащие оксидные катализаторы, нанесенные на подложку диоксида титана, являются довольно известными катализаторами процесса дегидрирования пропана.

Подобные системы представляют собой сложную систему, геометрическая и электронная структуры которой сильно зависят от реакционных условий, от условий приготовления катализаторов. VO_x в таких системах может быть связан с TiO_2 (анатаз) в виде мономерных, димерных или полимерных частиц:



Цель работы

Моделирование возможных мономерных, димерных и полимерных частиц VO_x , связанных с модельным фрагментом TiO_2 (анатаз), и определение их энергетических параметров.

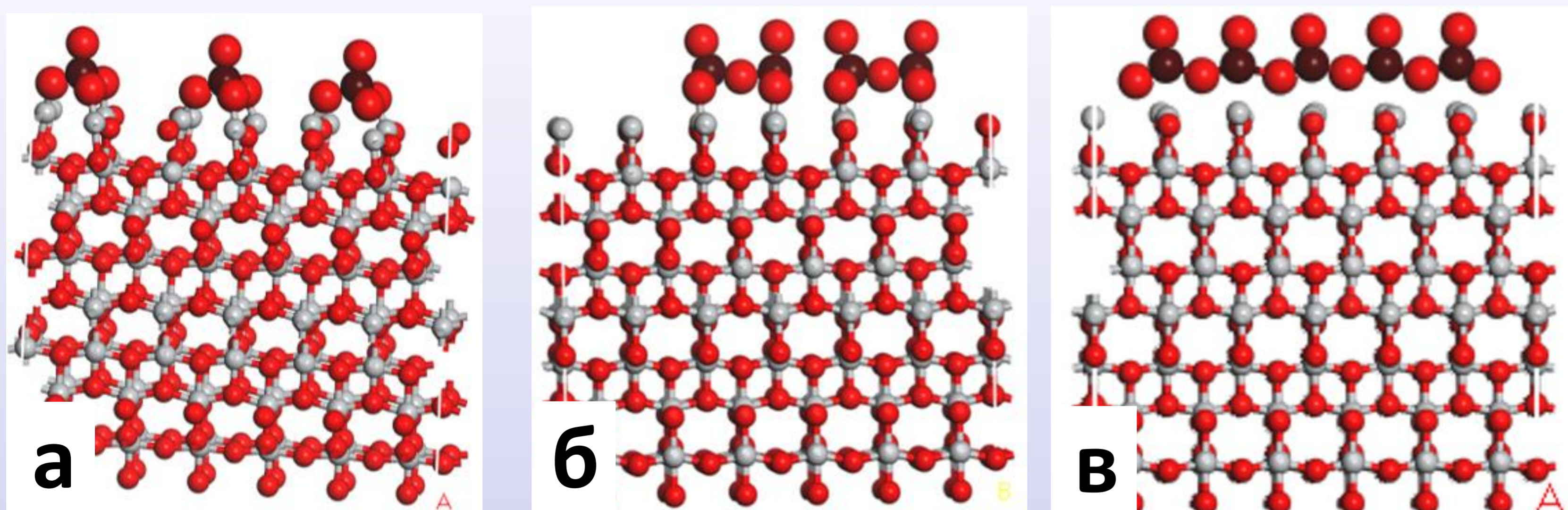
Метод моделирования

Вычисление проводили с использованием программного обеспечения VASP (метод функционала плотности GGA/PBE, базис плоских волн, PAW).

Энергетические параметры системы определяли по формуле:

$$\Delta E = E(VO_x-TiO_2) - E(VO_x) - E(TiO_2)$$

Результаты



Модельные системы изолированных (а), димерных (б) и полимерных (в) VO_x частиц на TiO_2 (анатаз).

Модель	Изолированные частицы	Димерные частицы	Полимерные частицы
Е, кДж	-84	-58	-32

Энергии связей VO_x-TiO_2

Видно, что энергии взаимодействия $V-O(TiO_2)$ уменьшаются в ряду:

Изолированные частицы
↓
Димерные частицы
↓
Полимерные частицы

Так же в данном ряду увеличиваются и длины связей $V-O(TiO_2)$: 1,83 Å (изолированная модель), 1,87 Å (димерная модель), 2,15 Å (полимерная модель).

Данная работа выполнена при поддержке проекта РФФИ, грант № 18-33-00431.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.