

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ ХИМИИ
Кафедра органической и экологической химии

РЕКОМЕНДОВАНО К ЗАЩИТЕ В ГЭК

Заведующий кафедрой к.т.н., доцент

 Г.Н. Шигабаева

 2022 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
магистерская диссертация

РАСЧЁТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РЕАКЦИИ
ОКИСЛИТЕЛЬНОГО ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА НА ЦЕОЛИТАХ
МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ.

04.04.01 Химия

Магистерская программа «Химия нефти и экологическая безопасность»

Выполнила работу
студент 2 курса
очной формы обучения



Филиппов Виталий Григорьевич

Научный руководитель
д.х.н., профессор



Кремлева Татьяна Анатольевна

Рецензент
К.ф.-м.н.



Микова Евгения Андреевна

Оглавление

1. Введение	3
2. Литературный обзор	5
2.1. Цеолиты, общая характеристика	5
2.2. Окислительное дегидрирование пропана	7
2.3. Инструменты квантово-химических расчётов	11
2.4. Теория функциональной плотности	15
3. Экспериментальная часть	18
4. Результаты и обсуждения	26
5. Заключение	32
6. Список литературы	33
Приложение	39

1. Введение

Сегодня пропилен является важным продуктом нефтехимической индустрии с постоянно растущим на него спросом. Современные методы синтеза пропилена в промышленных масштабах предполагают использование процессов парового риформинга и каталитического крекинга, однако в связи с ростом цен на углеводородные энергоносители, использование данных процессов становится все менее выгодным.

Альтернативой традиционным технологическим процессам может стать окислительное дегидрирование пропана, который, например, содержится в большом количестве в сланцевом газе. К сожалению, использование катализаторов, в которых активным компонентом является металл или металлические соединения приводят к образованию побочных продуктов в виде оксидов углерода CO_x . Решением данной проблемы может стать использование цеолитных катализаторов содержащих в качестве активного компонента бор, впервые представленные в работе (Zhou et al., 2021). В нем авторы рассматривают процесс окислительного дегидрирования пропана на борсодержащем цеолитном катализаторе структуры MFI, и предлагают возможный механизм реакции. В то же время возникает необходимость рассмотрения данной реакции на отличных от MFI топологиях цеолитов.

В данной работе представлен расчет термодинамических характеристик реакции окислительного дегидрирования пропана на борсодержащих цеолитах различных топологий.

Целью работы является расчет изменения энергии основного состояния компонентов реакции методом теории функционала плотности с последующим сравнением эффективности различных катализаторов.

Исходя из цели были поставлены следующие задачи:

1. Рассчитать энергию основного состояния борсодержащих цеолитов для топологий BEA, MOR, MFI, и молекул кислорода и пропана;

2. Рассчитать энергию основного состояния для интермедиатов и продуктов реакции;
3. Рассчитать изменение энергии между различными координатами реакции окислительного дегидрирования пропана.
4. Определить влияние различных топологий, содержащих одинаковый реакционный центр на проведение реакции.

Работа изъята автором.