

- 2016/23/B/ST4/02854 [2017-2020] Teoretyczne i doświadczalne badania mechanizmu reakcji utleniającego odwodornienia lekkich alkanów katalizowanej przez hierarchiczne materiały zeolitowe zawierające wanad – dr hab. D. Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN

Głównym celem naukowym projektu jest określenie mechanizmu reakcji utleniającego odwodornienia niższych alkanów (etanu, propanu i izobutanu) dla układów katalitycznych zawierających aktywną fazę wanadową wprowadzoną do matrycy materiałów porowatych. W ramach realizacji założonego celu naukowego zostaną zsyntetyzowane katalizatory heterogeniczne składające się z zeolitu beta i aktywnych centrów wanadowych, o ściśle definiowanej strukturze. Kolejnym etapem prac będzie określenie właściwości fizykochemicznych i katalitycznych otrzymanych katalizatorów, które korelowane będą na bieżąco z wynikami obliczeń kwantowo-mechanicznych. Wymienione powyżej układy katalityczne zostaną kompleksowo zbadane w, ważnej z praktycznego punktu widzenia, reakcji utleniającego odwodornienia (ODH) niższych alkanów do alkenów. Równoległe z realizowanymi badaniami eksperymentalnymi prowadzone będą obliczenia kwantowo-mechaniczne, których celem będzie modelowanie mechanizmu reakcji ODH w zależności od rodzaju zastosowanego alkanu oraz struktury i otoczenia aktywnego centrum wanadowego. Prace badawcze podjęte w ramach tego projektu mają znaczenie zarówno naukowe, jak i aplikacyjne. Zaplanowane dwutorowo (eksperyment plus teoria) badania podstawowe pozwolą na wyjaśnienie roli konkretnych czynników fizykochemicznych (jak metoda syntezy katalizatorów czy struktura i natura centrum aktywnego) oraz parametrów reakcji ODH takich jak temperatura reakcji katalitycznej oraz skład mieszaniny reakcyjnej - co przyczyni się do wzbogacenia wiedzy o katalizie. Opracowanie i wyjaśnienie mechanizmu działania wydajnych i zdefiniowanych katalizatorów heterogenicznych reakcji ODH niższych alkanów daje realną możliwość otrzymywania pożądanych produktów badanej reakcji tj. alkenów w sposób bardziej przyjazny dla środowiska naturalnego i ekonomicznie korzystniejszy od stosowanych obecnie reakcji katalitycznego reformingu i krakingu ropy naftowej.