

Сечение межслоевого пространства, как один из факторов определяющих селективность интеркалированных монтмориллонитов в реакциях олигомеризации

© Давлетшин¹ Артур Раисович, Ипатова¹ Екатерина Александровна, Хамзин^{1*} Юнир Азаматович, Шириязданов¹ Ришат Рифкатович, Вакулин² Иван Валентинович, Пасько^{2*} Павел Александрович и Талипов² Рифкат Фаатович

¹ Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 242-03-70. E-mail: yunirkh@bk.ru

² Башкирский государственный университет. ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 229-97-29. E-mail: talipovrf@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: олигомеризация, монтмориллонит, интеркаляция, энергия адсорбции, молекулярная динамика.

Аннотация

Процесс интеркалирования слоистых силикатов, например, таких как монтмориллонит, путем внедрения в межслоевое пространство полиоксикатионов, образующихся в результате реакции гидролиза катионов является одним из перспективных способов увеличения каталитической активности слоистых силикатов. Действительно, монтмориллонит, характеризующийся в естественном состоянии расширяющейся структурной ячейкой и толщиной силикатного слоя 0.94 нм, недостаточно активен. Однако в процессе интеркалирования происходит увеличение межслоевого пространства вследствие замещения межслоевых катионов на крупные олигомерные катионы и при этом активность монтмориллонита возрастает. Важно отметить, что процесс интеркалирования не приводит к нарушению первичной структуры слоистых силикатов.

Ранее авторами были синтезированы катализаторы олигомеризации на основе гетерополи-кислот, нанесенных на нанокompозитный кислотно-активированный монтмориллонит. В настоящей работе представлены результаты моделирование процессов адсорбции и вычисление энергий осуществлялось с помощью метода молекулярной динамики, реализованного в модуле Adsorption Locator программного пакета Accelrys Material Studio 6.0. Влияние размеров полости на селективность образования изоолефинов C₆-C₁₂ оценивалось по зависимости энергии адсорбции от размеров пор. Расчет структур олигомеров осуществлялся методом квантово-химического моделирования в приближении RM1. По результатам исследования определена оптимальная структурная характеристика (диаметр пор) для гетерогенных пористых материалов с целью интенсификации процесса олигомеризации бутан-бутеновой и пропан-пропеновой фракций с максимальным выходом углеводородов изоолефинов C₆-C₁₂.