**Влияние количества встроенных в структуру атомов Ti на каталитические свойства титансиликалита**

***Давлетшин А.А., Енбаев З.С., Родионова Л.И.***

*Студент, 2 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:alikDavletshin@gmail.com*

Парциальное окисление олефинов с участием титансиликалитов протекает в мягких условиях с водным раствором H2O2 в качестве окислителя при высокой селективности целевых продуктов. Превращение происходит на структурных Ti-центрах, однако до сих пор достоверно не установлен тип активных центров, участвующих в каталитическом превращении. Сотрудниками лаборатории адсорбции и катализа с помощью ИК-спектроскопии адсорбированного дейтерированного ацетонитрила (CD3CN) было обнаружено, что в структуре титансиликалита присутствуют два типа одиночных титановых центров: «открытые» — (SiO)3Ti-OH, и «закрытые» — (SiO)4Ti (Рис. 1), которые предположительно могут проявлять активность в каталитическом окислении олефинов. В связи с этим, установление характера зависимости каталитических свойств титансиликалитов от количества встроенных в структуру атомов Ti позволит позволит разработать методики создания высокоактивных катализаторов.



Рис. 1. Модель «закрытого» (а) и «открытого» (б) Ti-центра

Для выявления зависимости каталитических свойств от количеств встраиваемых атомов Ti была синтезирована серия образцов по методике, описанной в литературе [1] с отношением Si/Ti = 20-200. Для анализа морфологии, структуры и элементного состава всех полученных катализаторов были использованы СЭМ, низкотемпературная адсорбция азота, порошковая рентгеновская дифракция и рентгенофлуоресцентный анализ, соответственно. Качественный и количественный анализ встроенных в структуру атомов Ti проводили с помощью ИК-спектроскопии адсорбированного CD3CN. Для анализа каталитических свойств проводили реакцию парциального окисления олефинов с использованием реактора постоянного объема. Полученная в ходе работы зависимость активности катализатора от количеств встроенного титана имеет нелинейный характер (табл. 1), следовательно, активность одиночных Ti-центров мала. Полученный результат свидетельствует о более сложном механизме окисления, не позволяющий разделять центры только как «закрытого» и «открытого» типа.

Таблица 1. Характеристики синтезированных титансиликалитов

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Образец | Ti(вcтр.) по данным ИКС, мкмоль/г | Эффективность,% | Конверсия,% | Съём продукта, г/г |
| TS-1-20 | 240 | 95 | 34 | 9,3 |
| TS-1-30 | 220 | 83 | 37 | 8,5 |
| TS-1-50 | 210 | 100 | 31 | 7,3 |
| TS-1-100 | 160 | 86 | 12 | 3,4 |
| TS-1-200 | 130 | 65 | 19 | 3,3 |

**Литература**

1. Peregot G. et al. Titanium-Silicalite: a Novel Derivative in the Pentasil Family. 1986.
P. 129–136.