

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра аналитической химии

ЛЕВКОВЕЦ
Анна Михайловна

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
МЕХАНИЗМА КАТАЛИТИЧЕСКОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ
ОКСИДОВ АЗОТА НА ГЕТЕРОПОЛИСОЕДИНЕНИЯХ
ВОЛЬФРАМА

Дипломная работа

Научный руководитель:
Старший преподаватель
Екатерина Георгиевна Рагойжа

Допущена к защите
«___» _____ 2024 г.
Зав. кафедрой аналитической химии,
доктор химических наук
М. Ф. Заяц

Минск, 2024

Аннотация

Работа состоит из 48 страниц, содержит 15 рисунков, 7 таблиц, 40 литературных источников.

Ключевые слова: DFT; процесс SCR; гетерополисоединения вольфрама; адсорбция; квантовохимические расчеты; барьер активации.

Целью данной работы является квантовохимическое исследование механизма каталитического восстановления оксидов азота на модельных частицах $W_2O_7^{2-}$ и $H_2W_2O_7$, а также исследование адсорбции на данных частицах и на гетерополисоединениях вольфрама. В рамках данной работы был подобран метод исследований гетерогенных каталитических процессов с помощью квантовохимических расчетов. Показана возможность получения точных данных о структуре катализатора. Проведен сравнительный анализ энергетики процессов адсорбции и различных стадий механизма для процессов, протекающих без катализатора, на модельных частицах и на вольфрамсодержащих гетерополисоединениях.

Анотація

Работа складається з 48 сторінок, містить 15 малюнків, 7 таблиц, 40 літературних джерел.

Ключові слова: DFT; процес SCR; гетерополісоединення вольфраму; адсорбція; квантовохімічні розрахунки; бар'єр активації.

Метою даної роботи є квантовохімічне дослідження механізму каталітичного адсорбції оксидів азоту на модельних частинках $W_2O_7^{2-}$ і $H_2W_2O_7$, а також дослідження адсорбції на даних частинках і на гетерополісоединеннях вольфраму. У рамках даної роботи було обрано метод дослідження гетерогенних каталітичних процесів з допомогою квантовохімічних розрахунків. Показано можливість отримання точних даних про структуру катализатора. Проведено порівняльний аналіз енергетики процесів адсорбції і різних стадій механізму для процесів, які проходять без катализатора, на модельних частинках і на вольфрамсодержащих гетерополісоединеннях.

Annotation

Work consists of 48 pages, contains 15 figures, 7 tables, 40 references.

Keywords: DFT; SCR process; tungsten heteropolycompounds; adsorption; quantum-chemical calculations; activation barrier.

The aim of this work is a quantum-chemical study of the mechanism of nitrogen oxides catalytic reduction on model particles $W_2O_7^{2-}$ and $H_2W_2O_7$, as well as the study of adsorption processes on these particles and on tungsten heteropolycompounds. In this work a calculational method for studies of heterogeneous catalytic processes in terms of quantum chemistry was selected. The possibility of obtaining accurate data on the structure of the catalyst was shown. A comparative analysis was conducted on the energetics of adsorption processes and various stages of the mechanism for processes without a catalyst, considering both model particles and tungsten-containing heteropoly compounds