

## МЕХАНИЗМ ДЕЙСТВИЯ НАНОРАЗМЕРНОГО КАТАЛИЗАТОРА ПРИ ГИДРОКОНВЕРСИИ ТЯЖЕЛОГО СЫРЬЯ

Кадиев Х.М., Гюльмалиев А.М., Кадиева М.Х

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН  
119991, ГПС-1, Москва, Ленинский проспект, дом 29  
e-mail: kadiev@ips.ac.ru*

В докладе обсуждаются результаты квантово-химического моделирования взаимодействия молекулы водорода с наноразмерными кластерами катализатора ( $\text{Mo}_2\text{S}_4$  и  $\text{Mo}_3\text{S}_6$ ) в условиях гидроконверсии. Показано, что первоначально происходит хемосорбция водорода на атоме Mo с разрывом H–H связи. Миграцию H-атомов на поверхности кластеров исследовали по профилю поверхности потенциальной энергии реакций перехода H от комплекса  $[\text{Mo}\dots\text{H}_2]$  на поверхности кластера. С увеличением размера кластера перемещение атомов H на атомы S энергетически более выгодно, чем локализация их на атомах Mo. По энергетической устойчивости комплексы  $[\text{Mo}_3\text{S}_6\dots\text{H}_2]$  образуют ряд:  $[\text{MoH}_2] > [\text{SH}\dots\text{SH}] > [\text{MoH}\dots\text{SH}] > [\text{MoH}\dots\text{MoH}]$ , и каждый из них может выступать в качестве гидрирующего центра в процессе гидроконверсии.

Одновременная активация водорода и ароматических компонентов сырья исследована на примере катализатора  $\text{MoS}_2$  и промотированного никелем  $\text{MoS}_2$  (наноразмерные частицы с различным содержанием элементов Mo, Ni и S). Для оценки относительной активности катализатора использовали энтальпию реакции образования комплексов ( $\Delta H_k$ ) и энтальпию дестабилизации адсорбированных молекул, участвующих в комплексообразовании с катализатором ( $\Delta H_d$ ). Сопоставление значений  $\Delta H_k$  и  $\Delta H_d$  для случаев адсорбции на кластерах молекул водорода и бензола показало, что при адсорбции на атомах Mo, по сравнению с Ni, связь H–H больше ослаблена и близка к разрыву, т.е. Mo эффективнее активирует молекулу водорода, а бензольное кольцо при локализации на атоме Ni намного более дестабилизировано, чем в случае атома Mo.

Таким образом, основную роль при гидроконверсии в активации водорода играют Mo-содержащие активные центры катализатора, а в реакции гидрирования ароматических структур и их деструктивной гидрогенизации – Ni-содержащие центры.

### Литература

1. Кадиев Х.М., Гюльмалиев А.М., Кадиева М.Х., Хаджиев С.Н. Нефтехимия, 2018, Т.58, №4, 430–437.
2. Кадиев Х.М., Гюльмалиев А.М., Кадиева М.Х., Хаджиев С.Н. Нефтехимия, 2018, Т.58, №4, 422–429.

*Работа выполнена в рамках Государственного задания ИИХС РАН.*