

ТЕКСТУРА КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕКОГО ПОЛИМЕРА MIL-101

М.С. Мельгунов^а, К.А. Коваленко^б

^а*Институт катализа СО РАН, Новосибирск*

^б*Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск*

Металл-органические координационные полимеры (МОП) – новый класс пористых материалов, имеющих ближний и дальний кристаллический порядки, характерные для неорганических цеолитов. Строение МОП задают катионы металлов в тетраэдрическом кислородном окружении, соединенные между собой органическими молекулами – линкерами. Большое число возможных комбинаций металлов и линкеров задают многообразие структур МОП, среди которых для катализа особый интерес представляет мезопористый MIL-101. MIL-101 характеризуется наличием двух типов полостей диаметром 2.9 и 3.4 нм, соответственно, соединенных окнами, размером 1.2 и 1.6 нм, соответственно. Этот материал имеет достаточно высокую стабильность, не разрушаясь на воздухе до ~ 600 К и в разбавленных растворах пероксида водорода до ~ 320 К.

Начиная с первых публикаций по MIL-101 возникло представление о том, что этот материал имеет удельную поверхность до 6000 м²/г, связанное с ошибочной интерпретацией адсорбционных данных. Реальная удельная поверхность этого материала около 2200 м²/г. Размеру малых полостей 2.9 нм соответствует капиллярная конденсация в диапазоне $0.1 < P/P_0 < 0.2$, и адсорбция именно в этом диапазоне традиционно используется для расчета удельной поверхности методом БЭТ. В докладе обсуждаются подходы к исследованию текстуры MIL-101 и подобных материалов. В частности показано, что сравнительный метод позволяет проводить оценку удельной поверхности как малых, так и больших полостей, а распределения пор по размерам достаточно адекватно описываются методом Сайто-Фолли, а так же методами на основе теории функционала плотности, несмотря на то, что пока отсутствуют корневые функции, соответствующие МОП.

Кроме того, в докладе обсуждается влияние на текстуру MIL-101 введение полиоксометаллатов и фталоцианина.