

Badania zawarte w projekcie wpisują się w nurt poszukiwań nowego, heterogenicznego katalizatora, aktywnego i selektywnego w jednoetapowej syntezie tlenku propylenu (PO). Ogromne zainteresowanie powyższym procesem wynika z konieczności modyfikacji obecnie stosowanych sposobów wytwarzania tlenku propylenu, jednego z najważniejszych materiałów wyjściowych w przemyśle chemicznym. Tlenek propylenu jest szeroko stosowany w przemyśle do wytwarzania glikolu propylenowego, poliuretanów, polieterów oraz innych związków. Światowa roczna produkcja PO wynosi około 7,5 mln ton.

Tlenek propenu obecnie wytwarzany jest z wykorzystaniem dwóch różnych typów procesów: procesu chlorhydrynowego i procesu z wykorzystaniem wodoronadtlenków jako utleniaczy. Ze względów środowiskowych nowe fabryki zajmujące się produkcją tlenku propylenu bazują głównie na metodzie opartej o wykorzystanie wodoronadtlenków. Niewątpliwą wadą tego procesu jest wytwarzanie znaczących ilości produktu ubocznego (alkoholu terbutylowego lub styrenu, w zależności od rodzaju użytego wodoronadtlenku), który kilkakrotnie przekracza objętość wytwarzanego tlenku propylenu. Stąd też, opłacalność metody opartej na wykorzystaniu wodoronadtlenków w znacznym stopniu zależy od możliwości zagospodarowania powstającego produktu ubocznego. W związku z tym wysiłki badaczy koncentrują się nad opracowaniem alternatywnych metod jednoetapowego przetwarzania propenu do tlenku propylenu. Celem prowadzonych badań jest opracowanie sposobu bezpośredniego utleniania propenu w fazie gazowej, podobnego do bezpośredniego epoksydowania etenu. Jednakże, wydajność tlenku propylenu na dotychczas opracowanych katalizatorach w reakcji bezpośredniego epoksydowania propylenu, z zastosowaniem tlenu lub powietrza jako utleniacza jest zbyt niska, aby stanowić alternatywę dla obecnie stosowanych przemysłowych metod produkcji PO.

Nasze ostatnie badania wykazały, że jony wanadu osadzone na nośnikach krzemionkowych wykazują znaczącą aktywność w procesie epoksydacji propenu za pomocą  $N_2O$  jako utleniacza. Jeszcze większe znaczenie miało odkrycie, że nie tylko propylen, ale również propan może stanowić surowiec w jednoetapowej syntezie tlenku propylenu. Wykorzystanie propanu do produkcji PO jest o tyle ważne, że pozwoliłoby na wyeliminowanie kosztownego etapu przetwarzania propanu do propylenu. Odkrycia te zachęciły nas do rozwinięcia badań nad opracowaniem układu katalitycznego aktywnego w procesie epoksydacji propanu i propenu.

W projekcie zaplanowane są badania dotyczące modyfikacji katalizatorów wanadowych, przygotowanych na bazie krzemionkowych matryc mezoporowatych, w celu otrzymania aktywnych i stabilnych katalizatorów procesu epoksydacji propanu i propenu podtlenkiem azotu ( $N_2O$ ). Jako modyfikatory planujemy zastosować jony metali alkalicznych (Na, K, Rb i Cs) w celu obniżenia kwasowości katalizatorów, jako że centra kwasowe odpowiedzialne są w znacznej mierze za izomeryzację tlenku propylenu, a co za tym idzie, niską wydajność PO. Oprócz jonów metali alkalicznych, planujemy również wprowadzenie jonów innych metali (Fe, Mo i Sb), które wskazywane są w literaturze, jako aktywne składniki katalizatorów wanadowych stosowanych w reakcjach utleniania. Sądzimy, że przeprowadzone modyfikacje zwiększą efektywność katalizatorów i pozwolą uzyskać znaczący wzrost wydajności tlenku propylenu.

Nasze wstępne badania potwierdzają możliwość bezpośredniego przetwarzania propanu do tlenku propylenu, jednak z uwagi na redukcję jonów wanadu w trakcie reakcji następuje szybki spadek konwersji propanu, co dyskwalifikuje ten układ katalityczny do zastosowania w przemyśle. W celu obniżenia spadku konwersji propanu, w projekcie zaplanowane są badania z wykorzystaniem mieszaniny utleniaczy ( $N_2O$  i  $O_2$ ) zamiast samego  $N_2O$ . Badania na katalizatorach wanadowych w procesie utleniającego odwodornienia lekkich parafin wykazały bowiem, że w obecności tlenu następuje szybsze reutlenienie jonów wanadu. Innym kierunkiem, mającym na celu ułatwienie procesu reutlenienia jonów wanadu, będzie modyfikacja katalizatorów wanadowych grupami siarczanowymi, co również wskazywane było w literaturze.

Otrzymane katalizatory poddane zostaną wszechstronnej charakterystyce metodami fizykochemicznymi. Wszystkie katalizatory będą badane w jednoetapowej reakcji utleniania propanu i propenu prowadzonej pod ciśnieniem atmosferycznym. Reakcja prowadzona będzie w różnych temperaturach (w zakresie od 623K - 703K), przy użyciu czystego  $N_2O$ , lub mieszaniny  $N_2O/O_2$  jako utleniaczy. Oczekujemy, że uda się opracowanie aktywnego i stabilnego katalizatora jednoetapowej epoksydacji propanu i propenu, będącej alternatywą dla obecnie stosowanych komercyjnych metod produkcji tlenku propylenu.