

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
Кафедра «Химическая технология переработки нефти и газа»
Лаборатория «Перспективные технологии переработки возобновляемого
органического сырья и аккумуляирования водорода»

**ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНЫЙ СИМПОЗИУМ-ШКОЛА С
МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ**

**«СОВРЕМЕННЫЕ ВЫЗОВЫ, СТОЯЩИЕ ПЕРЕД ХИМИЕЙ,
НЕФТЕХИМИЕЙ И НЕФТЕПЕРЕРАБОТКОЙ»**

САМАРА
26-27 сентября 2019

ПРОГРАММА

26 сентября

9-50 10-00	Открытие симпозиума
10-00 11-00	 <p>Веревкин Сергей Петрович PhD. Prof., Department of Physical Chemistry, University Rostock, Germany</p> <p>« Liquid Organic Hydrogen Carriers: an upcoming alternative to conventional technologies. Thermochemical studies »</p> <p><i>Аннотация:</i> Organic heteroaromatics as liquid hydrogen storage has been considered as an auspicious alternative to conventional technologies. Due to the very low density of H₂, practical storage and recovery of H₂ has been a challenge in utilizing H₂ as an alternative fuel. An auspicious alternative to conventional approach to hydrogen storage for fuel-cell vehicles is to use organic compounds that have a high capacity to bind hydrogen covalently. Storage and release of the hydrogen is achieved by hydrogenation and dehydrogenation of the organic compounds, and these reactions are done in the presence of a catalyst. For transportation applications, the H₂ storage (hydrogenation) would be done off-board the vehicle. A system based on the catalytic hydrogenation/dehydrogenation reactions of N-substituted aromatics are the most promising as the new class of the liquid organic hydrogen carriers (LOHC). Enthalpies of formation of the different LOHC as well as their fully hydrogenated derivatives were measured by using combustion calorimetry. Vaporization enthalpies for these compounds were derived from vapour pressure temperature dependence measured by transpiration. Enthalpies of formation of the gaseous LOHC were derived and validated with the high-level quantum chemical calculation. Vapor pressures of the liquid LOHC at practically relevant temperature 400 K were assessed from the new experimental data. It has turned out that these vapor pressures were low enough to fulfill the basic requirement for an LOHC. A challenging part of the project has been thermodynamic analysis and selection of liquid organic heteroaromatics for hydrogen storage as an auspicious alternative to conventional technologies.</p>
11-00 11-40	 <p>Жерикова Ксения Васильевна к.х.н., старший научный сотрудник лаборатории химии летучих координационных и металлоорганических соединений, Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, г. Новосибирск</p> <p>«Химическое газофазное осаждение – «умный» метод больших возможностей»</p> <p><i>Аннотация:</i> Химическое осаждение из газовой фазы (ХОГФ), химическое газофазное осаждение, или в зарубежной терминологии Chemical Vapor Deposition (CVD) – процесс, используемый для получения высокочистых твёрдых материалов. Сейчас ХОГФ является одной из базовых технологий современной микро- и нанoeлектроники, преимущественно полупроводниковой и оптической. Однако, метод продолжает развиваться, и его активно изучают с целью замены существующих технологий для получения функциональных покрытий с улучшенными свойствами. В докладе будут рассмотрены основы метода ХОГФ и его разновидности МОСVD – процесса, использующего элементарноорганические и координационные соединения в качестве предшественников получаемых материалов. Будут обсуждаться возможности метода МОСVD на практических примерах получения керамических слоев и металлических пленок и перспективы его развития.</p>
11-40 12-00	Кофе-брейк
12-00 12-40	 <p>Гаркушин Иван Кириллович д.х.н., профессор, заведующий кафедрой «Общая и неорганическая химия» ФГБОУ ВО «СамГТУ»</p> <p>«Аккумуляция тепла»</p>

	<p><i>Аннотация:</i> В докладе будут рассмотрены следующие вопросы:</p> <ul style="list-style-type: none"> - аккумуляция энергии ветра, солнечной энергии, энергии приливов и отливов; - аккумуляция тепла в системах теплоснабжения и терморегулирования; - теплоаккумулирующие материалы.
12-40 13-00	 <p>Портнова Светлана Валерьевна к.х.н., доцент кафедры «Технология органического и нефтехимического синтеза» ФГБОУ ВО «СамГТУ», г. Самара</p> <p>«Исследование термодинамических характеристик сорбции и испарения соединений, получаемых на основе возобновляемого природного сырья - сложных эфиров гидроксикарбоновых кислот»</p> <p><i>Аннотация:</i> Создание новых энергоэффективных и ресурсосберегающих технологий - актуальная тенденция развития современной химической промышленности. Одним из направлений развития в данной области является поиск новых веществ и материалов на основе возобновляемых природных источников. Значительное количество современных исследований посвящено вопросам получения гидроксикарбоновых кислот, содержащих одну или две карбоксильные группы, из природных источников с помощью биотехнологий. Особый интерес к данным кислотам обусловлен возможностью получения на их основе биоразлагаемых полимеров для медицины и пищевой промышленности.</p> <p>Интересными объектами для изучения являются сложные эфиры, используемые в технологии выделения и очистки, соответствующих гидроксикарбоновых кислот. В работе рассматриваются результаты систематического изучения термодинамических характеристик сорбции, испарения, теплоемкость жидкости сложных эфиров гидроксикарбоновых кислот, содержащих одну или две карбоксильные группы (гликолевая, молочная, яблочная) и спиртов C₁-C₅ нормального строения.</p>
13-00 14-00	Обед
14-00 14-40	 <p>Буланова Анжела Владимировна д.х.н., профессор кафедры «Физическая химия и хроматография» ФГАОУ ВО "Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева", г. Самара</p> <p>«Адсорбенты и катализаторы гидрирования на основе мезопористых структурированных материалов, допированных диспрозием и модифицированных атомами некоторых переходных металлов»</p> <p><i>Аннотация:</i> Рассмотрена методика синтеза мезоструктурированных материалов (МСМ), обеспечивающая оптимальные параметры поверхности при использовании их в качестве адсорбентов и носителей для катализаторов. Оценены адсорбционные и каталитические свойства МСМ, допированных диспрозием и модифицированных атомами переходных металлов, в реакциях гидрирования бензола и его производных</p>
14-40	Доклады молодежной секции.
16-20	<i>Продолжительность доклада до 15 мин. +5 мин. вопросы</i>
16-20 18-00	<i>Свободное время+ Ужин</i>
18-00	Культурная программа

27 сентября

10-00 10-40	 <p>Александр Евгений Викторович к.х.н., с.н.с., заведующий лабораторией синтеза новых кристаллических материалов, Международный научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению ФГБОУ ВО «СамГТУ», г. Самара</p> <p>«Топологический дизайн микропористых материалов для сорбционных технологий очистки и разделения жидкостей и газов»</p> <p><i>Аннотация:</i> Дизайн таких современных микропористых материалов как цеолиты и металл-органические каркасы опирается на геометрико-топологические правила сборки строительных блоков в периодические структуры. Мы разрабатываем методы и программное обеспечение для поиска таких правил и фундаментальных закономерностей, связывающих кристаллическое строение материалов с их свойствами.^{1,2} Например, с использованием выявленных правил и закономерностей удалось осуществить синтез высокостабильных микропористых цирконий-органических каркасов для энергоэффективного разделения изомеров C₆H₁₄ углеводородов.³ Разработаны новые сшитые ковалентные органические каркасные материалы для улавливания иода с эффектом набухания более чем в 4 раза.⁴ Синтезированы и исследованы новые микропористые само-переплетающиеся координационные полимеры для селективного улавливания дихромат анионов и катионов редкоземельных металлов.⁵</p> <p>Литература 1. Blatov V.A., Alexandrov E.V., Shevchenko A.P. Topology: ToposPro in Comprehensive Coordination Chemistry III, 2019, Elsevier. Принята к печати, doi: 10.1016/B978-0-12-409547-2.14576-7. 2. Alexandrov E.V., Shevchenko A.P., Blatov V.A. Topological databases: why do we need them for design of coordination polymers? Cryst. Growth Des., 2019, Принята к печати, doi: 10.1021/acs.cgd.8b01721. 3. Wang H., Dong X., Lin J., Teat S.J., Jensen S., Cure J., Alexandrov E.V., Xia Q., Tan K., Wang Q., Olson D.H., Proserpio D.M., Chabal Y.J., Thonhauser T., Sun J., Han Y., Li J. Nature Comm., 2018, 9, 1745. 4. Jiang X., Cui X., Duncan A. J. E., Li L., Hughes R. P., Staples R. J., Wu Y., Proserpio D. M., Alexandrov E. V., Ke C. Topochemical Synthesis of Single-Crystalline Hydrogen-bonded Crosslinked Organic Frameworks and Their Guest-induced Elastic Expansion. J. Am. Chem. Soc. 2019. 141. 10915-10923. 5. Guo M., Wang F., Ma R., Guo X., Sun S., Sun Y., Liu S., Guo H., Alexandrov E. V. Two novel self-catenated metal-organic frameworks with large accessible channels obtained by mixed-ligand strategy: adsorption of dichromate and Ln³⁺-post synthetic modification. Cryst. Growth Des., 2019, 199, 5267-5274.</p>
10-40 11-20	 <p>Иванов Иван Леонидович к.х.н., научный сотрудник кафедры физической и неорганической химии, отдел химического материаловедения, ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург</p> <p>«Физико-химические свойства перовскитоподобных соединений»</p> <p><i>Аннотация:</i> Исследования кристаллической и дефектной структуры, электропроводящих, термодинамических свойств перовскитоподобных сложных оксидов и галогенидов. Моделирование дефектной структуры и связанных свойств: анионная и катионная нестехиометрия, кислород-ионная, электронная, протонная электропроводности, коэффициент Зеебека, термическое и химическое расширение.</p>
11-20 11-40	<p>Кофе-брейк</p>
11-40 12-00	 <p>Максимов Николай Михайлович к.х.н., доцент кафедры «Химическая технология переработки нефти и газа» ФГБОУ ВО «СамГТУ», г. Самара</p> <p>«Четырехкомпонентные катализаторы NiMoW/P-Al₂O₃ с различными мольными соотношениями Mo:W и содержанием P₂O₅: влияние состава и морфологии активной фазы на каталитические свойства»</p>

	<p>Проведены синтезы и исследования четырехкомпонентных катализаторов NiMoW/P-Al₂O₃ с различными мольными соотношениями Mo:W и содержанием P₂O₅. Изучены их каталитические свойства в реакциях модельных соединений (дибензотиофен, нафталин, хинолин) и на нефтяных фракциях в широком диапазоне технологических параметров. Выявлены особенности ингибирования реакций гидродесульфуризации при различных температурах. Проведено исследование синтезированных катализаторов методами ПЭМ ВР и РФЭС. Сделаны выводы о взаимосвязях «состав-структура-свойство» для исследованных систем</p>
12-00 12-30	 <p>Нагриманов Руслан Наильевич к.х.н., научный сотрудник НИЛ сверхбыстрой калориметрии, Казанский федеральный университет, г. Казань</p> <p>«Solvation enthalpy and how it can be useful»</p> <p><i>Аннотация:</i> In this work, additive scheme of estimation of solvation enthalpy for saturated and unsaturated aliphatic hydrocarbons, alcohols, ketones, aldehydes and nitriles in <i>n</i>-heptane was developed. Structural fragments for hydrocarbon group contributions and functional groups (-OH, >C=O and -C(=O)-H) are independent of the nature of neighbouring atoms. In most cases absolute deviations between experimental and estimated solvation enthalpies for saturated and unsaturated aliphatic hydrocarbons, alcohols, ketones, aldehydes, and nitriles in <i>n</i>-heptane do not exceed 1–2 kJ·mol⁻¹.</p>
13-00 14-00	<p>Обед</p>
14-00 14-40	 <p>Мebel Александр Моисеевич к.х.н., главный научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории «Физика и химия горения» ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», г. Самара</p> <p>«Механизмы образования полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) и сажи в горении»</p> <p><i>Аннотация:</i> В презентации будут рассмотрены результаты квантово-химических расчетов поверхностей потенциальной энергии в сочетании с расчетами констант скоростей реакций методом РРKM-Кинетического Уравнения, проведенными с целью раскрытия механизмов реакций роста полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) при температурах и давлениях, присущих пламенам горения, а также богатым углеродом околозвездным и межзвездным средам. Мы опишем наши недавние работы, направленные на разработку всеобъемлющего механизма роста ПАУ, и рассмотрим возможные пути образования ПАУ с тремя и четырьмя кольцами, а также механизмы отрыв водорода - добавление ацетилена (НАСА) и отрыв водорода - добавление винилацетилена (НАВА) для роста более крупных ПАУ. Результаты расчетов будут сопоставлены с экспериментальными данными групп Р. Кайзера (Гавайский университет в Маноа) и М. Ахмеда (Национальная лаборатория им. Лоуренса Беркли), использующих пиролитический химический реактор с идентификацией продуктов с помощью фотоионизационной масс-спектрометрии с использованием квазинепрерывного перестраиваемого вакуумного ультрафиолетового света от синхротрона в LBNL. Будет обсуждаться взаимодополняющий характер механизмов НАСА и НАВА и их роль в создании двумерных наноструктур графенового типа и трехмерных углеродистых наноструктур, включающих звенья коранулена, содержащие пятичленные кольца. Кроме того, мы рассмотрим и обсудим возможные механизмы возникновения частиц углерода (сажи) посредством химической димеризации молекул ПАУ.</p>
14-40 16-00	<p>Доклады молодежной секции. <i>Продолжительность доклада до 15 мин. + 5 мин. вопросы</i></p>
16-00 18-00	<p><i>Свободное время</i></p>
18-00	<p>Культурная программа</p>

