

Наименование института: **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт катализа им. Г.К.Борескова Сибирского отделения Российской академии
наук**

(ИК СО РАН)

**Отчет по дополнительной референтной группе 16 Химические технологии, включая
нефтехимию**

Дата формирования отчета: **22.05.2017**

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА НАУЧНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Инфраструктура научной организации

- 1. Профиль деятельности согласно перечню, утвержденному протоколом заседания Межведомственной комиссии по оценке результативности деятельности научных организаций, выполняющих научно-исследовательские, опытно-конструкторские и технологические работы гражданского назначения от 19 января 2016 г. № ДЛ-2/14пр**

«Генерация знаний». Организация преимущественно ориентирована на получение новых знаний. Характеризуется высоким уровнем публикационной активности, в т.ч. в ведущих мировых журналах. Исследования и разработки, связанные с получением прикладных результатов и их практическим применением, занимают незначительную часть, что отражается в относительно невысоких показателях по созданию РИД и небольших объемах доходов от оказания научно-технических услуг. (1)

2. Информация о структурных подразделениях научной организации

1. НАУЧНЫЕ ПОДРАЗДЕЛЕНИЯ

1. ОТДЕЛ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ ИНСТИТУТА

Группа форсайта в катализе

Группа перспективных разработок

Консультационный сектор

2. ОТДЕЛ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ

Лаборатория структурных методов исследования

Лаборатория исследования процессов в средах повышенной плотности

Аналитическая лаборатория

Лаборатория спектральных методов

Лаборатория квантовой химии

Лаборатория исследования механизмов каталитических реакций

Лаборатория исследования текстуры катализаторов

Группа твердотельной ЯМР спектроскопии



057591

Группа ЯМР спектроскопии каталитических превращений углеводородов

3. ОТДЕЛ НЕТРАДИЦИОННЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Лаборатория каталитических методов преобразования солнечной энергии

Группа фотокатализа

Группа темплатного синтеза

Группа вихревых процессов и аппаратов

Группа аэрозольного катализа

Лаборатория исследования гидридных соединений

Группа адсорбционно-каталитических процессов для топливных элементов

4. ОТДЕЛ ГЕТЕРОГЕННОГО КАТАЛИЗА

Лаборатория приготовления катализаторов

Лаборатория гетерогенного селективного окисления

Лаборатория исследования поверхности

Лаборатория окислительного катализа на цеолитах

Лаборатория катализаторов глубокого окисления

Лаборатория экологического катализа

Группа исследования нанесенных металл-оксидных катализаторов

Группа каталитических превращений оксидов углерода

Лаборатория каталитических процессов в топливных элементах

5. ОТДЕЛ ТЕХНОЛОГИИ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Лаборатория каталитической полимеризации

Лаборатория каталитических превращений углеводородов

Группа высокотемпературных каталитических процессов

Группа каталитических методов получения и применения синтез-газа

Лаборатория нестационарных каталитических методов очистки газов

Группа гидрогенизационных процессов

Группа комплексных технологических проектов

6. ОТДЕЛ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Группа энергоаккумулирующих процессов и материалов

Лаборатория исследования наноструктурированных катализаторов и сорбентов

Лаборатория наноструктурированных углеродных материалов

Лаборатория исследования и испытания новых материалов в катализе

7. ОТДЕЛ ТОНКОГО ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА И ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ ЭНЕРГИИ

Группа катализаторов и процессов на основе гетерополикислот

Рабочая группа ФПИ

Группа гетерогенных катализаторов селективного жидкофазного окисления

Группа катализаторов на углеродных носителях

Группа процессов и технологий малотоннажного синтеза



Лаборатория каталитических процессов переработки возобновляемого сырья

Лаборатория каталитических процессов синтеза элементо-органических соединений

Лаборатория каталитического жидкофазного синтеза органических соединений

Лаборатория катализаторов и носителей для высокотемпературных процессов

II. ОПЫТНО-ПРОИЗВОДСТВЕННЫЕ ПОДРАЗДЕЛЕНИЯ

Научно-технологический отдел прикладного катализа (НТО ПК), в составе:

Группа обеспечения в составе НТО ПК

Группа приготовления катализаторов в составе НТО ПК

Группа испытания катализаторов в составе НТО ПК

Группа пилотных установок и высокого давления в составе НТО ПК

Группа стандартизации и метрологии в составе НТО ПК

III. НЕНАУЧНЫЕ ПОДРАЗДЕЛЕНИЯ (сведения не приводятся)

3. Научно-исследовательская инфраструктура

Основное научное оборудование, доступное внутри Института для сотрудников различных научных подразделений:

1. Дифрактометр D8 Advance New производства Bruker, включающий блоки, обеспечивающие параллельную геометрию пучка

2. Дифрактометр порошковый EXTRA производства Termo с энергодисперсионным детектором

3. Рентгеновский дифрактометр ARL-XTRA-123 производства Bruker с энергодисперсионным детектором

4. Микроскоп электронный просвечивающий JEM-2010 производства Jeol с увеличением до 1500 000 крат, ускоряющим напряжением – 200 кВ, разрешающей способностью – 0,14 нм

5. Микроскоп растровый электронный JSM-6460LV производства Jeol с возможностью увеличения 10 – 300 000 крат, разрешением – 3 нм

6. Сканирующий туннельный микроскоп UHV-7000VT производства RHK с системой предварительной подготовки образцов, позволяющей проводить ионное травление поверхности и нагрев образца до 1000 К

7. Микроскоп (оптический) SteviSV-11 производства Carl Zeiss

8. EXAFS-Спектрометр на базе накопителя электронов ВЭПП-3 (Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения)

9. Спектрометр фотоэлектронный SPECS mod. SH-110, укомплектованный источниками монохроматизированного излучения AlK α (1486,6 эВ) и Ag L, (2983.6 эВ)

10. Фотоэлектронный спектрометр высокого давления ESCALAB HP производства Vacuum Generators для проведения исследований в режиме in-situ

11. Спектральный комплекс PM IRRAS производства SPECS



12. ЯМР-Спектрометр Avance-400 производства Bruker с набором датчиков для много-элементной ЯМР спектроскопии твердого тела, в том числе широкополосным датчиком с диапазоном частот от 105Pd (18.3 МГц) до 31P (161.9 МГц).

13. ЯМР-Спектрометр Avance-400/микротомограф (сверхэкранированный магнит 9.4 Т) производства Bruker с набором датчиков, в том числе специально изготовленным высокотемпературным (до 600°C)

14. Спектрометр электронного парамагнитного резонанса ELEXSYS - Series E-500 производства Bruker

15. Рентгенофлуорисцентный спектрометр ADPX-2247 производства Thermo Electron S.A. с чувствительностью от 0.1% до 10 – 5% вес.

16. Дериватограф STA-449/C/4G производства Netzsch с диапазоном температур от комнатной до 1600°C, оснащенный чувствительными весами с разрешением до 0.001 мг

17. Хемосорбционный анализатор AutoChem II Chemisorption Analyzer производства Micromeritics

18. Анализатор частиц Autosorb 6B-KR производства Квантохром с диапазоном давлений 0.001 – 800 торр, диапазоном размеров пор 0.5 – 50 нм

19. Тандемный квадрупольный масс-спектрометр Agilent 8800 с индуктивно-связанной плазмой ICP-QQQ

20. Хромато-масс-спектрометр Saturn 2100D производства Varian чувствительностью при ионизации электронным ударом до 2 пг гексахлорбензола при отношении сигнал/шум не менее 10 по линии 284, с возможности реализации тандемной масс-спектрометрии

21. Хромато-масс-спектрометр Agilent 7000B с масс-анализатором, представляющий собой систему трех квадрупольей с возможностью получения в режиме (MS-MS) спектра дочерних, родительских ионов и нейтральных потерь

22. Жидкостной хромато-масс-спектрометр квадрупольный LCMS-2020 производства Shimadzu, позволяющий разделять сложные системы, содержащие органические соединения

23. Хроматограф ГХ-6890Т производства Agilent с атомно-эмиссионным детектором, селективным к отдельным химическим элементам

24. Хроматограф Agilent 7890 с масс-селективным детектором, оборудованный сверх-прецизионным регулятором давления

25. Гель-проникающий хроматограф Polymerlab 220 с двумя встроенными детекторами: рефрактометром и дифференциальным вискозиметром

26. Высокоэффективный жидкостный хроматограф ProStar 210 производства Varian, укомплектованный колонками для анализа жирных, ароматических и др. кислот и смесей, насосом и автосамплером Узел хроматографии в жидкой фазе Y4200

27. Хроматографический детектор для двухмерного разделения и анализа сложных смесей органических соединений



28. Установка для определения каталитической активности в реакциях нормального, вакуумного и окислительного дегидрирования углеводородов

29. Стенд для испытания катализаторов кипящего слоя для твердых топлив, позволяющий достигать коэффициент полезного использования топлива больше 94%, проводить процесс при темп 500 – 750 С при расходе воздуха близком к стехиометрическим значениям

30. Технологический стенд испытания реакторов позволяет имитировать условия функционирования риформера в топливном процессоре энергоустановки на топливных элементах при проведении экспериментальной отработки, исследований и демонстрационных испытаний

31. Станция рабочая для первичного тестирования электрокатализаторов – потенциостат Eco Chem

32. Установка (co)полимеризации олефинов, включающая 0,7 л реактор с управляемой скоростью перемешивания и контролем расхода газа

33. Лабораторный технологический стенд СТЭЛС-2 для работы с особо чистыми веществами

34. Установка микрогранулирования способом жидкостного формования производства BRACE Gm

ЦКП и УНУ:

1. «Станция EXAFS спектроскопии Сибирского Центра Синхротронного и Терагерцового Излучения», отделение Института катализа СО РАН

2. «Станция Прецизионная дифрактометрия и аномальное рассеяние Сибирского Центра Синхротронного и Терагерцового Излучения», отделение Института катализа СО РАН

3. «ЦКП «Наноструктуры», отделение Института катализа СО РАН

4. Общая площадь опытных полей, закрепленных за учреждением. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства»

Информация не предоставлена

5. Количество длительных стационарных опытов, проведенных организацией за период с 2013 по 2015 год. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства»

Информация не предоставлена

6. Показатели деятельности организаций по хранению и приумножению предметной базы научных исследований

Информация не предоставлена



7. Значение деятельности организации для социально-экономического развития соответствующего региона

1. Институт катализа СО РАН является совместно с ПАО «Газпром нефть» ответственным исполнителем по реализации национального проекта в области ТЭК «Катализаторы глубокой переработки нефтяного сырья», реализуемого на территории Омской области (Генеральное соглашение с АО «Газпромнефть-Омский НПЗ» на 2015-2025 г.г.) в соответствии с решением Межведомственной рабочей группы под председательством Министра энергетики России Новака А.В.

2. Институт катализа СО РАН является стратегическим партнером АО «СКТБ «Катализатор» по выполнению проекта «Реализация технологической инициативы КИТ – катализаторы, инжиниринг, технологии» в рамках программы реиндустриализации Новосибирской области.

3. В рамках реализации концепции «ИНО-Томск» - формирование территории опережающего социально-экономического развития в ЗАТО, г. Северск (Томская область) - Институт катализа СО РАН выполняет проект по созданию в г. Томске завода по производству импортозамещающих катализаторов полимеризации (ООО «Томский завод катализаторов»). Строительство данного завода входит в программу развития «Томского нефтехимического кластера», утвержденного Губернатором Томской области Жвачкиным С.А.

4. В рамках развития катализаторного комплекса в г. Яровое, Алтайского края, на основе научно-технических разработок Института катализа СО РАН создано производство инновационных катализаторов гидроочистки дизельного топлива с годовым объемом производства до 1500 тонн/год. Созданное производство обеспечивает реиндустриализацию выводимых из эксплуатации мощностей оборонного комплекса и создание дополнительных рабочих мест в экономически депрессивном регионе.

8. Стратегическое развитие научной организации

Институт катализа им. Г.К. Борескова находится в постоянном контакте и постоянно развивает связи с ведущими зарубежными центрами, университетами и научно-исследовательскими организациями, которые проводят активные исследования и осуществляют разработки в области катализа, физической химии, нефтехимии, нефтепереработки, материаловедения. Основными формами взаимодействия с зарубежными партнерами являются: межкадаемический обмен, сотрудничество в рамках международных проектов и программ, двустороннее сотрудничество между Институтом и зарубежными научно-исследовательскими организациями в рамках долгосрочных двусторонних соглашений.

Среди зарубежных партнеров, осуществляющих совместные с Институтом катализа или близкие по тематике исследования, можно выделить ряд ведущих организаций, среди которых:



- Институт Фрица-Хабера, Берлин, Германия (Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft):

совместные исследования в области катализа, науки о поверхности, методов *in situ* и *operando* спектроскопии;

- Институт физики Университета Майнца, Германия (Johannes Gutenberg-Universität Mainz)

совместные исследования в области каталитических технологий получения синтез-газа и его конверсии в синтетическое топливо;

- Технический университет Мюнхена, Германия (Technische Universität München)

совместные исследования в области развития и использования физических методов исследования в режимах *in situ* и *operando*, в том числе в сочетании с квантово-химическими расчетами;

- Университет Констанца, Германия (Universität Konstanz):

совместные разработки в области создания катализаторов полимеризации и олигомеризации олефинов;

- Стэнфордский университет, США (Stanford University):

совместные исследования в области прецизионного теоретического моделирования каталитических процессов на поверхности наноразмерных частиц переходных металлов;

- Университет Пёрдью, США (Purdue University):

совместные работы по синтезу и исследованию перспективных гетерогенных катализаторов;

- Институт катализа и каталитических методов защиты окружающей среды (Institut de Recherches sur la Catalyse et l'Environnement de Lyon (IRCELYON), Франция

совместные исследования в области каталитических методов переработки возобновляемого сырья;

- Институт химии твердого тела, г. Бордо (Institut de chimie de la matière condensée de Bordeaux (ICMCB), Франция;

- Лаборатория материалов, исследования поверхности и катализа, Страсбургский Университет (Laboratoire des Matériaux, Surfaces et Procédés pour la Catalyse, University of Strasbourg (LMSPC), Франция:

совместные исследования в области электрокатализаторов и возобновляемых источников энергии.

Лаборатория входит в Российско-Французскую сеть «Каталитическая переработка биомассы» (GDRI “Catalytic conversion of biomass”):

исследования в рамках сети ведутся в области возобновляемых ресурсов для производства топлива, энергии, химических веществ и материалов;

- Институт передовых энергетических технологий Национального совета исследований Италии (Institute for advanced energy technologies "Nicola Giordano"(ITAE/CNR), Мессина, Италия:



совместные исследования в области разработки адсорбентов и катализаторов для нужд энергетики;

- Институт молекулярной науки и технологий (Institute of Molecular Science and Technologies (CNR-ISTM), Милан, Италия

совместные исследования в области гетерогенный катализ для тонкой химии.

- Институт катализа и нефтехимии (Institute of Catalysis and Petrochemistry), Мадрид, Испания:

совместные исследования и разработки в области технологий зеленой химии для переработки углеводородного сырья, в том числе получения биотоплива из возобновляемых источников, технологий производства катализаторов и наночастиц для широкого спектра процессов, синтеза цеолитов, каталитических процессов производства водорода и т. п.;

- Имперский колледж Лондона (Imperial College London), Великобритания:

совместные исследования в области химических и физических характеристик нефтей и отложений, сопряженных термодинамических циклов с использованием катализаторов, моделирование динамики жидкостей и газов, моделировании реакций;

- Центр нанонауки и нанотехнологий (Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM), Мексика:

совместные исследования в области катализа и каталитических технологий для производства топлива, в области тонкого органического синтеза и технологий защиты окружающей среды;

- Национальный центр безопасности производства и здоровья, США (National Institute for Occupational Safety and Health):

совместные исследования в области биологических и каталитических аспектов использования наноматериалов;

- Химический департамент Университета Билкент, Турция (Chemical department of Bilkent University):

совместная разработка катализаторов поглощения/восстановления NO;

- Хэйлунцзянский университет, Китай (Heilongjiang University)

совместные исследования в области синтеза и свойств цеолитов;

- Институт химии природных соединений Вьетнамской академии наук и технологии:

совместные разработки в области очистки природных и сточных вод и использования осадков при производстве коагулянтов, адсорбентов и катализаторов;

- Кенбукский национальный университет, Корея (Kyungpook National University):

конструирование многофункциональных каталитических систем на основе цеолитоподобных материалов и металлорганических каркасов для процессов тонкой химии;

- Институт химии КАН, Китай (Institute of Chemistry)

совместные работы в области исследования проблем полимеризации и олигомеризации олефинов;



- НАН Беларуси, в том числе Институт тепло-и массообмена им. А.В. Лыкова и Институт химии новых материалов НАНБ:

совместные исследования в области нанокompозитных катализаторов для процессов трансформации биотоплив в синтез-газ и водород, Каталитические превращения целлюлозы и лигнина из возобновляемого растительного сырья в ценные химические продукты и углеводороды для моторных топлив, «Разработка стабильных систем хранения и генерации высокочистого водорода на основе орогидрида натрия»;

- Национальный центр каталитических исследований Индии (National Centre for Catalysis Research, ИТ-Madras), Индия:

каталитические процессы для получения ценных химических продуктов и наноструктурированных материалов;

- Национальная Химическая лаборатория, Индия (National Chemical Laboratory, Pune): Каталитические процессы для получения ценных химических продуктов и наноструктурированных материалов;

- Тамилнадский аграрный университет г. Тамил Наду, Индия: разработка процессов переработки лигноцеллюлозной биомассы (в топлива и востребованные химические вещества);

- Институт науки и технологии г. Джорхат, Индия: исследования в области синтеза нанопористых гетерогенных катализаторов реакций селективного окисления.

Кроме того, ИК СО РАН имеет договора о долгосрочном сотрудничестве со следующими российскими компаниями:

1. Генеральное соглашение о сотрудничестве в области технологий и катализаторов процессов нефтепереработки, для обеспечения стратегических направлений развития компании ПАО «Газпром нефть», февраль, 2015 г.

2. Соглашение о сотрудничестве в области нефтехимии с ПАО «Сибур Холдинг», июнь. 2014 г.

Отдельно стоит выделить участие ИК СО РАН в качестве координатора Комплексного плана научных исследований «Ресурсо- и энергоэффективные катализаторы и процессы», организации-исполнители: Институт катализа СО РАН (со-координатор), Институт нефтехимического синтеза РАН (со-координатор), Институт органической химии РАН, Институт проблем химической физики РАН, Институт органической и физической химии РАН, Институт нефтехимии и катализа РАН, Институт проблем переработки углеводородов СО РАН, Институт химии нефти СО РАН, Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН, организации-партнеры: члены Межведомственного совета: Котюков М.М., Медведев А.М., Алдошин С.М., Локтева Е.С., Дегтярев П.А., Капустин В.М., Клепач А.Н., Костина Ю.В., Лунин В.В., Номоконов В.П., Парахин О.А., Пармон В.Н., Першуков В.А., Хаджиев



С.Н., Цыганов Д.И., Яруллин Р.С. (согласно приказу ФАНО России о Межведомственном совете № 138 от 28.03.2017 г.).

Интеграция в мировое научное сообщество

9. Участие в крупных международных консорциумах (например - CERN, ОИЯИ, FAIR, DESY, МКС и другие) в период с 2013 по 2015 год

1. Международное научное объединение «Каталитическая переработка БИОМАССЫ в ценные продукты» (МНО «Биомасса»), Россия – Франция.

Организации-участники:

- Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
- Институт химии и химической технологии СО РАН
- Сибирский федеральный университет
- Национальный центр научных исследований (Centre National de la Recherche Scientifique)
- Институт исследования катализа и окружающей среды (Institut de Recherches sur la Catalyse et l'Environnement de Lyon (IRCELYON))
- Института химии конденсированного вещества, г. Бордо (Institut de chimie de la matière condensée de Bordeaux (ICMCB))

Лаборатории материалов, поверхностей и процессов катализа, г. Страсбург (Laboratoire des Matériaux, Surfaces et Procédés pour la Catalyse (LMSPC))

2. Европейская федерация каталитических обществ (European Federation of Catalysis Societies)

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН – член федерации, директор ИК СО РАН, академик РАН В.И. Бухтияров – один из шести членов совета директоров EFCATS.

Страны-участники:

Австрия, Бельгия, Болгария, Чехия, Дания, Финляндия, Франция, Германия, Греция, Венгрия, Ирландия, Италия, Латвия, Нидерланды, Норвегия, Польша, Португалия, Румыния, Россия, Словакия, Словения, ЮАР, Испания, Швеция, Швейцария, Турция, Великобритания

3. Консорциум «Интенсификация теплообмена и катализ: УНИХИТ» (Heat Exchange Intensification and Catalysis: UNHEAT), Россия-Великобритания. Договор о присоединении от 07.12.2012.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН – участник консорциума

Организации-участники:

- Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
- Имперский колледж Лондона (Imperial College Of Science, Technology And Medicine)
- BP International Limited
- Новосибирский государственный университет



• ООО «Уникат»

10. Включение полевых опытов организации в российские и международные исследовательские сети. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства»

Информация не предоставлена

11. Наличие зарубежных грантов, международных исследовательских программ или проектов за период с 2013 по 2015 год

Всего в период с 2013 по 2015 гг. в ИК СО РАН выполнялось 7 зарубежных грантов в рамках программ INTAS и 7-й рамочной программы ЕС по научным исследованиям на общую сумму 4,8 млн. Евро.

Тематики, по которым проводились исследования были следующими:

- Разработка многофункционального теплозащитного покрытия и средств моделирования для высокотемпературного способа производства энергии с высокой эффективностью;
- Устойчивое производство топлива путем риформинга в водной фазе-понимание катализа и гидротермальная стабильность нанесенных на углерод благородных металлов;
- Каталитическое парциальное окисление биогаза и риформинг пиролитического масла (Биомасло) для автотермического производства синтетического газа и конверсии в топлива;
- Дизайн и производство каталитических мембранных реакторов путем разработки новых нано-построенных каталитических и селективных мембранных материалов;
- Окислительная дигидрогенизация метана с последующей олигомеризацией до жидкостей;
- Ускоренная индустриализация путем исследования и разработки катализаторов;
- Демонстрация технологии батареи твердооксидных топливных элементов для работы при 600 град.С;

Без участия ИК СО РАН выполнение данных проектов было бы невозможным.

Всего в период с 2013 по 2015 гг. ИК СО РАН являлся исполнителем по 47 международным договорам с зарубежными компаниями. Основными заказчиками работ являлись компании из следующих стран: Нидерланды, США, Япония, Южная Африка, Германия, Великобритания и др.

Основные тематики, по которым проводились исследования были следующими:

- Экспериментальное и аналитическое исследование влияния структуры и состава исходных каталитических сеток на образование N₂O в процессе каталитического окисления аммиака;
- Титанмагниевые катализаторы газофазной полимеризации пропилена;
- Получение пропилен гликоля путем газофазной гидратации эфиров молочной кислоты;
- Разработка катодных электрокатализаторов Pt/C;



- Проведение исследований и разработки: окислительная десульфурация нефтяного топлива;
- Селективное гидрирование карбоновых кислот и эфиров в спирты;
- Превращение легких парафинов в олефины и спирты на катализаторах на основе оксихлорида рутения;
- Окисление пропана в ионных жидкостях;
- Димеризация ацетилена;
- Исследования в области охарактеризования суспензионных катализаторов и носителей фазы Фишер-Тропша, принадлежащих Sasol Technology (Pty) Ltd, ЮАР;
- Настройка модели автомобильного катализатора-ловушки обезвреживания Nox;
- Абсорбция H₂S на основе модернизированного стеклянного волокна;
- Изучение фундаментальных основ мицеллярного катализа и физической химии мало-размерных структурированных систем, с применением полученных результатов в нефтехимической индустрии;
- Разработка водостойких адсорбентов для удаления хлорсодержащих органических соединений из промышленно загрязненных вод;
- Исследование возможности применения жидкофазных каталитических реакций для переработки алканов и бензола;
- Исследования в области поиска альтернативных путей получения бутадиена путем димеризации ненасыщенного C₂ углеводородного сырья, в том числе дальнейшее развитие катализаторов для синтеза винилацетилена и новых реакций кросс-метатезиса ацетилена и этилена;
- Гидроксилирование бензола в фенол молекулярным кислородом на твердых катализаторах.

НАУЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ОРГАНИЗАЦИИ

Наиболее значимые результаты фундаментальных исследований

12. Научные направления исследований, проводимых организацией, и их наиболее значимые результаты, полученные в период с 2013 по 2015 год

V.44. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ХИМИИ

Проект V.44.2.3. Разработка научных основ для создания новых процессов селективного получения кислород- и серосодержащих органических соединений.

Впервые методами экстракции и ИКС установлен детальный механизм взаимодействия метана и этилена с α -кислородом (O α) на цеолите FeZSM-5. Окисление метана идет по механизму отрыва водорода с образованием метоксильных и гидроксильных групп, в то время как окисление этилена осуществляется путем присоединения кислорода по двойной связи. В конечном счете взаимодействие метана и этилена с α -кислородом ведет к образо-



ванию поверхностных соединений, десорбция которых дает продукты селективного окисления, соответственно, метанол и этиленоксид. Впервые обнаружено, что окисление этилена сопровождается протеканием неизвестной ранее реакции взаимодействия этиленоксида с этиленом с образованием бутаналя.

Установлены закономерности, определяющие протекание реакций глубокого окисления. Показано, что скорость каталитических реакций определяется двумя термодинамическими параметрами: теплотой адсорбции кислорода, Q_{O_2} , и теплотой реакции, Q_R . Получен универсальный БЭП параметр $Q_{uni} = Q_R - Q_{O_2}$, который позволяет описать единой зависимостью скорость всех рассмотренных реакций газофазного окисления на всех оксидных катализаторах.

1. Starokon, E.V. Epoxidation of ethylene by anion radicals of \square -oxygen on the surface of FeZSM-5 zeolite [Текст] / E.V. Starokon, M.V. Parfenov, L.V. Pirutko, I.E. Soshnikov, G.I. Panov // J. Catal. – 2014. – V. 309. P. 453–459. Impact Factor 7.354.

2. Panov, G.I. The Brønsted-Evans-Polanyi Correlations in Oxidation Catalysis [Текст] / G.I. Panov, M.V. Parfenov, V.N. Parmon // Catalysis Reviews. – 2015. – Т. 57. – № 4. – P. 436–477. Impact Factor 8.250

Проект V. 44.2.5. Разработка научных основ получения оксидных катализаторов и носителей, в том числе композитных, с использованием интенсифицирующих методов физического и химического воздействия (мехактивация, термоактивация, СВЧ, сверхкритические условия и др.).

Показана возможность и определены условия получения функциональных оксидных и композитных материалов с использованием интенсифицирующих методов воздействия при синтезе. Выявлены особенности и закономерности формирования материалов с необходимыми свойствами на стадиях приготовления и под действием реакционной среды. Выявлены особенности микроструктуры таких материалов и установлена ее связь с функциональными свойствами. Показано, что применение интенсифицирующих воздействий при синтезе позволяет получать сложные оксидные материалы при меньших временах и температурах спекания и без стоков.

3. Pinaeva L.G., Isupova L.A., Prosvirin I.P., Sadovskaya E.M., Danilova I.G., Ivanov D.V., Gerasimov E.Yu. La–Fe–O/CeO₂ Based Composites as the Catalysts for High Temperature N₂O Decomposition and CH₄ Combustion. Catalysis Letters. 2013. V. 143. N 12. P. 1294–1303. DOI: 10.1007/s10562-013-1079-2.

4. . Ivanov D.V., Pinaeva L.G., Isupova L.A., Sadovskaya E.M., Prosvirin I.P., Gerasimov E.Yu., Yakovleva I.S. Effect of Surface Decoration with LaSrFeO₄ on Oxygen Mobility and Catalytic Activity of La_{0.4}Sr_{0.6}FeO_{3–δ} in High-Temperature N₂O Decomposition, Methane Combustion and Ammonia Oxidation. Applied Catalysis A: General. 2013. V. 457. P. 42–51. DOI: 10.1016/j.apcata.2013.03.007.



Проект V.44.2.12. Разработка высокоэффективных методов получения органических соединений, функциональных материалов и катализаторов на основе комплексных соединений переходных металлов и ионных жидкостей

В результате реализации проекта были разработаны новые высокоэффективные методы получения органических соединений, функциональных материалов и катализаторов на основе комплексных соединений переходных металлов и ионных жидкостей. Предложены оригинальные подходы к функционализации углеводов в окислительной среде. Изучены возможности использования ионных жидкостей в качестве компонентов катализаторов. Разработаны способы получения растворимых в органических растворителях систем, обладающими льюисовской кислотностью, и предложены подходы к их использованию в реакциях образования углерод-углеродных связей. Синтезирован ряд металл-органических координационных каркасов и изучены их каталитические свойства в ряде превращений органических соединений природного происхождения. Разработаны методы синтеза палладий-содержащих каталитических систем на основе имидазолиевых фрагментов, встроенных в каркас неорганического материала и «химически закрепленных» на поверхности мезопористого силикатного материала SBA-15 и исследованы их каталитические свойства в ряде реакций кросс-сочетания. Исследовано несколько способов полимеризации акрилонитрила и изучено влияние условий полимеризации на конверсию акрилонитрила и свойства получаемого при этом полиакрилонитрила. Показана возможность смягчить слишком жесткие требования по температуре, давлению этилена и длительности процесса полимеризации в процессах получения реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена, пригодных для твердофазной переработки.

5. Bardin, V.V., Shabalin, A.Y., Adonin, N.Y. Weakly nucleophilic potassium aryltrifluoroborates in palladium-catalyzed Suzuki-Miyaura reactions: relative reactivity of $K[4\text{-RC}_6\text{F}_4\text{BF}_3]$ and the role of silver-assistance in acceleration of transmetallation // *Beilstein J. Org. Chem.* 2015 – Vol. 11 – P. 608-616.

V.45. НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ И ФУНКЦИЯМИ, В ТОМ ЧИСЛЕ ВЫСОКОЧИСТЫХ И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Проект V.45.3.2 «Изучение размерных и структурных эффектов в катализаторах и мембранно-каталитических композитах»

Синергетические эффекты в биметаллических катализаторах окисления CO и углеводов

Показано, что в реакции полного окисления метана наиболее активна малостабильная металл-оксидная фаза Pd⁰-PdO. В Pd-Pt катализаторах в условиях реакции образуется стабильная фаза Pt⁰-PdO. Оптимальными являются частицы PdO размером 8-10 нм. Формирование смешанного состояния активного компонента (Pd⁰-PdO) в условиях реакции приводит к повышению активности катализаторов. Биметаллические PtPd катализаторы



с оптимальным содержанием платины (поверхностная концентрация ~ 40 ат.%) проявляют более высокую каталитическую активность в реакции полного окисления металла по сравнению с монометаллическими образцами. Было обнаружено, что в ходе протекания реакции происходит перераспределение Pt и Pd в частицах активного компонента. При этом именно исходное соотношение Pt:Pd в катализаторе является определяющим параметром для достижения им максимальной активности в реакции окисления метана.

Формирование сплавных частиц Pd-Rh заданного состава на поверхности γ -Al₂O₃ позволяет не только сохранить каталитическую активность в реакциях окисления CO и углеводородов, а также восстановления оксидов азота, но и существенно улучшить стабильность катализаторов. В сплавных катализаторах практически полностью предотвращается диффузия ионов родия в объем носителя. Важную стабилизирующую роль также играют донорные центры Al₂O₃. Показано, что при использовании в качестве носителя дельта модификация оксида алюминия эффекты стабилизации палладия и родия при повышенных температурах (до 1000 °C) практически не наблюдаются.

1. Vedyagin A.A., Gavrilov M.S., Volodin A.M., Stoyanovskii V.O., Slavinskaya E.M., Mishakov I.V., Shubin Y.V. Catalytic Purification of Exhaust Gases Over Pd–Rh Alloy Catalysts // Topics in catalysis, 2013, Vol. 56 (11), pp. 1008-1014;

2. Pakharukov I.Yu., Stakheev A.Yu., Beck I.E., Zubavichus Ya.V., Murzin V.Yu., Parmon V.N., Bukhtiyarov V.I. Concentration Hysteresis in the Oxidation of Methane over Pt/ γ -Al₂O₃: X ray Absorption Spectroscopy and Kinetic Study // ACS Catal. 2015, vol. 5, iss. 5, 2795-2804.

Проект V.45.3.6 Изучение влияния анионного состава соединения предшественника и локального окружения активного металла на формирование активного состояния катализаторов на основе переходных металлов.

Выполнены исследования структурных особенностей катализаторов на основе смешанных оксидов переходных металлов (Cu- и Co-содержащих катализаторов) для реакций с восстановительной средой – синтезов углеводородов и метанола из CO и H₂, паровой конверсии CO, дегидрирования метанола - в исходном и восстановленном состоянии. Анализ полученных экспериментальных данных позволяет заключить, что анионные примеси в составе оксидного предшественника значительно модифицируют как его структуру, так и структуру формирующегося в ходе его восстановления катализатора. Присутствие модифицирующих анионных примесей оказывает значительное влияние на локальное окружение катионов переходных металлов (в особенности Ян-Теллеровских катионов, каковыми являются ионы Cu²⁺) и даже на саму возможность существования совместного оксидного предшественника. Изменение локальной структуры катионов под влиянием модифицирующих анионов в некоторых случаях проявляется в радикальном изменении кинетики процесса восстановительной активации катализатора. Образование эпитаксиальной связи между частицами активного металла и поверхностью оксидного носителя, а также их декорирование аморфным оксигидроксидным слоем могут благоприятствовать стабилизации наночастиц активного металла в восстановленном состоянии.



Есть основания предполагать, что процессы активации молекул водорода и гидрируемого субстрата (например, CO) протекают на поверхности металлических частиц, полностью покрытых тонким слоем аморфного оксигидроксида. Наблюдаемую экспериментально высокую активность этих катализаторов, вероятно, не следует относить исключительно к повышению удельной каталитической активности оставшейся свободной поверхности металла, а необходимо связать с собственной высокой каталитической активностью металлических частиц, декорированных оксигидроксидным слоем.

3. A.A. Khassin, H. Jobic, G.A. Filonenko, E.V. Dokuchits, A.V. Khasin, T.P. Minyukova, N.V. Shtertser, L.M. Plyasova, T.M. Yurieva. Interaction of hydrogen with Cu-Zn mixed oxide model methanol synthesis catalyst. *J. Molec. Catal.: A Chem.* 373 (2013) 151-160. DOI: 10.1016/j.molcata.2013.03.014

Проект V.45.3.8. Научные основы дизайна нанокompозитных/ наноструктурированных оксидных и металл-оксидных систем для водородной энергетики

Разработаны эффективные и устойчивые к зауглероживанию нанокompозитные активные компоненты для процессов трансформации природного газа и биотоплив в синтез-газ и водород на основе сложных оксидов с высокой подвижностью кислорода, в том числе полученных с использованием новых методов синтеза и промотированных наночастицами сплавов на основе никеля. Катализаторы на основе таких активных компонентов, нанесенных на структурированные теплопроводные носители, показали высокую эффективность и устойчивость к зауглероживанию в процессах трансформации реальных биотоплив, включая глицерин и скипидар, в синтез-газ, проведено математическое моделирование процессов. Разработаны устойчивые к карбонизации нанокompозиты перовскит-флюорит с высокой смешанной ионной-электронной проводимостью для катодов твердооксидных топливных элементов и кислородпроводящих мембран, отработаны процедуры их спекания путем микроволнового нагрева и радиационно-термической обработки, детально изучены процессы диффузии кислорода в таких системах, установлены фундаментальные факторы, определяющие их транспортные характеристики. Изготовлены и успешно испытаны в реальных условиях опытные образцы каталитических мембран, разработаны математические модели для описания процессов активации и транспорта кислорода и водорода. Испытания нанокompозитных катодных материалов для среднетемпературных твердооксидных тонкослойных топливных элементов на пенометаллических подложках показали их устойчивость к карбонизации и высокую мощность, перспективную для практического использования.

4. L. G. Pinaeva, E.M. Sadovskaya, Yu.A. Ivanova, T.G. Kuznetsova, I.P. Prosvirin, V.A. Sadykov, Y. Schuurman, A.C. van Veen, C. Mirodatos, Water gas shift and partial oxidation of CH₄ over CeO₂-ZrO₂(-La₂O₃) and Pt/CeO₂-ZrO₂(-La₂O₃): Performance under transient conditions, *Chemical Engineering Journal* 257 (2014) 281-291

5. V. Sadykov, N. Mezentseva, M. Simonov, E. Smal, M. Arapova, S. Pavlova, Y. Fedorova, O. Chub, L. Bobrova, V. Kuzmin, A. Ishchenko, T. Krieger, A.-C. Roger, K. Parkhomenko, C.



Mirodatos, O. Smorygo, J. Ross, Structured nanocomposite catalysts of biofuels transformation into syngas and hydrogen: Design and performance, International Journal of Hydrogen Energy 40 (2015) 7511-7522

V.46. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РАЦИОНАЛЬНОГО ПРИРОДОПОЛЬЗОВАНИЯ И ОХРАНЫ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА БАЗЕ ПРИНЦИПОВ «ЗЕЛЕННОЙ ХИМИИ» И ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ; СОЗДАНИЕ НОВЫХ РЕСУРСО- И ЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩИХ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ И ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ВКЛЮЧАЯ УГЛУБЛЕННУЮ ПЕРЕРАБОТКУ УГЛЕВОДОРОДНОГО И МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ РАЗЛИЧНЫХ КЛАССОВ И ТЕХНОГЕННЫХ ОТХОДОВ, А ТАКЖЕ НОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ОБЛУЧЕННОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА И ОБРАЩЕНИЯ С РАДИОАКТИВНЫМИ ОТХОДАМИ

Проект V.46.2.4 «Структурированные адсорбенты и макропористые катализаторы, новые методы исследований механизмов реакций углеродсодержащих макромолекул»

Разработаны методы приготовления катализаторов на основе неорганических носителей, в том числе оксида алюминия, диоксида кремния, диоксида циркония, диоксида титана, а также кристаллических алюмосиликатов и железосиликатов, с пространственно организованной структурой мезо- и макропор с использованием полистирольных сфер. Использование данного способа приготовления катализаторов позволяет получать контролируемую текстуру материала: заданное распределение пор по размерам и регулярную структуру пор в широком диапазоне – от ангстрем до мм, с заданным составом и химическими свойствами поверхности. Получаемые материалы увеличивают эффективность таких каталитических реакций с участием макромолекул, как гидропереработка тяжелой нефти и полное окисление высокомолекулярных соединений. Изучены методики синтеза органических темплатов, состоящих из монодисперсных полистирольных сфер с контролируемым диаметром от 90 до 1200 нм, а также разработаны различные подходы введения темплата в неорганический каркас для создания регулярной макропористой текстуры. Разработаны способы синтеза мезо/макропористого носителя на основе Al_2O_3 с бимодальным распределением пор по размерам. Удельный объем пор образцов мезо/макропористого оксида алюминия (0,6-0,8 $см^3/г$) более чем в 2 раза превышает объем пор мезопористых аналогов (0,3 $см^3/г$). Приготовлены и охарактеризованы темплатные макропористые $CoMoNi/Al_2O_3$ -Т катализаторы, которые показывают улучшенную конверсию в процессах гидрообессеривания и гидродеметаллизации, а также значительно повышенную емкость по ванадию и устойчивость к отложению кокса, по сравнению с традиционным мезопористым катализатором. Разработаны методики приготовления структурированных макро/мезо/микропористых материалов, в том числе с использованием темплатного метода на основе полимерных нано- и микросфер с заданными размерами и свойствами.



1. Parkhomchuk E.V., Lysikov A.I., Okunev A.G., Parunin P.D., Semeikina V.S., Ayupov A.B., Trunova V.A., Parmon V.N. Meso/macroporous CoMo alumina pellets for hydrotreating of heavy oil. *Ind. Eng. Chem. Res.* 52 (2013) 17117-17125

2. K.A. Sashkina, N.A. Rudina, A.I. Lysikov, A.B. Ayupov, E.V. Parkhomchuk. Hierarchically Porous Materials Built of Fe-silicalite Nanobeads. *J. Mater. Chem. A*, 2 (2014) 16061-16070.

Проект V.46.2.6. Разработка научных основ приготовления гетерогенных катализаторов для глубокой переработки углеводородного и возобновляемого сырья в продукты нефтехимического назначения.

Исследованы каталитическая активность и стабильность микрокристаллического цеолита со структурой типа MFI, наноразмерного цеолита MFI с монокристаллической, плотной морфологией и наноразмерного цеолита MFI с поликристаллической, рыхлой структурой зерна в процессе ароматизации легких углеводородов, в том числе ПНГ.

Показано, что нанокристаллический цеолит обладает большей крекирующей активностью, что говорит о более высокой льюисовской кислотности нанокристаллического образца, и подтверждается данными ИК-спектроскопии адсорбированного пиридина. Каталитическая стабильность возрастает в ряду: микрокристаллический MFI < наноразмерный цеолит MFI с монокристаллической, плотной морфологией < наноразмерный цеолит MFI с поликристаллической, рыхлой морфологией.

Данная закономерность объяснена различным размером вторичных транспортных пор и внешней поверхности цеолитных кристаллов. Увеличение размера транспортных пор за счет снижения диффузионных затруднений уменьшает удельную концентрацию промежуточных соединений, являющихся коксагентами, в расчете на отдельный активный центр. За счет этого снижается скорость образования кокса на активных центрах внешней поверхности и увеличивается каталитическая стабильность цеолита. Увеличение внешней поверхности цеолитных кристаллов увеличивает емкость цеолита по количеству кокса, приводящего к обратимой дезактивации, также увеличивая каталитическую стабильность.

Предложены методы увеличения каталитической стабильности наноструктурированных катализаторов на основе микро- и нанокристаллических цеолитов в процессах переработки ПНГ и ШФЛУ в продукты нефтехимического назначения. Эти методы заключаются в селективном удалении активных центров на внешней поверхности цеолитных кристаллов, в селективной необратимой дезактивации этих центров, являющихся центрами коксообразования, а также в увеличении размера вторичных транспортных пор путем введения выгорающих добавок в ходе синтеза поликристаллитов.

Селективное деалюминирование приводит к практически полному удалению кислотных центров с внешней поверхности кристаллов цеолита с сохранением их в объеме, что позволяет увеличить выход БТК, снизить выход нафталинов и газообразных продуктов и стабильность работы катализатора.

Показано, что совместное превращение бутанов с метаном значительно увеличивает выход ароматических углеводородов при увеличении содержания метана в сырье.



3. G. V. Echevskii, E. G. Kodenev, and G. N. Nosyreva. Methods of Increasing the Stability of the Catalytic Effect of MFI Type Zeolites and the Total Service Life of Catalysts Based on Them. *Catalysis in Industry*, 2013, Vol. 5, No. 4, pp. 275–282.

4. Ечевский Г.В., Тимошенко А.В., Мордкович В.З. Процессы углубленной переработки ПНГ // Подготовка и переработка попутного нефтяного газа в России (Часть 1). – ЭДВИ., 2014. – С.513-736.

Проект V.46.2.7. Разработка катализаторов и технологических основ гидропереработки вторичных нефтяных фракций, содержащих непредельные углеводороды

Разработаны кобальт-молибденовые катализаторы с использованием композиционного носителя на основе оксида алюминия и алюмосиликата и экспериментально определены условия процесса гидроочистки бензина каталитического крекинга, позволяющие достичь остаточного содержания серы менее 10 ppm при снижении октанового числа по исследовательскому методу не более 1,1 пункта при гидроочистке как широкой (НК-2100С), так и тяжелой (70-2100С) фракций бензина каталитического крекинга. Проведены длительные ресурсные испытания катализаторов и показана стабильность его физико-химических свойств.

Разработанный катализатор по своим показателям превосходит известные промышленные образцы ведущих зарубежных компаний и может служить основой создания отечественных конкурентоспособных технологий получения экологически чистых бензинов.

5. K.A. Leonova, O.V. Klimov, D.I. Kochubey, Yu.A. Chesalov, E.Yu. Gerasimov, I.P. Prosvirin, A.S. Noskov, Optimal pretreatment conditions for Co–Mo hydrotreatment catalysts prepared using ethylenediamine as a chelating agent.// *Catalysis Today* (2014), v. 220-222, pp. 327-336.

V.47. ХИМИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ПОЛУЧЕНИЯ И ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ, ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АЛЬТЕРНАТИВНЫХ И ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ ЭНЕРГИИ

Проект V.47.1.3. «Разработка научных основ каталитического и термического превращения возобновляемого сырья в энергетических целях»

- Разработаны модифицированные никельсодержащие катализаторы гидрооблагораживания бионефти (продукта быстрого пиролиза биомассы), обладающие повышенной механической и коррозионной стойкостью, что имеет определяющее значение при переработке бионефти в кислой среде при повышенных температурах. Применение данных катализаторов привело к снижению содержания кислорода с 40% (в бионефти) до 12-16% и достижения атомного соотношения Н/С в продуктах на уровне 1.3–1.45. В результате, полученные продукты становятся пригодными для дальнейшей переработки вместе с нефтепродуктами на стандартном нефтеперерабатывающем оборудовании.

- В рамках направления переработки липидов в биотоплива был предложен катализатор переэтерификации метанолом триглицеридов жирных кислот – Ва-А1-О1200, который показал стабильность более 100 часов без снижения активности. Для процесса гидродеок-



сигенации производных липидов предложен ряд катализаторов на основе никеля, модифицированных Cu, Mo, P и C.

- В направлении исследования процессов окисления и газификации возобновляемого сырья с целью получения энергии разработаны методические подходы получения стабильных катализаторов глубокого окисления для кипящего слоя. Их испытания как в модельных реакциях окисления CO и CH₄, так и при сжигании бурого угля и биомассы в кипящем слое показали их преимущества перед промышленными аналогами.

1. Kukushkin R.G., Bulavchenko O.A., Kaichev V.V., Yakovlev V.A., Influence of Mo on catalytic activity of Ni-based catalysts in hydrodeoxygenation of esters, *Applied Catalysis B: Environmental* 163 (2015) 531–538

2. Yu.V.Larichev, P.M.Yeletsy, V.A.Yakovlev, Study of silica templates in the rice husk and the carbon–silica nanocomposites produced from rice husk, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 87 (2015), 58–63

3. Khromova S.A., Smirnov A.A., Bulavchenko O.A., Saraev A.A., Kaichev V.V., Reshetnikov S.I., Yakovlev V.A., Anisole hydrodeoxygenation over Ni - Cu bimetallic catalysts: the effect of Ni/Cu ratio on selectivity, *Applied Catalysis A: General*, 2014. – V. 470. – P. 261-270

4. Bykova M.V., Ermakov D.Yu., Khromova S.A., Smirnov A.A., Lebedev M.Yu., Yakovlev V.A., Stabilized Ni-based catalysts for bio-oil hydrotreatment: Reactivity studies using guaiacol, *Catalysis Today* 220–222 (2014) 21– 31

5. Быкова М.В., Заварухин С.Г., Трусов Л.И., Яковлев В.А. Кинетика гидродеоксигенации гваякола с учетом дезактивации катализатора // *Кинетика и катализ*. – 2013. – Т. 54. – № 1. – С. 41-50

У.48. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМОВ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СОЗДАНИЕ НА ИХ ОСНОВЕ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ И ПРОФИЛАКТИКИ СОЦИАЛЬНО ЗНАЧИМЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

Проект № У.48.7.1 «Разработка и исследование механизма действия и тонкой структуры новых лекарственных форм на основе «умных» функционализированных полимерных гидрогелей, обеспечивающих контролируемое поступление лекарства в целевую зону»

Матричным методом синтезированы лечебные мягкие контактные линзы (ЛМКЛ) из гидрогелей с эффектом памяти (imprinted гидрогелей) на основе сополимеров ГЭМА и функциональных мономеров анионной и катионной природы с использованием в качестве шаблона цефепима. При выборе лекарства учитывалась новизна и эффективность этого нового лекарственного вещества, используемого в лечебной практике. Цефепим обладает широким спектром антибактериального и бактерицидного действия, в том числе и по отношению к штаммам грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов, резистентных к цефалоспорином III поколения (цефотаксим). Показано, что эффект памяти проявляется в повышении величины сорбции цефепима imprinted гидрогелями (в 1,5-2,6 раза) по сравнению с обычными гидрогелями такого же химического состава. Обнаружено



ускоренное в 1,9 раза выделение цефепима из анионного imprinted гидрогеля по сравнению с обычным гидрогелем. Для катионного и амфолитных imprinted гидрогелей наблюдается еще более ускоренное (в 2,3-3,5 раза) выделение цефепима из гидрогеля. Этим цефепим отличается от исследованного нами ранее цефалоспорина III поколения цефотаксима. Это можно объяснить сильным дополнительным набуханием гидрогеля в присутствии лекарства и увеличением коэффициента диффузии воды, что приводит к ускорению высвобождения цефепима из imprinted гидрогеля.

1. Иванчев С.С., Примаченко О.Н., Павлюченко В.Н., Мариненко Е.А. Полимерные гидрогели, обладающие эффектом памяти для иммобилизации двухкомпонентных лекарственных веществ Журнал прикладной химии. 2013. Т. 86. № 10. С. 1634-1641.

2. O. N. Primachenko, E. A. Marinenko, and S. S. Ivanchev. Polymer Hydrogels with the Memory Effect for Immobilization of Drugs // Polymer Science, Ser. B, 2014, Vol. 56, No. 6, pp. 815–822.

V.49. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ В ИНТЕРЕСАХ ОБОРОНЫ И БЕЗОПАСНОСТИ СТРАНЫ

Проект V.49.1.6 «Синтез и разработка газогенерирующих композиций, регулируемых с помощью катализаторов, на основе высокоэнергетических соединений для создания устройств водородной энергетики и компонентов специального назначения»

- Создан научный задел по синтезу моно- и биядерных энергоемких органометаллических соединений на основе глицина и нитратов Co, Fe, Mn, Ni, Cu, Cr, La, Sr. Показано, что термохимические свойства полученных соединений зависят от природы окислителя. Выявлена определяющая роль режима горения на чистоту и дисперсность образующейся оксидной фазы, в т.ч. перовскита. Обобщение результатов комплекса физико-химических методов (ИК, РФА, ПЭМ ВР, химический и термический анализы и др.) позволило разработать универсальный подход к получению нанодисперсных фаз оксидов в одну стадию в режиме послойного горения. Показана эффективность синтезируемых соединений как каталитических добавок для модельных твердотопливных газогенерирующих композиций.

- были синтезированы и изучены родиевые и кобальтовые катализаторы гидролиза NaNH_4 . Показано, что природа предшественника активного компонента и носителя существенно влияет на скорость генерации H_2 . Впервые обнаружено, что в реакционной среде под действием NaNH_4 на поверхности Rh/TiO₂, прокаленного при 300 °С, формируются электронодефицитные частицы родия, ускоряющие процесс гидролиза. Установлено, что массивный кобальтовый катализатор, полученный из CoCl_2 в среде NaNH_4 , состоит из ферромагнитных сферических частиц с кислородсодержащей оболочкой (2-3 нм). Выявлены причины его дезактивации гидролиза NaNH_4 . Была предложена оригинальная конструкция каталитического блока со структурированным слоем для проточного реактора, обеспечивающая значительное снижение зависимости скорости генерации H_2 от диффузионных процессов за счет реализации турбулентного режима перемешивания реагентов.



1 Е.С. Одинцов, Р.В. Фурсенко, О.В. Нецкина, О.В. Комова, В.И. Симагина, Д.В. Чусов. Разработка и экспериментальное исследование малоразмерных энергопреобразующих устройств, интегрированных с компактным генератором горючего газа. Вестник инженерной школы ДВФУ. 2013. № 4 (17) с. 1-9.

2 V.I. Simagina, O.V. Komova, O.V. Netskina, Nano-sized cobalt catalysts for hydrogen storage systems based on ammonia borane and sodium borohydride. In book: Metal Nanopowders: Production, Characterization, and Energetic Applications. Editors: A.A. Gromov, U. Teipel. Wiley-VCH, ISBN: 978-3-527-33361-5, 2014. 199-226.

3 O.V. Netskina, D.I. Kochubey, I.P. Prosvirin, D.G. Kellerman, V.I. Simagina, O.V. Komova. Role of the electronic state of rhodium in sodium borohydride hydrolysis. Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, 2014, V. 390, P. 125-132.

4 O.V. Komova, S.A. Mukha, O.V. Netskina, G.V. Odegova, A.A. Pochtar', A.V. Ishchenko, V.I. Simagina A solid glycine-based precursor for the preparation of La₂CuO₄ by combustion method Ceramics International, 2015, V. 41, № 1, P. 1869-1878.

5 O.V. Netskina, R.V. Fursenko, O.V. Komova, E.S. Odintsov, V.I. Simagina NaBH₄ generator integrated with energy conversion device based on hydrogen combustion. Journal of Power Sources, 2015, V. 273, P. 278-281.

13. Защищенные диссертационные работы, подготовленные период с 2013 по 2015 год на основе полевой опытной работы учреждения. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства».

Информация не предоставлена

14. Перечень наиболее значимых публикаций и монографий, подготовленных сотрудниками научной организации за период с 2013 по 2015 год

1. Vernikovskaya N.V., Pavlova T.L., Chumakova N.A., Noskov A.S. Mathematical Modelling of Filtration and Catalytic Oxidation of Diesel Particulates in Filter Porous Media Глава монографии Mathematical Modeling in Social Sciences and Engineering. – Nova Science Publishers., 2014. – С.27-40. – ISBN 978-1-63117-335-6.

2. Загоруйко А.Н., Носков А.С., Белый А.С., Смоликов М.Д. Математическое моделирование каталитических процессов нефтепереработки на основе термодинамически содержательных кинетических моделей Глава монографии Михаил Гаврилович Слинко – служение науке и отчеству. – Изд-во СО РАН., 2014. – С.441-449. – ISBN 978-5-7692-1360-1.

3. Leonova K.A., Klimov O.V., Kochubey D.I., Chesalov Y.A., Gerasimov E.Y., Prosvirin I.P., Noskov A.S. Optimal Pretreatment Conditions for Co–Mo Hydrotreatment Catalysts Prepared Using Ethylenediamine as a Chelating Agent Catalysis Today. 2014. V. 220-222. P. 327–336. DOI: 10.1016/j.cattod.2013.08.019, CAN: 160:135833 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF=4,3)



4. Klimov O.V., Leonova K.A., Koryakina G.I., Gerasimov E.Y., Prosvirin I.P., Cherepanova S.V., Budukva S.V., Pereima V.Y., Dik P.P., Parakhin O.A., Noskov A.S. Supported on Alumina Co-Mo Hydrotreating Catalysts: Dependence of Catalytic and Strength Characteristics on the Initial AlOON Particle Morphology *Catalysis Today*. 2014. V. 220-222. P. 66–77. DOI: 10.1016/j.cattod.2013.09.001, CAN: 160:135834 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF= 4,3)

5. Dik P.P., Klimov O.V., Koryakina G.I., Leonova K.A., Pereima V.Y., Budukva S.V., Gerasimov E.Y., Noskov A.S. Composition of Stacked Bed for VGO Hydrocracking with Maximum Diesel Yield *Catalysis Today*. 2014. V. 220-222. P. 124–132. DOI: 10.1016/j.cattod.2013.07.004, CAN: 160:135828 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF= 4,3)

6. Климов О.В., Корякина Г.И., Герасимов Е.Ю., Дик П.П., Леонова К.А., Будуква С.В., Перейма В.Ю., Уваркина Д.Д., Казаков М.О., Носков А.С. Новый катализатор глубокой очистки вакуумного газойля - сырья каталитического крекинга *Катализ в промышленности*. 2014. № 5. С. 56-64. , CAN: 163:177061 РИНЦ Chem.Abs. (Импакт-фактор РИНЦ 0,605)

7. Александров П.В., Бухтиярова Г.А., Носков А.С. Современные подходы к тестированию гранулированных катализаторов гидроочистки нефтяных фракций в лабораторных условиях *Катализ в промышленности*. 2014. № 5. С. 88-94. , CAN: 163:177064 РИНЦ Chem.Abs. (Импакт-фактор РИНЦ 0,605)

8. Vernikovskaya N.V., Pavlova T.L., Mokrinskii V.V., Murzin V.Y., Chumakova N.A., Noskov A.S. Soot Particulates Abatement in Diesel Engine Exhaust by Catalytic Oxidation Followed Their Trapping in Filters *Chemical Engineering Journal*. 2015. V. 269. P. 416-424. DOI: 10.1016/j.cej.2015.01.129, CAN: 162:357275 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF= 5,3)

9. Будуква С.В., Климов О.В., Носков А.С. Новый способ восстановления активности нанесенных CoMo/Al₂O₃ и NiMo/Al₂O₃ катализаторов глубокой гидроочистки после окислительной регенерации *Катализ в промышленности*. 2015. № 3. С. 29-35. РИНЦ Chem.Abs. (Импакт-фактор РИНЦ 0,605)

10. Vykova M.V., Ermakov D.Y., Khromova S.A., Smirnov A.A., Lebedev M.Y., Yakovlev V.A. Stabilized Ni-Based Catalysts for Bio-Oil Hydrotreatment: Reactivity Studies Using Guaiacol *Catalysis Today*. 2014. V. 220-222. P. 21-31. DOI: 10.1016/j.cattod.2013.10.023, CAN: 160:136325 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF= 4,3)

15. Гранты на проведение фундаментальных исследований, реализованные при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Российского гуманитарного научного фонда, Российского научного фонда и другие

В ИК СО РАН в 2013 году выполнялось 77 грантов РФФИ на сумму 43,8 млн. рублей; в 2014 году 66 грантов РФФИ на сумму 50, 5 млн. рублей и 3 гранта РНФ на сумму 18,4 млн. рублей; в 2015 году 86 грантов РФФИ на сумму 51,8 млн. рублей и 6 грантов РНФ на сумму 46,6 млн. рублей.

Перечень 10 наиболее значимых научных грантов, выполнявшихся на базе ИК СО РАН в период с 2013 по 2015 год:



1. Грант РФФ по теме «Каталитическая трансформация тяжелых углеводородных компонентов нефти на неорганических матрицах нефтесодержащих пород», объем финансирования 17,2 млн. рублей, сроки исполнения 2015-2017 гг.;

2. Грант РФФ по теме «Разработка научных основ переработки тяжелой нефти путем селективного парового крекинга в присутствии наноразмерных частиц катализаторов», объем финансирования 15,0 млн. рублей, сроки исполнения 2015-2017 гг.;

3. Грант РФФ по теме «Стабильность и физико-химические превращения углеводородных дисперсных систем в тяжелых нефтях в условиях интенсивных внешних воздействий по данным современных методов *in situ*», объем финансирования 18,0 млн. рублей, сроки исполнения 2015-2017 гг.;

4. Грант РФФИ по теме «Размерные и синергетические эффекты в реакциях хемоселективного гидрирования функционализированных нитроаренов на нанесенных наноструктурированных Au-содержащих катализаторах», объем финансирования 2,5 млн. рублей, срок исполнения 2013 г.

5. Грант РФФИ по теме «Исследование свойств бифункционального катализатора гидроизомеризации нормальных алканов в зависимости от кислотности силикоалюмофосфата и дисперсности металлического компонента», объем финансирования 600 тыс. рублей, срок исполнения 2013 г.

6. Грант РФФИ по теме «Химическая термодинамика и кинетика синтеза биодизельного топлива в сверхкритических спиртах в присутствии гетерогенных катализаторов», объем финансирования 550 тыс. рублей, срок исполнения 2014 г.

7. Грант РФФИ по теме «Исследование процессов переработки высокоэнергетической биомассы микроводорослей в продукты топливного назначения с использованием ионных жидкостей», объем финансирования 400 тыс. рублей, срок исполнения 2014 г.

8. Грант РФФИ по теме «Исследование строения металлического кобальта на многостенных углеродных нанотрубках - перспективных носителей катализаторов синтеза Фишера-Тропша нетрадиционными методами ЯМР и ПЭМ», объем финансирования 400 тыс. рублей, срок исполнения 2015 г.

9. Грант РФФИ по теме «Фундаментальные подходы синтеза модифицированных никельсодержащих катализаторов гидродеоксигенации липидов микроводорослей и их производных», объем финансирования 400 тыс. рублей, срок исполнения 2015 г.

10. Грант РФФИ по теме «Разработка научно-технических основ каталитической конверсии дизельного топлива в водородсодержащий газ и водород для целей водородной энергетики и повышения экологичности транспортных средств», объем финансирования 1,4 млн. рублей, срок исполнения 2015 г.

16. Гранты, реализованные на основе полевой опытной работы организации при поддержке российских и международных научных фондов. Заполняется орга-



низациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства».

Информация не предоставлена

ИННОВАЦИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ НАУЧНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Наиболее значимые результаты поисковых и прикладных исследований

17. Поисковые и прикладные проекты, реализованные в рамках федеральных целевых программ, а также при поддержке фондов развития в период с 2013 по 2015 год

Всего в период 2013-2015 гг. в ИК СО РАН выполнялось 15 Госконтрактов и соглашения в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России...» (Координатор программы – Минобрнаука России). Перечень 10 наиболее значимых приведен ниже:

1. Госконтракт № 16.526.12.6012 22 сентября 2011- 28 мая 2013 «Разработка типоразмерного ряда теплогенерирующих модулей на основе каталитического сжигания твердого топлива, включая отходы углеобогащения»;

2. Госконтракт № 14.516.11.0069 27.06.- 30.10.2013 «Разработка научных основ каталитической технологии гидрооблагораживания продуктов пиролиза биомассы в энергоносители»;

3. Госконтракт № 14.515.11.0043 19.03. – 15.09.2013 «Разработка научных основ приготовления 3-D структурированных макропористых катализаторов гидрокрекинга тяжелого нефтяного сырья»;

4. Госконтракт 14.516.11.0097 01.07 – 03.11.2013 «Разработка научных основ процесса получения высокоцетановых дизельных топлив с улучшенными экологическими и низкотемпературными свойствами и катализаторов для этого процесса»;

5. Госконтракт 14.515.11.0098 16.07.-12.2013 «Разработка процесса каталитической переработки C1-C4 фракции попутного нефтяного газа с получением углеродных материалов»;

6. Соглашение о предоставлении субсидии 14.613.21.0001 16.07.2014-31.12.2016 «Разработка нового катализатора гидроизомеризации на основе наноразмерных карбидов молибдена и вольфрама, более устойчивого к воздействию сернистых соединений, для производства дизельного топлива с низкой температурой застывания, взамен существующего платиносодержащего»;

7. Соглашение о предоставлении субсидии 14.613.21.0017 24.09.2014-31.12.2016 «Разработка комплексного (биотехнологического и нанокаталитического) процесса переработки



лигноцеллюлозной биомассы (солома/ древесные отходы) в топлива и востребованные химические вещества»;

8. Соглашение о предоставлении субсидии 14.607.21.0108 28.11.2014 - 31.12.2016 «Разработка катализатора и энергоэффективного процесса гидрокрекинга тяжелого нефтяного сырья с повышенным выходом малосернистых средних дистиллятов»;

9. Соглашение о предоставлении субсидии 14.610.21.0008 11.09.2015 – 31.12.2017 «Создание технологии производства импортозамещающих катализаторов глубокой гидропереработки вакуумного газойля»;

10. Соглашение о предоставлении субсидии 14.607.21.0046 25.08.2014-31.12.2016 «Разработка нанокаталитической технологии получения функциональных полимер-наноглеродных композиционных материалов из биоспиртов».

Внедренческий потенциал научной организации

18. Наличие технологической инфраструктуры для прикладных исследований

Институт катализа СО РАН имеет в своем составе Научно-технологический отдел прикладного катализа (НТО ПК). В состав НТО ПК входят Группа приготовления катализаторов, Группа испытания катализаторов, Группа пилотных установок и высокого давления, Группа препаративного синтеза и Группа обеспечения. Основная функция НТО ПК заключается в осуществлении масштабирования производства разработанных в Институте катализаторов и процессов на их основе до опытно-промышленного уровня. Проводится комплекс мероприятий по усовершенствованию существующих, разработке и внедрению новых катализаторов, материалов и устройств для широкого спектра производств отечественной промышленности.

В Волгоградском филиале Института катализа СО РАН располагается научно-технологический комплекс, позволяющий осуществлять весь цикл научно-исследовательских работ в области тонкого органического синтеза, включая лекарственные препараты, биологически активные соединения и особо чистые вещества, а также оптимизировать отдельные технологические стадии получения средне- и крупнотоннажных химических продуктов и подготавливать основу для их внедрения в промышленность страны. Имеющееся в распоряжении комплекса оборудование позволяет изучать закономерности поведения сложных химических систем, наиболее точно моделирующие изменение критических параметров реальных технологических процессов, которые невозможно получить как в лабораторных условиях, так и в условиях промышленного производства. В состав комплекса входит производственный участок, оснащенный в соответствии с требованиями стандарта GMP. Данный участок предназначен для создания и выпуска особо чистых химических соединений, а также для проведения исследований с целью получения необходимых технологических параметров производства новых лекарственных средств и на-



работки их опытных партий, требуемых для доклинических и клинических испытаний в соответствии со стандартом GMP.

Волгоградский филиал Института катализа СО РАН проводил совместные исследования с такими организациями страны, как Московский государственный университет, Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН (г. Екатеринбург), Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН (г. Москва), Институт биохимии и фундаментальной медицины СО РАН (г. Новосибирск), Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН и др.

19. Перечень наиболее значимых разработок организации, которые были внедрены за период с 2013 по 2015 год

1. Разработка: «Теплогенерирующие модули на основе каталитического сжигания твердого топлива в кипящем слое катализатора», патенты РФ 2383389 (2010), 2451876 (2012)

Сведения о внедрении: Ввод в эксплуатацию угольной котельной с кипящим слоем мощностью 6 Гкал/час в п. Магдагачи, Амурская область.

Бизнес-партнер: ООО «Термософт-Сибирь», дата внедрения: 2013 г.

2. Создание технологической документации и запуск производства катализаторов окисления аммиака на ООО «Новомичуринский катализаторный завод»;

3. Участие в создании в 2015 в с. Яровое (Алтайский край) производства катализаторов гидроочистки дизельного топлива НИКА-01-01 мощностью до 1500 тонн/год.

ЭКСПЕРТНАЯ И ДОГОВОРНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ОРГАНИЗАЦИИ

Экспертная деятельность научных организаций

20. Подготовка нормативно-технических документов международного, межгосударственного и национального значения, в том числе стандартов, норм, правил, технических регламентов и иных регулирующих документов, утвержденных федеральными органами исполнительной власти, международными и межгосударственными органами

Информация не предоставлена

Выполнение научно-исследовательских работ и услуг в интересах других организаций

21. Перечень наиболее значимых научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ и услуг, выполненных по договорам за период с 2013 по 2015 год



Всего ИК СО РАН было выполнено в 2013 году 46 коммерческих договоров НИР и ОКР, в 2014 году – 66, в 2015 – 72. Заказчиками работ являлись российские компании, среди которых можно выделить такие крупные компании, как АО "Газпромнефть-ОНПЗ", ОАО "НК "Роснефть", ОАО "Газпромнефть-МНПЗ", ПАО "СИБУР Холдинг", ООО "Новомичуринский катализаторный завод", ОАО "Ангарский завод катализаторов и органического синтеза", ОАО "Красцветмет", ООО "Салаватский катализаторный завод", ОАО "Нижнекамскнефтехим", ФГУП "НИИ полимеров", ФГУП "НПП "Прогресс" и др.

Перечень наиболее значимых договоров в рамках 16-й референтной группы "Химические технологии, включая нефтехимию" приведен ниже:

1. Разработка технологии опытного производства катализатора РДС, исходных данных конструкторской и проектно-сметной документации для создания пилотной установки риформинга в движущемся слое, 2013 год;

2. Разработка и изготовление узла каталитической переработки липидов микроводородослей в компоненты моторных топлив, 2013 год;

3. Разработка пакета катализаторов гидрокрекинга вакуумного газойля и технологии его производства, 2013 год;

4. Разработка технологии гидродециклизации легкого газойля каталитического крекинга с целью улучшения его качества, 2014 год;

5. Разработка катализатора и процесса гидроочистки бензина каталитического крекинга при минимальном снижении октанового числа, 2014 год;

6. Разработка технологической документации, авторское сопровождение создания в ОАО "АЗКиОС" опытно-промышленной установки риформинга в движущемся слое", 2014 год;

7. Анализ возможности и поиск перспективных технологий, позволяющих повысить октановое число бензиновой фракции каталитического крекинга, 2015 год;

8. Разработка технологии производства шарикового алюмоплатинового катализатора для процесса дегидрирования пропана в движущемся слое, 2015 год;

9. Разработка научно-обоснованных исходных данных по новой технологии производства катализаторов гидрокрекинга вакуумного газойля для ТЭОИ в создание современного промышленного комплекса по производству катализаторов нефтепереработки, 2015 год;

10. Разработка технологии получения высокоэффективных катализаторов нефтепереработки методом лазерного электродиспергирования и испытание их в процессах очистки газов от окиси углерода (дожига СО), гидроизодепарафинизации дизельного топлива, 2015 год.

**Другие показатели, свидетельствующие о лидирующем положении
организации в соответствующем научном направлении
(представляются по желанию организации в свободной форме)**



