

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Ивановский государственный химико-технологический университет
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
Научный совет РАН по физической химии

VII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«Актуальные проблемы теории и практики
гетерогенных катализаторов и адсорбентов»

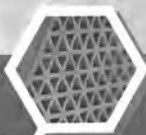
МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ

28 июня – 1 июля 2023 года

г. Суздаль, Владимирская область
2023



Катализаторы и Адсорбенты



двойную связь, адсорбируется при эндо-ориентации с образованием $\text{di-}\sigma$ и π -адсорбционных комплексов. В случае экзо-ориентации молекулы НБД и НБН координируются на Pd только одной двойной связью с образованием комплексов $\text{di-}\sigma$ и π .

Вычисленные энергии адсорбции (ΔE_{ads}) находятся в диапазоне -9.5 – -48.4 ккал/моль. При этом для молекулы НБД предпочтительна эндо-адсорбция ($\text{di-}\sigma/\text{di-}\sigma$ -эндо, $\Delta E_{\text{ads}} = -48.4$ ккал/моль), а для НБН – экзо-адсорбция ($\text{di-}\sigma$ -экзо, $\Delta E_{\text{ads}} = -27.3$ ккал/моль). Интересно отметить, что значение ΔE_{ads} для эндо-адсорбции молекулы НБД более чем в 2 раза превышает (по модулю) аналогичную величину для НБН ($\text{di-}\sigma$ -эндо, $\Delta E_{\text{ads}} = -20.8$ ккал/моль). В то же время выигрыш в энергии экзо-адсорбции молекулы НБД незначительный (~ 2.3 ккал/моль).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 23-73-00123.

Литература

- [1] Замалютин В.В., Кацман Е.А., Данюшевский В.Я., Флид В.Р., Подольский В.В., Рябов А.В. // Коорд. химия. 2021. Т. 47, № 10. С. 628–634.
- [2] Shamsiev R.S., Finkelshtein E.I. // Journal of Molecular Modeling. 2018. V. 24 (7). № 143. P. 1–8.

ВЛИЯНИЕ МОДИФИЦИРОВАНИЯ СОЕДИНЕНИЯМИ КРЕМНИЯ И ФТОРА АЛЮМОХРОМОВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА В РЕАКЦИИ ДЕГИДРИРОВАНИЯ ИЗОБУТАНА

**Шамсуллин Д.Ф., Егорова С.Р., Ламберов А.А., Ермолаев Р.В.,
Курбангалеева А.З.**

Казанский федеральный университет, Россия, г. Казань.

E-mail: Danil797001@mail.ru.

Мономеры, получаемые дегидрированием низших C_4 – C_5 -парафинов в кипящем слое алюмохромового катализатора находят широкое применение при производстве синтетических каучуков (конечная продукция – шины, резина), волокон, высокооктановых добавок к топливу. Алюмохромовый катализатор представляет собой сложную систему, состоящую из носителя ($\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$), активного компонента (оксида хрома (III), промотора (K_2O) и различных модификаторов. Активность и селективность катализатора зависит от состояния активного компонента. В зависимости от усло-

бочных реакций крекинга C_4 -углеводородов (рис. 1) и зауглероживания (рис. 2).

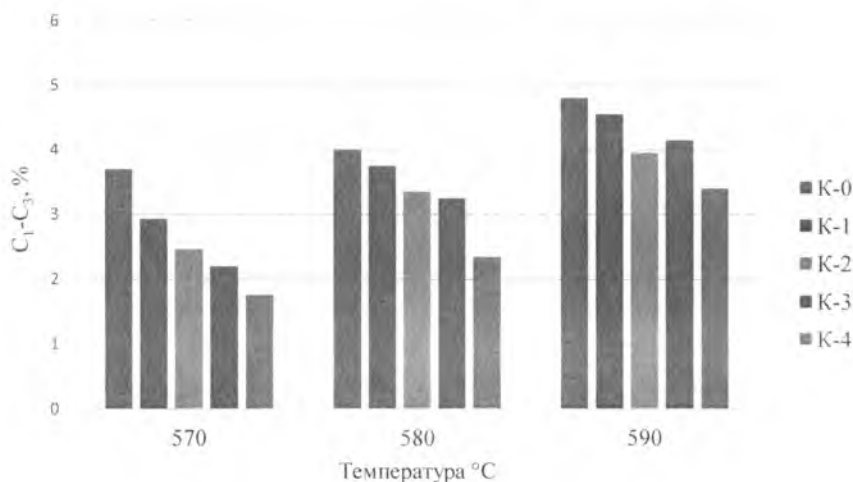


Рис. 1. Содержание углеводородов C_1-C_3 в контактном газе

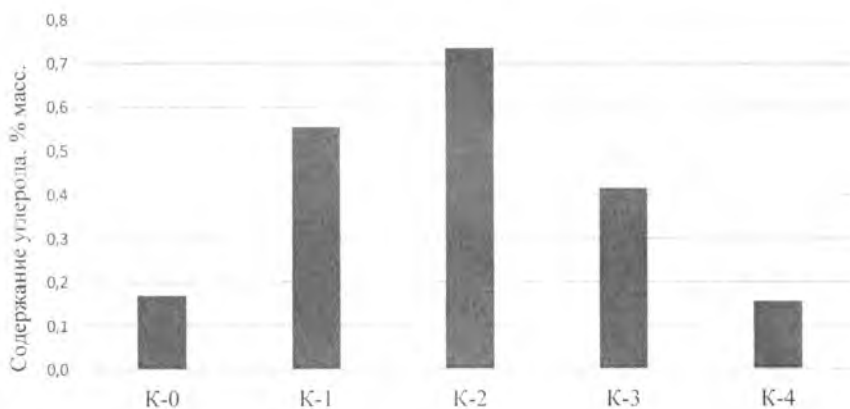


Рис. 2. Содержание углерода в катализаторах после реакции дегидрирования изобутана при $T = 590$ °C, % масс

«Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»)».

Литература

- [1] Бекмухамедов Г.Э. Модифицированный диоксидом кремния алюмохромовый катализатор дегидрирования изобутана: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук (13.05.15) / Бекмухамедов Гияз Эдуардович; КНИТУ. – Казань, 2015. – 198 с.
- [2] Егорова С.Р. Физико-химические основы синтеза микросферических алюмооксидных носителей в гидротермальных условиях для катализаторов кипящего слоя: диссертация и автореферат доктора Химических наук: 02.00.15 / Егорова Светлана Робертовна; ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет». – Казань, 2018. – 393 с.
- [3] Назимов Д.А. Исследование влияния структуры алюмооксидных носителей на активность и стабильность алюмохромовых катализаторов стационарного слоя в реакциях дегидрирования парафинов C₄: диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук (16.12.20) / Назимов Даниил Андреевич; Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН. – Новосибирск – 2020. – 133 с.

ИЗМЕНЕНИЕ ГИДРОФИЛЬНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА ГЕНЕРАЦИИ ИМПУЛЬСНОГО БАРЬЕРНОГО РАЗРЯДА

Шарапов Н.А.¹, Лихарева Н.Д.², Ковалев А.Ю.³

¹Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана.
E-mail: nash1257@yandex.ru.

²Акционерное общество «Экспериментальный завод научного приборостроения со специальным конструкторским бюро Российской академии наук» (АО «ЭЗАН»).
E-mail: lihareva@ezan.ac.ru.

³Акционерное общество «Научно-исследовательский и конструкторский институт монтажной технологии – АТОМСТРОЙ» (АО «НИКИМТ-Атомстрой»). E-mail: senya.27.mail@gmail.com.

Полимерные и композиционные материалы являются высокоэффективными как в технологическом, потребительском, так и в экономическом плане. Они нашли широкое применение во многих отраслях промышленности, в том числе и в химической. Ввиду того, что рассматриваемые материалы характеризуются низкими значениями поверхностной энергии, плохо смачиваются растворителями, плохо склеиваются, имеют низкую адгезию к напыленным слоям металлов, сохраняется актуальность проблемы придания полимерным материалам адгезионных свойств к различным веществам без изменения полимерной структуры и исходных характеристик: прочности, взаимного трения между волокнами. Анализ литературы