

### **Государственный контракт от 7 июля 2009 года № 02.740.11.0265**

на выполнение в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2011 годы научно-исследовательских работ по лоту «Проведение научных исследований коллективами научно-образовательных центров в области химии высокомолекулярных соединений, нефтехимии, катализа», шифр «2009-1.1-134-060», по теме: «**Катализ окисления и деструкции органических соединений**» (шифр заявки «2009-1.1-134-060-003»)

**Срок выполнения государственного контракта:** 2009-2011 гг.

**Статус государственного контракта** (на дату публикации информации): *завершен.*

**Цель работы (НИР):** разработка фундаментальных основ целенаправленного синтеза высокоэффективных катализаторов для процессов окислительной трансформации органических соединений, лежащих в основе базовых процессов нефтехимической и химической промышленности получения сырья и промежуточных продуктов в производстве широкого круга ценных химических соединений.

#### **Основные результаты НИР:**

Разработаны процедуры контролируемого синтеза многокомпонентных/нано-композитных катализаторов окислительных процессов (углекислотной конверсии метана, окисления формальдегида в муравьиную кислоту, окислительного аммонолиза пропана, парциального окисления глюкозы, полного окисления фенолов, фотокаталитического окисления фосфорорганических веществ), в том числе нанесенных катализаторов, обеспечивающие необходимую однородность распределения активного компонента по носителю и размеров частиц/кластеров оксидного или металлического нанесенного активного компонента.

Изучено влияние реальной структуры и микроструктуры (в том числе состава и размеров кластеров нанесенного активного компонента) на реакционную способность и каталитические свойства катализаторов в целевых реакциях. Показана высокая структурная чувствительность реакций, что проявляется как в зависимости атомной каталитической активности от размеров нанесенных кластеров золота, платины, никеля, так и от покрытия поверхности носителя – оксида титана оксиднованадиевыми кластерами. Найденные закономерности объяснены влиянием размеров частиц нанесенного активного компонента на координационное окружение центров поверхности, контролирующего эффективность активации окисляемых молекул, а также на специфику взаимодействия с носителем (эффекты эпитаксии и декорирования).

Построены кинетические модели каталитических реакций углекислотной конверсии метана, окисления формальдегида в муравьиную кислоту, окислительного аммонолиза пропана, парциального окисления глюкозы, полного окисления фенолов, фотокаталитического окисления фосфорорганических веществ с учетом воздействия реакционной среды и проведена их верификация методом математического моделирования. Полученные оценки констант базовых стадий хорошо согласуются с данными нестационарных импульсных и релаксационных экспериментов. Показано, что дезактивация катализаторов в реакциях окисления фенолов связана с окислением кластеров палладия или платины, а в реакциях фотокаталитического окисления – с укрупнением частиц платины. Автокаталитический характер реакции окисления глюкозы на нанесенных кластерах золота в водных растворах объяснен накоплением интермедиата – перекиси водорода.

Получены охраноспособные результаты интеллектуальной деятельности (РИД):

- изобретение «Композитный фотокатализатор для очистки воды и воздуха», авторы: Козлов Д.В., Селищев Д.С., Колинко П.А., Козлова Е.А. (патент РФ 2478413 от 10.04.2013)

- изобретение «Композитный адсорбционно-каталитический материал для фотокаталитического окисления», авторы: Козлов Д.В., Селищев Д.С., Колинко П.А., Козлова Е.А. (патент РФ 2465046 от 27.10.2012)
- изобретение «Катализатор и способ получения синтез-газа», авторы: Мезенцева Н.В., Сазонова Н.Н., Садыков В.А. (патент РФ 2453366 от 20.06.2012)

*По результатам работы:*

- опубликовано 14 статей в высокорейтинговых журналах (4 из списка ВАК, 10 иностранных)
- сделано 18 докладов на конференциях, школах, симпозиумах и т.п. (13 международных и 5 российских).

*Результаты НИР внедрены в образовательный процесс подготовки.*

- студентов III курса факультета естественных наук НГУ как дополнение существующего курса лекций «Химическая кинетика» в виде новых лекций по теме «Механизмы и кинетика каталитических реакций парциального окисления предельных углеводородов и кислородсодержащих органических соединений. Методы экспериментального изучения кинетики реакций»;
- студентов IV курса факультета естественных наук НГУ, специализирующихся на кафедре «Катализ и адсорбция», как дополнение существующего курса лекций «Катализ» в виде новых лекций по теме «Катализ в защите окружающей среды – природоохранительные технологии»;
- студентов 5 курса факультета естественных наук НГУ, специализирующихся на кафедре «Катализ и адсорбция», как дополнение существующего курса лекций «Катализ, окружающая среда и устойчивое развитие цивилизаций» в виде новых лекций по теме «Нетрадиционные каталитические процессы для экологии»;
- студентов III курса факультета естественных наук НГУ как дополнение практикума по курсу «Химическая кинетика» в виде новых практических работ по темам: «Фотокаталитическое окисление» и «Метод изотопных кинетических релаксаций для изучения кинетики и механизма каталитических реакций (Метод ССИТКА)».

По всем курсам созданы учебно-методические материалы.

**Достигнуты плановые значения индикаторов и показателей результативности работы**, в том числе:

- Количество кандидатов наук – исполнителей НИР, представивших докторские диссертации в диссертационный совет: 7 из 7.
- Количество аспирантов – исполнителей НИР, представивших кандидатские диссертации в диссертационный совет: 1 из 1.
- Количество студентов, аспирантов, докторантов и молодых исследователей, закрепленных в сфере науки, образования и высоких технологий (в период выполнения ПНИР): 14 из 14.

**Характеристика коллектива исполнителей НИР.** в проекте участвовали 6 докторов наук, 3 молодых кандидата наук, 8 аспирантов и 7 студентов.