

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

(ИК СО РАН)

**Отчет по основной референтной группе 8 Физическая химия, химическая физика,
полимеры**

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



057592

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;
- 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.44.1.15 «Развитие и применение современных физических методов исследования, включая режим *in situ*, для изучения строения и свойств каталитических систем на атомно-молекулярном уровне, в том числе при повышенных температурах и давлениях»

Создан инструментально-методический комплекс для проведения исследований изменения структуры и фазового состава гетерогенных катализаторов в условиях контролируемых температур, давлений и состава реакционной среды, в том числе с использованием источников синхротронного излучения (СИ) в режиме *in situ* с высоким временным раз-



решением. Развитый комплекс позволяет изучать процессы, происходящие с катализатором на всех этапах его приготовления, активации, функционирования, а также в ходе возможной регенерации. В частности, с применением развитых подходов исследованы быстропротекающие процессы восстановления наночастиц CuO в различных средах, показана лабильность структуры к наличию кислородных дефектов, установлены закономерности формирования и структурные особенности активных металлов (Cu, Co, Ag и др.) в зависимости от состава и условий восстановления их сложных оксидов. Предложен способ исследования кислородной подвижности в перовскито-подобных и сложных оксидах методом релаксации объёма, позволяющий одновременно определять как диффузионные параметры, так и структурные изменения системы. Изучено влияние Mo на каталитическую активность Ni-содержащих катализаторов гидродеоксигенации эфиров. В режиме *in situ* исследован процесс роста N-допированных углеродных нановолокон путем разложения этилен-аммиачных смесей на Ni-Cu-содержащем катализаторе. Визуализирован процесс агрегации асфальтенов с использованием методов ИК-Фурье спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения с матричным детектированием в режиме *in situ* и магниторезонансной томографии.

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 (IF=8,33).

2. Gharachorlou A., Detwiler M.D., Nartova A.V., Lei Y., Lu J., Elam J.W., Delgass W.N., Ribeiro F.H., Zemlyanov D.Y. Palladium Nanoparticle Formation on TiO₂(110) by Thermal Decomposition of Palladium(II) hexafluoroacetylacetonate // *ACS Appl. Mater. Interfaces* 6 (2014) 14702-14711 (IF=7,15).

Проект V.44.2.4 «Разработка высокоэффективных и экологически безопасных каталитических систем для жидкофазных процессов органического синтеза»

Проведен анализ современного состояния области селективного жидкофазного окисления и применения катализаторов для получения кислородсодержащих продуктов и интермедиатов органического синтеза. Разработаны новые эффективные гомогенные и гетерогенные каталитические системы для селективного (в том числе, энантиоселективного) жидкофазного окисления органических субстратов (в том числе биологически активных соединений и их предшественников) с использованием экологически безопасных окислителей (O₂, H₂O₂, t-BuOOH) и исследованы механизмы их каталитического действия. Предложены новые эффективные ванадий- и ниобий-содержащие катализаторы для селективного окисления ароматического ядра аренов и эпоксилирования C=C связей алкенов и хинонов. Найден ряд биомиметических катализаторов на основе негемовых комплексов железа, способных катализировать процессы стереоселективного эпоксилирования, а также региоселективного стереоспецифического окисления C–H групп с энергией связи до 100 ккал/моль, что приближает найденные системы по окислительной способности к природному ферменту – метанмонооксигеназе. Впервые зафиксированы каталитически



активные центры, непосредственно ведущие C–H и C=C окисление, в том числе оксокомплексы железа в формальной степени окисления +5, являющиеся прямыми синтетическими аналогами активного интермедиата I каталитического цикла цитохрома P450, и найдены взаимосвязи между особенностями их электронного строения и реакционной способностью.

3. Kholdeeva O.A. Selective Oxidations Catalyzed by Mesoporous Metal Silicates Глава монографии Liquid Phase Oxidation via Heterogeneous Catalysis: Organic Synthesis and Industrial Applications. – Wiley., 2013. – С.127-219. – ISBN 978-0-470-91552-3. DOI: 10.1002/9781118356760.ch4.

4. Ivanchikova I.D., Maksimchuk N.V., Maksimovskaya R.I., Maksimov G.M., Kholdeeva O.A. Highly Selective Oxidation of Alkylphenols to p-Benzoquinones with Aqueous Hydrogen Peroxide Catalyzed by Divanadium-Substituted Polyoxotungstates ACS Catalysis. 2014. V. 4. N 8. P. 2706-2713. DOI: 10.1021/cs500738e

Проект V.44.2.9. Фундаментальные основы разработки многофункциональных катализаторов и реакторов для получения водородсодержащего газа и товарных газовых углеводородных топлив из попутных нефтяных газов, синтетического, возобновляемого и природного сырья для устройств генерации тепла и электроэнергии

Разработаны эффективные катализаторы процессов: паровой конверсии легких углеводородов, метилаля, диметилового эфира и метанола в водородсодержащий газ; глубокой очистки водородсодержащего газа от монооксида углерода; низкотемпературной конверсии попутных нефтяных газов (ПНГ) в метано-водородные смеси. Изготовлены и испытаны микроканальные реакторы для конверсии метанола в водородсодержащий газ. Проведены успешные испытания установки для конверсии ПНГ в метан-содержащее топливо в полевых условиях. Область практического применения результатов - автономная (в том числе водородная) энергетика, а именно, энергоустановки для генерации тепла и электроэнергии на основе топливных элементов, газопоршневых и газодизельных двигателей.

5. Danilova M.M., Fedorova Z.A., Zaikovskii V.I., Porsin A.V., Kirillov V.A., Krieger T.A. Porous Nickel-Based Catalysts for Combined Steam and Carbon Dioxide Reforming of Methane Applied Catalysis B: Environmental. 2014. V. 147. P. 858–863. DOI: 10.1016/j.apcatb.2013.10.005.

V.45. НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДААННЫМИ 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 углеводородов

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 α -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.45.3.4. Научные основы синтеза оксидных наноматериалов с заданными свойствами и гетерогенных катализаторов на их основе.

При исследовании влияния способа приготовления нанесенных (Pt,Cu)/(Me-TiO₂), (Pt,Fe)/(Me-TiO₂) и (Pt,Co)/(Me-TiO₂) катализаторов (где Me - Ce, Y), а также PdNi/CeO₂ систем на формирование их микроструктуры и каталитические свойства в реакции окисления CO показано, что использование при синтезе катализаторов носителя с нанокристаллической структурой анатаза, представляющего собой высокодисперсные некогерентно сросшиеся кристаллиты анатаза, с образованием между ними межблочных границ, в которых стабилизированы ионы Ce³⁺ или Y³⁺, приводит к формированию высоко активных и термостабильных катализаторов. Присутствие в катализаторе добавок переходных элементов Fe, Cu, Co приводит к уменьшению размера частиц платины, увеличению соотношения Pt⁺/Pt⁰, и увеличению окислительной способности. Это, в свою очередь, приводит к значительному увеличению каталитической активности в реакции окисления CO. В результате проведенного исследования для низкотемпературного окисления CO предложены эффективные катализаторы (Pt,Co)/Ce-TiO₂ и PdNi/CeO₂.



3. Gulyaev R.V., Kardash T.Yu., Malykhin S.E., Stonkus O.A., Ivanova A.S., Boronin A.I. The local structure of $Pd_xCe_{1-x}O_{2-x-\delta}$ solid solutions. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 16 (2014) 13523-13539;

4. Tsydenov D.E., Shutilov A.A., Zenkovets G.A., Vorontsov A.V. Hydrous TiO_2 materials and their application for sorption of inorganic ions. // *Chemical Engineering Journal* 251 (2014) 131-137.

Проект V.45.3.5 «Научные основы синтеза новых адсорбентов и катализаторов на основе наноструктурированных форм углерода (НУМ)»

Завершены циклы работ, направленных на исследование формирования активных центров катализаторов А) синтеза многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ, биметаллические Fe-Co катализаторы) и этилена, а также Б) каталитических углеродных нановолокон (УНВ, самоорганизующиеся катализаторы Ni-M/УНВ) с одновременной переработкой промышленных отходов хлорорганического синтеза (производство винилхлорида, хлорметанов и трихлорэтилена). Разработаны основы технологии их получения с возможностью получения МУНТ и УНВ с контролируемыми свойствами (диаметр, дефектность, морфология и размеры агрегатов).

С использованием НУМ выполнен ряд работ по разработке различных типов новых катализаторов, а также композиционных материалов, модифицированных НУМ. В частности: А) предложен способ синтеза твёрдокислотных катализаторов СФП / УНВ (сульфатированный перфторполимер / углеродные нановолокна) для процесса газофазного мононитрования ароматических соединений (бензол, толуол); Б) разработаны оригинальные методы приготовления биокатализаторов, содержащих НУМ (углеродные нанотрубки, наносферы). функциональные с активностью липазы из *T. lanuginosus*, способные проводить реакции гидролиза и переэтерификации триглицеридов, а также процессы этерификации жирных кислот, входящих в состав растительных масел. В) разработана методика модифицирования цементного камня и бетона углеродными нановолокнами со значительным повышением их прочностных свойств; кроме этого Г) разработан ряд новых функциональных композиционных материалов на основе полимерных и оксидных матриц, модифицированных МУНТ.

5. A.P. Koskin, R.V. Kenzhin, A.A. Vedyagin, I.V. Mishakov “Sulfated perfluoropolymer–CNF composite as a gas-phase benzene nitration catalyst” // *Catal. Comm.*, 2014, V.53, P. 83-86. Impact Factor: 3.389

V.46. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РАЦИОНАЛЬНОГО ПРИРОДОПОЛЬЗОВАНИЯ И ОХРАНЫ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА БАЗЕ ПРИНЦИПОВ «ЗЕЛеной 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 ОБЛУ-



ЧЕННОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА И ОБРАЩЕНИЯ С РАДИОАКТИВНЫМИ ОТХОДАМИ

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

На основе разработанных методик синтеза получены монодисперсные сферические образцы полистирольных темплатов с контролируемым диаметром от 90 до 1200 нм, с использованием которых синтезирована серия оксидных (оксиды алюминия, кремния, циркония, титана) и цеолитных (кристаллические алюмосиликаты и железосиликалиты) макропористых структурированных материалов и катализаторов на их основе. Контролируемая текстура материалов, а именно регулярная структура и заданное распределение пор по размерам в диапазоне от ангстрем до мм, заданный состав и химические свойства поверхности позволили увеличить эффективность их применения в различных приложениях: процессы гидропереработки тяжелых фракций нефти, полное окисление высокомолекулярных соединений, очистка воды от радиоактивных соединений, фотокатализ, биомедицинские исследования. Например, макропористые катализаторы CoMo/Al₂O₃-Т и CoMoNi/Al₂O₃-Т показали преимущество, по сравнению с традиционными аналогами, в процессах гидрообессеривания, гидродеметаллизации, а также значительно повышенную емкость по ванадию и устойчивость к отложению кокса. Новые материалы на основе структурированного макропористого диоксида титана, допированного азотом, показали повышенную активность в реакции окисления паров ацетона под действием видимого излучения. С использованием полимерных монодисперсных аэрозольных частиц впервые в мире выполнена прямая регистрация частиц в органах при удельной дозе 0,01 мкг/г, показано накопление частиц в легких, чрезвычайно медленное выведение их из легких и проникновение частиц в печень, почки, сердце и мозг.

1. Sashkina K.A., Labko V.S., Rudina N.A., Parmon V.N., Parkhomchuk E.V. Hierarchical zeolite FeZSM-5 as a heterogeneous Fenton-type catalyst//J. Catalysis, 299 (2013) 44–52.

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.46.2.5 Разработка методов получения новых перспективных марок полиолефинов с регулируемой молекулярной структурой и заданными свойствами с использованием новых модификаций нанесённых полицентровых катализаторов

установлены характеристики нанесенных Ti/Mg катализаторов, которые требуются для получения сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) и полиэтилена высокой плотности (ПЭВП) с повышенной насыпной плотностью и регулируемыми молекулярно-массовыми характеристиками, полипропилена (ПП) и полигексена (ПГ) с высоким выходом и стереоспецифичностью, а также разработаны методы получения: (1) бимодального ПЭВП в суспензионной полимеризации этилена с улучшенной морфологией, более выраженной бимодальностью и большей однородностью распределения сомономера относительно промышленных полимеров, (2) линейного полиэтилена низкой плотности (ЛПЭНП)



в газофазной полимеризации этилена в присутствии сомономеров (1-бутена или 1-гексена) с улучшенной морфологией и составом, (3) новых марок порошков СВМПЭ, обладающих повышенными адгезионными свойствами к каучукам, (4) полигексена с требуемыми молекулярно-массовыми характеристиками и стереоспецифичностью для получения противотурбулентных присадок при транспортировке нефти.

3. Marina Nikolaeva, Mikhail Matsko, Tatiana Mikenas and Vladimir Zakharov // A comparative study of ethylene and propylene polymerization over titanium–magnesium catalysts of different composition// *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 131, Is. 16, 2014 ;

4. Semikolenova NV, Zhang W, Zakharov VA, Bryliakov KP, Sun W-H. Ethylene polymerization with homogeneous and heterogeneous catalysts based on bis(4-fluorophenyl) methyl-substituted bis(imino)pyridyliron complexes. *Journal of Applied Polymer Science*, 132, 2015, 10.1002/app.42674.

Проект V.46.4.4 «Развитие физико-химических основ каталитических и биотехнологических процессов превращения компонентов растительной биомассы в ценные продукты»

Разработаны фундаментальные основы процессов каталитической и биотехнологической переработки компонентов и продуктов лигноцеллюлозной биомассы (целлюлозы, пентановой кислоты, глюкозы, ксилозы, муравьиной кислоты) и биомассы сапропелей в ценные химические продукты (глюкозу, 5-гидроксиметилфурфурол, сорбитол), топлива (н-нонан, водород) и материалы (кормовые добавки, удобрения), а также научные основы интенсификации многофазных процессов переработки биомассы в вихревых реакторах.

5. Ayusheev A.B., Taran O.P., Seryak I.A., Podyacheva O.Yu., Descorme C., Besson M., Kibis L.S., Boronin A.I., Romanenko A.I., Ismagilov Z.R., Parmon V. N. Ruthenium nanoparticles supported on nitrogen-doped carbon nanofibers for the catalytic wet air oxidation of phenol // *Applied Catalysis B: Environmental*. – 2014. – V. 146. – P. 177-185.

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. Была произведена наработка партии Ni-Cu-Mo-катализатора (10 кг) и ее отправка в компанию VTG



(Нидерланды) для тестирования на опытной проточной установке. Модифицированные катализаторы показали стабильность более 1000 часов пилотных испытаний.

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

V.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 № V.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 цефалоспорином 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»

В 2013-2015 гг. разработан новый подход к синтезу моно- и биядерных энергоемких органометаллических соединений на основе глицина, а также нитрат-анионов, разложение которых в режиме послойного горения обеспечивает высокий выход фаз сложных оксидов ($\square 40$ нм): LaCoO_3 , LaFeO_3 , LaMnO_3 (в т.ч. допированных Sr), LaCrO_3 , La_2CuO_4 , La_2NiO_4 и др. Нарботаны опытные партии образцов, проведено их испытание в модельной реакции горения твердотопливной композиции на основе нитрогуанидина. Благодаря экзотермическому процессу разложения этих соединений с формированием нанодисперсных частиц каталитически активной фазы в зоне горения (*in situ*) достигнуто снижение уровня предельного давления по воспламенению до 1 атм., увеличение скорости газогенерации, а также равномерность и полнота сгорания модельной твердотопливной композиции

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 La_2CuO_4 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. Lenton T.N., Bercaw J.E., Panchenko V.N., Zakharov V.A., Babushkin D.E., Soshnikov I.E., Talsi E.P., Brintzinger H.H. Formation of Trivalent Zirconocene Complexes from ansa-Zirconocene-Based Olefin-Polymerization Precatalysts: An EPR- and NMR-Spectroscopic Study *Journal of the American Chemical Society*. 2013. V. 135. N 9. P. 10710–10719. DOI: 10.1021/ja403170u, CAN: 159:229689 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF= 11.444)

2. Taran O.P., Yashnik S.A., Ayusheev A.B., Piskun A.S., Prihodko R.V., Ismagilov Z.R., Goncharuk V.V., Parmon V.N. Cu-Containing MFI Zeolites as Catalysts for Wet Peroxide Oxidation of Formic Acid as Model Organic Contaminant *Applied Catalysis B: Environmental*. 2013. V. 140-141. P. 506-515. DOI: 10.1016/j.apcatb.2013.04.050, CAN: 159:139389 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF=6.007)

3. Say Z., Vovk E.I., Bukhtiyarov V.I., Ozensoy E. Influence of Ceria on the NO_x Reduction Performance of NO_x Storage Reduction Catalysts *Applied Catalysis B: Environmental*. 2013. V. 142-143. P. 89-100. DOI: 10.1016/j.apcatb.2013.04.075, CAN: 159:375748 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF= 6.007)

4. Gulyaev R.V., Slavinskaya E.M., Novopashin S.A., Smovzh D.V., Zaikovskii A.V., Osadchii D.Y., Bulavchenko O.A., Korenev S.V., Boronin A.I. Highly Active PdCeO_x Composite Catalysts for Low-Temperature CO Oxidation, Prepared by Plasma-Arc Synthesis *Applied Catalysis B: Environmental*. 2014. V. 147. P. 132-143. DOI: 10.1016/j.apcatb.2013.08.043, CAN: 160:121404 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF=7.435)

5. Starokon E.V., Parfenov M.V., Pirutko L.V., Soshnikov I.E., Panov G.I. Epoxidation of Ethylene by Anion Radicals of α -Oxygen on the Surface of FeZSM-5 Zeolite *Journal of Catalysis*. 2014. V. 309. P. 453-459. DOI: 10.1016/j.jcat.2013.11.001, CAN: 160:118881 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF=6.921)

6. Kovtunov K.V., Barskiy D.A., Salnikov O.G., Khudorozhkov A.K., Bukhtiyarov V.I., Prosvirin I.P., Koptuyug I.V. Parahydrogen-Induced Polarization (PHIP) in Heterogeneous Hydrogenations over Bulk Metals and Metal Oxides *Chemical Communications*. 2014. V. 50. P. 875-878. DOI: 10.1039/C3CC44939D, CAN: 160:117669 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF= 6.834)



7. Pechenkin A.A., Badmaev S.D., Belyaev V.D., Sobyenin V.A. Performance of Bifunctional CuO–CeO₂/γ-Al₂O₃ Catalyst in Dimethoxymethane Steam Reforming to Hydrogen-Rich Gas for Fuel Cell Feeding Applied Catalysis B: Environmental. 2015. V. 166-167. P. 535-543. DOI: 10.1016/j.apcatb.2014.12.008, CAN: 162:164043 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF=8.328)

8. Yashnik S., Ismagilov Z. Cu-Substituted ZSM-5 Catalyst: Controlling of DeNO_x Reactivity via Ion-Exchange Mode with Copper–Ammonia Solution Applied Catalysis B: Environmental. 2015. V. 170-171. P. 241-254. DOI: 10.1016/j.apcatb.2015.01.021, CAN: 162:317261 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF=8.328)

9. Korovin E., Selishchev D., Besov A., Kozlov D. UV-LED TiO₂ Photocatalytic Oxidation of Acetone Vapor: Effect of High Frequency Controlled Periodic Illumination Applied Catalysis B: Environmental. 2015. V. 163. P. 143-149. DOI: 10.1016/j.apcatb.2014.07.034, CAN: 161:437899 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF=8.328)

10. Pakharukov I.Y., Stakheev A.Y., Bekk I.E., Zubavichus Y.V., Murzin V.Y., Parmon V.N., Bukhtiyarov V.I. Concentration Hysteresis in the Oxidation of Methane over Pt/Al₂O₃: X-Ray Adsorption Spectroscopy and Kinetic Study ACS Catalysis. 2015. V. 5. P. 2795-2804. DOI: 10.1021/cs501964z, CAN: 162:515977 WOS Scopus РИНЦ Chem.Abs. (IF=9.307)

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 РНФ по теме «Исследование механизмов дезактивации нанесенных металлических катализаторов и разработка способов стабилизации наночастиц активного компонента», объем финансирования 43,4 млн. рублей, сроки исполнения 2014-2016 гг.;

2. Грант РНФ по теме «Каталитическая функционализация легких углеводородов в мягких условиях в присутствии катализаторов гидроксидной природы. Биомиметический подход», объем финансирования 15,0 млн. рублей, сроки исполнения 2014-2016 гг.;

3. Грант РНФ по теме «Разработка новых высокоселективных каталитических систем для асимметричного синтеза ключевых предшественников действующих веществ современных хиральных фармпрепаратов», объем финансирования 15,0 млн. рублей, сроки исполнения 2014-2016 гг.;



4. Грант РФФИ по теме «Новые экологически безопасные каталитические системы для стерео- и сайтселективного окислительного синтеза биологически активных соединений», объем финансирования 3,0 млн. рублей, срок исполнения 2013 г.;

5. Грант РФФИ по теме «Закономерности активации и дезактивации палладиевых катализаторов нейтрализации выхлопных газов мобильных и стационарных источников», объем финансирования 2,5 млн. рублей, срок исполнения 2013 г.;

6. Грант РФФИ по теме «Полиоксометаллаты с би(поли)ядерными активными центрами: молекулярные модели для исследования механизмов окислительного катализа и активные компоненты закрепленных катализаторов для экологически безопасного органического синтеза», объем финансирования 2,0 млн. рублей, срок исполнения 2013 г.;

7. Грант РФФИ по теме «Развитие методов структурной диагностики наноматериалов для водородной энергетики с использованием методов EXAFS, нейтронного рассеяния и квантовохимических расчетов», объем финансирования 3,0 млн. рублей, срок исполнения 2014 г.;

8. Грант РФФИ по теме «Разработка эффективных каталитических систем для энергоэффективного синтеза алкоксисиланов из спирта и кремния», объем финансирования 2,4 млн. рублей, срок исполнения 2014 г.;

9. Грант РФФИ по теме «Разработка фундаментальных принципов дизайна Fe, Co, Mn, Cu - содержащих гидроксидных катализаторов окисления воды до молекулярного кислорода на основе экспериментальных и теоретических исследований ключевых интермедиатов реакции с целью функционального моделирования фотосистемы II», объем финансирования 2,3 млн. рублей, срок исполнения 2015 г.;

10. Грант РФФИ по теме «Исследование катализаторов и механизма фотокаталитического выделения водорода под действием излучения видимого диапазона», объем финансирования 2,0 млн. рублей, срок исполнения 2015 г.

16. Гранты, реализованные на основе полевой опытной работы организации при поддержке российских и международных научных фондов. Заполняется организациями, 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 № 14.518.11.7022 19 июля 2012- 24 июля 2013 «Исследование фазового состава, локальной структуры и электронного состояния гетерометаллических и сложных оксидных наноматериалов с использованием станции EXAFS спектроскопии «Сибирского Центра Синхротронного и Терагерцового Излучения» (станция EXAFS спектроскопии)»;

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

5. Госконтракт 14.512.12.0005 28.06-29.10 2013 «Развитие сверхчувствительной неинвазивной методики измерения кинетики выделения метаболитов *helicobacter pylori* в уреазном дыхательном тесте»

6. 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»;

7. Соглашение о предоставлении субсидии 14.607.21.0053 26.08.2014-31.12.2016 «Проведение прикладных исследований в области разработки высокоэффективного каталитического метода окислительной конверсии этана в этилен»;

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

9. Соглашение о предоставлении субсидий 14.607.21.0142 02.11.2015 - 31.12.2016 «Разработка инновационного технологического процесса гидротермального разложения хлоридных растворов для комплексной технологии получения глинозема из высококремнистого сырья»;



10. Соглашение о предоставлении субсидии 14.616.21.0036 24.08.2015 - 30.06.2017 «Дизайн наноматериалов на основе никель-содержащих оксидов церия-циркония путём непрерывного синтеза в сверхкритической среде: управление каталитическими свойствами».

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 наработки 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 8-й референтной группы "Физическая химия, химическая физика, полимеры" приведен ниже:



1. Изучение возможности обезвреживания отравляющих веществ в воздухе методом быстрой адсорбции на каталитически активных наноаэрозолях», 2013 год;
2. Проведение испытаний катализаторов паровой конверсии природного газа и продуктов предриформинга дизельного топлива, а также устройств на их основе для оснащения топливных процессоров с мембранным выделением водорода, 2013 год;
3. Проведение исследований по выбору катализаторов для получения п-аминобензойной кислоты и условий осуществления процессов с их использованием, 2013 год;
4. Изучение строения и свойств катализаторов и сорбентов с использованием уникальных физико-химических методов, а также эволюции исследуемых каталитических систем в ходе лабораторных испытаний, направленных на оптимизацию каталитических процессов с их участием, 2014 год;
5. Разработка технологии прямого окисления пропана в акриловую кислоту, 2014 год;
6. Разработка технологии прямого получения этилена окислительной конденсацией метана, 2014 год;
7. Разработка опытного образца усовершенствованного центробежного флэш-реактора барабанного типа и отработка технологии центробежной термической активации гидраргиллита, 2014 год;
8. Разработка процесса микронизации оптически чистого R-изомера соли салбутамола с использованием сверхкритических флюидных технологий, 2015 год;
9. Разработка технологии приготовления и наработка опытно-промышленной партии усовершенствованного железоксидного катализатора ИК-5-1М для орто-пара превращения водорода, 2015 год;
10. Разработка инновационного технологического процесса гидротермального разложения хлоридных растворов для комплексной технологии получения глинозема из высококремнистого сырья, 2015 год.

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

**22. Другие показатели, свидетельствующие о лидирующем положении организации
в соответствующем научном направлении, а также информация, которую ор-
ганизация хочет сообщить о себе дополнительно**

Научные награды и премии, почетные звания, полученные сотрудниками научной организации в период 2013-2015 гг.:

2013 год:

1. Д.х.н. Ю.И. Аристов - Премия СО РАН и НАНБ им. В.А. Коптюга;
2. К.х.н. Н.В. Максимчук - Национальная стипендия L'OREAL – ЮНЕСКО «Для женщин в науке»;



3. К.х.н. Кузьмин А.О. - Премия IV Международного конкурса инновационных идей IQ-SNet в номинации «Инновационные решения в области газопереработки и газофракционирования»

4. Гранты Президента РФ – к.х.н. Бадмаев С.Д., к.х.н. Снытников П.В., к.х.н. Семиколонов С.В.;

2014 год:

1. Гранты Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ – академик РАН Пармон В.Н., член-корр. РАН Бухтияров В.И.;

2. Грант Президента РФ – к.х.н. Воропаев И.Н.;

2015 год:

1. Д.х.н. Яковлев В.А. - Почетная грамота Министерства образования, науки и инновационной политики Новосибирской области;

2. К.х.н. Булавченко О.А. - Национальная стипендия L'OREAL – ЮНЕСКО «Для женщин в науке»;

3. Грант Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ – академик РАН Пармон В.Н.;

4. Стипендии Президента РФ – к.х.н. А.И. Стадниченко; к.х.н. А.И. Лысиков; к.х.н. Ж.В. Веселовская; асп. А.К. Худорожков; к.х.н. Д.И. Колоколов; к.х.н. А.Д. Грекова;

Дополнительные материалы также размещены на сайте института катализа по адресу http://catalysis.ru/block/index.php?ID=1&SECTION_ID=2125

ФИО руководителя Бухтияров В. И.

Подпись _____
Дата 22.05.2017

