

Название подразделения:

Отдел физико-химических методов исследования, НТК ЯМР спектроскопия каталитических превращений углеводов

Ф.И.О. руководителя дипломной работы	Колоколов Даниил Игоревич, к.ф-м.н., с.н.с.
Координаты руководителя дипломной работы	89139063769, kdi@catalysis.ru
Тема дипломной работы	3 темы для диплома: 1. Экспериментальное и теоретическое исследование структуры и подвижности ионных жидкостей внутри пористых металл-органических каркасов 2. Молекулярная подвижность легких углеводов в микропористых металл-органических каркасах на основе аминокислотных линкеров. 3. Экспериментальное и теоретическое исследование структуры и свойств активных центров в твердых пористых катализаторах на основе металл-органических каркасов. "

Аннотация к дипломной работе:

Аннотация 1: работа направлена на изучение механизма ионного транспорта в твердых ионных проводниках для топливных элементов. Работа подразумевает сочетание экспериментальных методов твердотельной спектроскопии 2H ЯМР с теоретическими методами молекулярной динамики (MD) и квантовой химии.

Аннотация 2: Работа направлена на изучение механизма селективности разделения смесей легких углеводов на чистые компоненты при помощи наноразмерных молекулярных сит нового типа. Работа подразумевает использование методов твердотельной спектроскопии 2H ЯМР в сочетании с теоретическими методами молекулярной динамики.

Аннотация 3: работа направлена на изучение строения и силы кислотных центров в твердых кислотных катализаторах на основе пористых материалов, таких как металл-органические каркасы и цеолиты. Работа подразумевает использование методов твердотельной ЯМР спектроскопии ^1H , ^2H , ^{31}P для характеристики координации и подвижности молекулярных кислотных зондов на активных центрах ряда перспективных твердых кислотных катализаторов. Также предполагается исследование строения данных центров методами квантовой химии.