

**Название подразделения:**

Отдел физико-химических исследований на атомно-молекулярном уровне...

НТК ЯМР-спектроскопии каталитических превращений углеводородов

<b>Ф.И.О. руководителя дипломной работы</b>	Габриенко Антон Алексеевич, с.н.с., к.х.н.	
<b>Координаты руководителя дипломной работы</b>	gabrienk@catalysis.ru; a.gabrienko@g.nsu.ru, +7-903-902-70-99	
<b>Тема дипломной работы</b>	Исследование механизмов превращения C <sub>2</sub> –C <sub>4</sub> алканов и алкенов на металл-модифицированных (Cu, Ag, In, Zn, Ni) цеолитах методами ЯМР, ИКС и квантовой химии	
<i>возможные темы курсовых работ</i>	<i>- по неорганической химии (1-й курс)</i>	–
	<i>- по органической химии (2-й курс)</i>	–
	<i>- по аналитической химии (2-й курс)</i>	–
	<i>- по химической термодинамике (3-й курс)</i>	Адсорбция легких углеводородов на катионных центрах цеолитов BEA и ZSM-5, модифицированных различными металлами (Cu, Ag, In, Zn, Ni)
	<i>- по химической кинетике (3-й курс)</i>	Кинетика дейтеро-водородного (H/D) обмена C <sub>1</sub> –C <sub>4</sub> алканов на цеолитах BEA и ZSM-5, модифицированных различными металлами (Cu, Ag, In, Zn, Ni)

**Аннотация к дипломной работе:**

Цеолиты, модифицированные катионными и оксидными частицами металлов 10–13 групп, демонстрируют интересные свойства по селективному превращению C<sub>2</sub>–C<sub>4</sub> углеводородов в ценные ароматические продукты, а также по химической

активации метана в относительно мягких условиях. Для дальнейшей разработки катализаторов на основе металл-модифицированных цеолитов необходимы данные о свойствах различных металлсодержащих частиц, а также механизмах превращения углеводородов. Для получения такой информации мы используем современные методы спектроскопии ЯМР высокого разрешения в твердом теле (MAS NMR) и ИК-Фурье спектроскопии, а также проводим квантово-химические расчеты методом теории функционала плотности (DFT).

В нашей группе ведутся активные исследования по изучению механизмов активации и превращения легких ( $C_1$ – $C_4$ ) алканов и алкенов на металл-модифицированных цеолитных катализаторах. Мы изучаем цеолиты структурных типов MFI (ZSM-5) и BEA, а в качестве модифицирующих добавок используем катионные и оксидные частицы Zn, In, Ag, Cu, Ga, Ni. Нами накоплен большой опыт экспериментальной работы: получение спектров  $^1H$  и  $^{13}C$  углеводородов и поверхностных интермедиатов на различных цеолитах, кинетических параметров реакций дейтеро-водородного (H/D) обмена алканов с брэнстедовскими кислотными центрами цеолитов, кинетических параметров реакций ароматизации и гидрогенолиза алканов на цеолитах. В настоящий момент имеется возможность применения метода функционала плотности (DFT) для расчета спектральных характеристик (химический сдвиг, частоты колебаний) и стабильности возможных интермедиатов превращения алканов и алкенов на цеолитных катализаторах для уточнения природы экспериментально наблюдаемых углеводородных частиц.

Предлагаемый проект, в рамках дипломной работы, будет включать следующие основные этапы. Охарактеризование цеолитных образцов различными физико-химическими методами. Разработка методологии спектроскопических экспериментов, дизайн и создание специальных систем из стекла, работа с газовой горелкой. Работа с вакуумной техникой и реагентами, содержащими изотопы  $^2H$ ,  $^{13}C$ . Работа на спектрометрах ЯМР и ИК, обработка получаемых спектров и их анализ. Расчет химических сдвигов и частот колебаний возможных поверхностных интермедиатов, а также энергетических профилей реакций с их участием с использованием методов DFT. Разработка механизма действия металл-содержащего цеолита с учетом данных об активности разных центров и наблюдаемых интермедиатов превращения.

Для студентов мы предлагаем трудоустройство, участие в активных фундаментальных научных исследованиях с возможностью их продолжения в аспирантуре, сотрудничество с ведущими учеными из России и зарубежных стран, поддержку для участия в научных конференциях и семинарах. Для успешной работы в нашей лаборатории требуются хороший уровень знаний по химической кинетике и термодинамике, понимание основных принципов метода ЯМР и ИК-Фурье спектроскопии, квантовой химии.

Финансирование: проекты РФФ

Требования к студенту: хороший уровень знаний по химической кинетике и термодинамике, понимание основных принципов метода ЯМР и ИК-Фурье спектроскопии, квантовой химии