Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Национальная академия наук Беларуси (НАН)

Сибирское отделение Российской академии наук (СО РАН)

Международная ассоциация академий наук (МААН)

ХимРеактор-26

XXVI Международная конференция по химическим реакторам

ХимРеактор-26

27-31 октября 2025 г., Минск, Республика Беларусь

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

Новосибирск, 2025

УДК 66.023(063)
ББК Л115
I 69

I 69 XXVI Международная конференция по химическим реакторам (ХимРеактор-26), Сборник тезисов, (27-31 октября 2025 г., Минск, Республика Беларусь) [Электронный ресурс] / под редакцией член-корр. РАН, д.т.н. Носкова А.С., д.т.н. Загоруйко А.Н.
– Новосибирск: Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 2025.
– ISBN 978-5-906376-65-7
– URL: http://catalysis.ru/resources/institute/Publishing/Report/2025/CR-26_2025.pdf

В надзаг.: Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
Национальная академия наук Беларуси (НАН), Минск
Сибирское отделение Российской академии наук (СО РАН), Новосибирск
Международная ассоциация академий наук (МААН)

Научная программа конференции включает пленарные лекции, ключевые лекции, устные и стендовые доклады по следующим научным направлениям:
- **СЕКЦИЯ I.** Развитие теоретических основ процессов в химических реакторах;
- **СЕКЦИЯ II.** Разработка химических реакторов и технологических схем реакционных процессов;
- **СЕКЦИЯ III.** Химические реакторы и технологии для целевых приложений;
- **СЕКЦИЯ IV**. Новые реакторы и технологии для приложений в топливно-энергетической сфере.

УДК 66.023(063)
ББК Л115

ISBN 978-5-906376-65-7
© Институт катализа СО РАН, 2025

НАПРАВЛЕНИЯ НАУЧНОЙ ПРОГРАММЫ

СЕКЦИЯ I. РАЗВИТИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОСНОВ ПРОЦЕССОВ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ

- Инжиниринг химических реакций, основанный на фундаментальных принципах
- Кинетика химических реакций
- Тепло- и массообмен в химических реакторах
- Гидродинамика химических реакторов
- Химические процессы и проектирование реакторов: новые экспериментальные подходы, моделирование, масштабирование и оптимизация
- Математическое моделирование: многомасштабные аналитические и вычислительные исследования химических реакторов
- Современные информационные технологии в разработке катализаторов и химических (в т.ч. каталитических) реакторов: искусственный интеллект, нейронные сети, машинное обучение, большие системы)

СЕКЦИЯ II. РАЗРАБОТКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СХЕМ РЕАКЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

- Новые конструкции химических реакторов: структурированные катализаторы и реакторы, мембранные реакторы, микрореакторы, концепции реакторов, вдохновленные природой, модульные конструкции реакторов для многоцелевого использования и пр.
- Интенсификация технологических процессов и многофункциональные реакторы: совмещенные реакционно-массообменные процессы, реакторы с микроволновым/индукционным нагревом, ультразвуковые реакторы, нестационарные и сорбционно-каталитические процессы в химических реакторах и пр.
- Промышленная безопасность при проектировании и эксплуатации реактора

СЕКЦИЯ III. ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКТОРЫ И ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ЦЕЛЕВЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

- Современные вызовы и направления развития инжиниринга химических реакторов
- Охрана окружающей среды и утилизация отходов
- Реакторы и катализаторы для получения полимеров и других новых материалов с заданными свойствами
- Реакторы и катализаторы для переработки биомассы и возобновляемого сырья в ценные химические вещества
- Инжиниринг биохимических, электрохимических и фотохимических реакций
- Реакторы, катализаторы и технологии для получения наноструктурированных углеродных материалов
- Улавливание и утилизация CO_2

СЕКЦИЯ IV. НОВЫЕ РЕАКТОРЫ И ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЙ В ТОПЛИВНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СФЕРЕ

- Новые реакторы и каталитические технологии: для производства топлив из традиционного, нетрадиционного и возобновляемого сырья; для переработки попутного нефтяного газа и газового конденсата; для переработки нефти и природного газа и др.
- Реакторы, катализаторы и технологии для гидрогенизационной переработки углеводородного сырья
- Перспективные реакторы, катализаторы и технологии для производства водорода
- Реакторы, катализаторы и процессы для производства, преобразования и хранения энергии
- Топливные элементы
- Солнечные химические реакторы

СОПРЕДСЕДАТЕЛИ КОНФЕРЕНЦИИ

Руководитель научного направления «Промышленный катализ» Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, член-корр. РАН, д.т.н., профессор
Носков Александр Степанович

Директор Института тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, академик Беларуси, д.ф.-м.н.
Пенязьков Олег Глебович

http://chemreactor.org

НАУЧНЫЙ КОМИТЕТ

Академик РАН, д.х.н. Пармон Валентин Николаевич, председатель	*Председатель СО РАН, Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Академик НАН Беларуси, д.х.н., профессор Агабеков Владимир Енокович	*Институт химии новых материалов НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь*
Professor Jorge Ancheyta	*Mexican Petroleum Institute, Mexico City, Mexico*
Professor Ahmet Kerim Avci	*Bogazici University, Istanbul, Turkey*
К.х.н. Варфоломеев Михаил Алексеевич	*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Республика Татарстан. Российская Федерация*
Член-корреспондент НАН Беларуси, д.ф.-м.н. Гринчук Павел Семёнович	*Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*
К.т.н. Данилова-Третьяк Светлана Михайловна	*Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*
Д.т.н. Загоруйко Андрей Николаевич	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Член-корр. РАН, д.х.н. Зайков Юрий Павлович	*Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
Д.т.н. Клейменов Андрей Владимирович	*ПАО «Газпром нефть», Санкт-Петербург, Россия*
Академик РАН, д.ф.-м.н. Маркович Дмитрий Маркович	*Институт теплофизики имени С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия*
Д.х.н. Лавренов Александр Валентинович	*Центр новых химических технологий ИК СО РАН, Омск, Россия*
Академик РАН, д.х.н. Максимов Антон Львович	*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*
Д.ф.-м.н. Марченко Михаил Александрович	*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск, Россия*
Professor Evgeny Rebrov	*University of Warwick, Coventry, United Kingdom*
Д.х.н. Слинько Марина Михайловна	*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия*
Член-корр. РАН, д.ф.-м.н. Стрижак Павел Александрович	*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*
Д.х.н. Таран Оксана Павловна	*Институт химии и химической технологии СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*
Д.х.н. Флид Виталий Рафаилович	*Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Д.т.н. Загоруйко Андрей Николаевич, председатель	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Д.т.н. Абиев Руфат Шовкетович	*Санкт-Петербургский технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
Д.х.н. Брук Лев Григорьевич	*Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
К.т.н. Верниковская Надежда Викторовна	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Д.ф.-м.н. Губайдуллин Ирек Марсович	*Институт нефтехимии и катализа, Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация*
К.т.н. Зажигалов Сергей Валерьевич	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Д.т.н. Ивашкина Елена Николаевна	*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*
К.х.н. Казаков Максим Олегович	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
К.т.н. Кленов Олег Павлович	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
К.х.н. Климов Олег Владимирович	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Д.х.н. Козловский Роман Анатольевич	*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
К.ф.-м.н. Козначеев Иван Алексеевич	*Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*
Д.х.н. Кузнецов Борис Николаевич	*Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск, Россия*
К.х.н. Кузьмин Андрей Олегович	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
К.ф.-м.н. Лашина Елена Александровна	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Д.т.н. Минкина Валентина Григорьевна	*Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*
Д.ф.-м.н. Рабинович Оскар Соломонович	*Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь*
Д.х.н. Решетников Сергей Иванович	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Д.х.н. Синев Михаил Юрьевич	*ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия*
Д.х.н. Снытников Павел Валерьевич	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
Д.х.н. Сульман Михаил Геннадьевич	*Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия*
К.т.н. Чумаченко Виктор Анатольевич	*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*

ГЕНЕРАЛЬНЫЙ ПАРТНЕР КОНФЕРЕНЦИИ

ПАО «ГАЗПРОМ НЕФТЬ», Санкт-Петербург

ПАРТНЕРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

ООО «НПК «Синтез», Барнаул

ООО «КИНТЕХ ЛАБ», Москва

ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ

ПЛ-1

ПРОВЕДЕНИЕ ЭНДОТЕРМИЧЕСКИХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В РЕАКТОРАХ С БЕССТЕНОЧНЫМ НАГРЕВОМ КАТАЛИЗАТОРОВ: ОПЫТ ИНСТИТУТА КАТАЛИЗА им. Г.К. БОРЕСКОВА СО РАН

Пармон В.Н., Болотов В.А.

ФИЦ «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН», Новосибирск, Россия
vparmon@catalysis.ru

Институт катализа СО РАН на протяжении многих лет занимается разработкой катализаторов и научных основ технологий разнообразных эндотермических каталитических процессов, предназначенных как для получения востребованных химических продуктов, так и для осуществления преобразования различных доступных видов энергии в энергию химических энергоносителей. Существенно, что ряд практически интересных и сопровождающихся увеличением энтропии эндотермических превращений при определенных температурах может быть термодинамически разрешенным и осуществляться в режиме термически инициированного катализа при условии передачи необходимого количества энергии к катализатору. При этом скорость такой эндотермической реакции и, как следствие, основной параметр процесса – его удельная, в пересчете на объем катализатора, энергонапряженность – определяются в основном скоростью подвода теплоты к функционирующему катализатору, а не измеряемой стандартными методиками активностью самого катализатора.

При использовании традиционных приемов подвода теплоты через, например, металлическую стенку реактора результирующая скорость процесса ограничивается величиной передаваемого через стенку теплового потока, плотность которого в случае конвективного теплосъема газом обычно не может превысить нескольких Вт на кв. см стенки.

В то же время экспериментальные исследования преобразования сконцентрированной световой энергии в реакции паровой конверсии метана показали, что проведение реакции в прозрачном для света кварцевом реакторе, а не в стандартном металлическом, обеспечивает при использовании одного и того же катализатора многократно более высокую энергонапряженность, поскольку в первом случае нагрев катализатора обеспечивается попаданием на его поверхность сконцентрированного света непосредственно.

ПЛ-1

Возможность многократного повышения удельной энергонапряженности эндотермического процесса была подтверждена в условиях прямого нагрева катализатора пучком ускоренных электронов, диссипирующих свою энергию внутри гранул катализатора. При этом на стандартных катализаторах паровой конверсии метана была достигнута удельная энергонапряженность процесса преобразования энергии ускоренных электронов в химическую энергию синтез-газа до значений 200 кВт/дм^3 катализатора и даже выше. Это значение сопоставимо и/или существенно превышает энергонапряженность активных зон стандартных атомных реакторов.

Идея перспективности нагрева катализатора за счет диссипации энергии ионизирующего излучения привела к разработке композитных материалов на основе гранул ядерного топлива, объединяющих в одной грануле процесс выделения энергии при делении ядер и процесс превращения диссипирующей энергии осколков деления в энергонасыщенную смесь водорода и CO.

На основании результатов описанных экспериментов предложена перспективная для многих приложений схема ICAR (Immediate Catalytic Accumulation of Radiation Energy), обеспечивающая «прямое» преобразование энергии деления ядер в химическую энергию энергонасыщенных продуктов эндотермического превращения.

Прямой избирательный бесстеночный нагрев только катализаторов подаваемым в реактор электромагнитным СВЧ-излучением или переменным магнитным полем позволяет осуществлять эндотермические процессы в трудно реализуемых иным способом условиях. Например, можно избирательно нагревать катализатор до высоких температур в жидкой фазе исходного субстрата, что обеспечивает возможность закалки первичных продуктов термического крекинга субстрата. Так, при использовании в качестве субстрата предельных углеводородов фракции C12+ удается получить в одну стадию и с высоким выходом высоковостребованные длинноцепочечные альфа-олефины.

Благодарность

Работа по исследованию процессов в условиях нагрева катализаторов СВЧ-излучением выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 17-73-30032

ПЛ-2

РАЗВИТИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ В УСЛОВИЯХ ИЗМЕНЕНИЯ КЛИМАТА И РАЗРУШЕНИЯ ОЗОНОВОГО СЛОЯ ЗЕМЛИ

Алексеенко С.В.

Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск, Россия
asvasus@yandex.ru

Энергетика – базис экономики любой страны вне зависимости от технологического уклада. Однако сегодня возникла беспрецедентная ситуация, когда необходимо безотлагательно принимать принципиальные решения по дальнейшему развитию мировой энергетики. Причины обусловлены изменениями климата и разрушением озонового слоя Земли, преобладающий вклад в которые вносит деятельность человека, прежде всего, в сфере энергетики. В докладе дан анализ существующей ситуации и сформулированы следующие заключения.

Изменения климата: Обнаружен рост температуры поверхности Земли, который связывается с глобальным потеплением. Его главной причиной является антропогенная эмиссия парниковых газов – прежде всего, CO_2. Основной вклад вносит энергетика на органическом топливе. При любых реальных сценариях развития энергетики глобальное потепление продолжится и уровень в 1,5 °C будет достигнут в середине столетия, но далее прогнозы расходятся, и результат может зависеть от действий человеческого сообщества. Парижское соглашение не может быть реализовано в полной мере, но глобальная декарбонизация энергетики неизбежна.

Разрушение озонового слоя Земли: Показано, что антропогенные выбросы ОРВ (озоноразрушающих веществ) типа фреонов приводят к разрушению озонового слоя Земли и образованию озоновых «дыр» в Антарктике. Показано, что разрушение озонового слоя и глобальное изменение климата взаимосвязаны, поскольку озоноразрушающие вещества и их заменители являются парниковыми газами. Озон также является парниковым газом. И наоборот, парниковые газы сильно влияют на содержание озона в стратосфере.

Снижение выбросов ОРВ благодаря соблюдению Монреальского протокола позволяет избежать глобального потепления примерно на 0,5-1 °C к 2050 г. по сравнению с экстремальным сценарием с неконтролируемым увеличением ОРВ

на 3-3,5% в год. Соблюдение принятой в 2016 году поправки Кигали к Монреальскому протоколу, которая требует поэтапного сокращения производства и потребления некоторых гидрофторуглеродов (ГФУ) в климатических целях, по оценкам, позволит избежать потепления на 0,3-0,5 °С к 2100 году.

Энергетические технологии: Необходимо последовательно осуществлять декарбонизацию энергетики со скоростями, не превосходящими экономические возможности страны. В сфере энергетики на органическом топливе необходимо, прежде всего, повышать эффективность производства энергии. Радикальным подходом является применение технологий с секвестированием CO_2. В числе наиболее перспективных – цикл Аллама, предусматривающий сжигание топлива в кислороде и использование сверхкритического CO_2 в качестве рабочего тела.

Генеральное направление в угольной теплоэнергетике связано с глубокой переработкой угля, прежде всего, газификацией - неполным сжиганием угля и получением синтез-газа (смесь H_2 и CO). Однако, технологии газификации оправданы только в случае получения конкретных химических продуктов (а это углехимия). Альтернативными безуглеродными технологиями являются атомная энергетика и возобновляемые источники энергии (ВИЭ). В числе наиболее перспективных ВИЭ видится геотермальная энергетика с переходом в будущем на глубинное тепло. Поскольку практически все основные рабочие тела (типа фреонов) в тепловых машинах являются либо озоноразрушающими, либо парниковыми (или то и другое), то существует принципиальная проблема выбора рабочих веществ для холодильной техники, тепловых насосов, органического цикла Ренкина. По этой причине, на переходный период рассматриваются такие озонобезопасные фреоны (но обладающие парниковым эффектом) как R134a, R245fa, а в будущем – фреоны нового поколения без парникового эффекта. Наиболее подходящими рабочими телами (неводного типа) с точки зрения озонобезопасности и парникового эффекта являются давно известные природные агенты: углеводороды типа пропана и изобутана; углекислый газ; аммиак. У каждого свои особенности, в частности, токсичность и горючесть. Аммиак выглядит особо перспективным, поскольку освоен в глобальных масштабах, кроме того, он является эффективным топливом для топливных элементов и представляет собой соединение, которое можно считать одним из лучших способов хранения водорода.

ПЛ-3

КАТАЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В РЕАКТОРАХ С ПСЕВДООЖИЖЕННЫМ СЛОЕМ: МОДЕЛИ ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА

Рабинович О.С.[1], Кузнецов В.Л.[2], Мосеенков С.И.[2], Малиновский А.И.[1], Лях М.Ю.[1]

[1]Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь, orabi@hmti.ac.by
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
kuznet@catalysis.ru

Многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) в силу своих уникальных свойств являются одним из наиболее востребованных современных наноматериалов. К 2030 г. прогнозируется увеличение их производства до 40-50 тыс тонн в год, что обусловлено быстро расширяющимся рынком металл-ионных аккумуляторов, суперконденсаторов, композиционных материалов для машиностроения, автомобильной и аэрокосмической промышленности. Наиболее высокопроизводительные процессы синтеза МУНТ реализованы с использованием реакторов с псевдоожиженнм слоем (ПС).

В докладе представлена совокупность моделей синтеза МУНТ в реакторах с ПС, разработанных в результате многолетнего сотрудничества белорусских и российских учёных. Специфика каталитического CVD синтеза МУНТ из этилена характеризуется рядом существенных особенностей по сравнению с традиционными процессами химии: 1) значительным увеличением объема продукта (МУНТ) по сравнению с загружаемым катализатором (до 300-400 раз); 2) низкой теплопроводностью ПС из МУНТ (0.5-0.7 Вт/(м·К)); 3) достаточно высоким адиабатическим разогревом реакции ($\Delta H \approx$ -40 кДж/моль C_2H_4); 4) низкой плотностью ПС из МУНТ (~ 25-50 г/л) и высокой когезией образующихся первичных агломератов МУНТ (число Бонда – максимальная сила когезии двух частиц/вес частицы > 10). Используемый нами подход базируется не на объединении разномасштабных элементарных моделей в глобальное цифровое описание процесса, а на углубленном анализе моделей низкого уровня, с помощью которых находятся оптимальные конструктивные и технологические параметры процесса.

В ИК СО РАН выполнен полный цикл работ, направленный на разработку катализаторов синтеза МУНТ, на исследование процессов их активации непосредственно в реакционной смеси, на получение формальных кинетических данных о протекающих процессах [1]. Это позволило создать модели роста

нанотрубок и формирования латеральных отложений на внешних стенках трубок [1, 2], а также получить сведения о влиянии состава и морфологии катализаторов на характеристики получаемых МУНТ [3]. В частности, установлена взаимосвязь между свойствами катализатора и адгезионными характеристиками первичных агломератов МУНТ, что позволило решить важную проблему предотвращения потери устойчивого псевдоожижения, происходящей в результате образования и укрупнения вторичных агломератов на первом этапе роста нанотрубок на активированном катализаторе [3].

Модели гидродинамики и тепло- массообмена составляют макрокинетическую группу в общем описании процесса. Их можно подразделить на континуальные (1D модель массопереноса химических компонентов по высоте реактора [1] (использует модели химической кинетики) и 2D модель теплопередачи внутри него [2]), и дискретную численную модель гидродинамики слоя частиц с высокой когезией (CFD-DEM-модель). С помощью этих моделей получены результаты, имеющие определяющее значение для разработки конструкции и выбора рабочих режимов реактора синтеза МУНТ: 1) с помощью рассчитанных инженерных диаграмм проведена оптимизация реактора каталитического синтеза МУНТ в ПС по количеству нанотрубок, загружаемых в начале цикла синтеза, и условиям для перезагрузки реактора, показавшая достижимость производительности процесса 500-520 г/(м^2·мин); 2) установлено ограничение на увеличение диаметра реактора, налагаемое условием сохранение необходимой однородности температурного поля в нём; 3) определены требования к характеристикам катализатора и его количеству, загружаемому в реактор, обеспечивающие сохранение однородного ПС в процессе.

Список литературы

[1] O.S. Rabinovich, V.A. Borodulya, A.N. Blinova, V.L. Kuznetsov, A.I. Delidovich, D.V. Krasnikov. Simulation of transient processes of the catalytic synthesis of carbon nanotubes in a fluidized bed // *Theor. Foundations of Chem. Eng.*, 2014, Vol. 48, Pp. 1-12.

[2] O. Rabinovich, A. Tsytsenka, V. Kuznetsov, S. Moseenkov, D. Krasnikov. A model for catalytic synthesis of carbon nanotubes in a fluidized-bed reactor: Effect of reaction heat // Chem. Eng. J., 2017, Vol. 239, Pp. 305-311.

[3] V.L. Kuznetsov, S.I. Moseenkov, A.V., Zavorin, G.V. Golubtsov, V.V. Goidin, O.S. Rabinovich, A.I. Malinouski, M.Yu. Liakh. Influence of catalyst characteristics on the formation of MWCNT agglomerates during the synthesis in a fluidized bed reactor // Chem. Eng. J., 2022, Vol. 477, 137391.

ПЛ-4

ИННОВАЦИОННЫЕ РЕШЕНИЯ В ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ ЭКСТРАКЦИИ

Вошкин А.А.

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, 119991, Москва, Россия, aav@igic.ras.ru

Гидрометаллургические процессы извлечения, разделения и очистки веществ являются неотъемлемой частью большинства технологий переработки минерального и техногенного сырья. Вследствие этого разработка химико-технологических процессов разделения компонентов жидких смесей является задачей, актуальность которой только возрастает. Одним из наиболее доступных, универсальных и эффективных методов извлечения, разделения и очистки веществ является жидкостная экстракция и гибридные процессы на её основе.

К настоящему времени сформирован значительный научный задел в части разработки перспективных экстракционных систем на основе ионных жидкостей и глубоких эвтектических растворителей, которые дают новые степени свободы в управлении селективностью экстракционного разделения.

В представленном докладе будут изложены наиболее перспективные решения в химии и технологии экстракции. Рассмотрены особенности таких современных классов экстрагентов как бинарные экстрагенты [1], ионные жидкости [2], глубокие эвтектические растворители [3], а также двухфазные водные системы. Будут представлены современные аппаратурные решения для производственных задач [4,5] и решения проблем, связанных с масштабированием этих процессов.

Список литературы

[1] Холькин А.И., Белова В.В., Вошкин А.А. Бинарная экстракция. Теория и практика. – М.: Техносфера, 2021. – 354 с.

[2] Kozhevnikova A.V., Zinov'eva I.V., Milevskii N.A., Zakhodyaeva Yu.A., Voshkin A.A. Journal of Molecular Liquids. 2023, 390, 123073.

[3] Zinov'eva I.V., Chikineva T.Yu., Zakhodyaeva Yu.A., Voshkin A.A. Journal of Molecular liquids, 2025, 423, 126984.

[4] Kostanyan A.A., Voshkin A.A., Belova V.V. *Molecules*, 2020, ***25*(24)**, 6020.

[5] Kostanyan A.E., Voshkin A.A. *Journal of Chromatography A*, 2024, **1713**, 464534.

Благодарность

Исследование в части экстракции глубокими эвтектическими растворителями выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-13-00387, https://rscf.ru/project/20-13-00387/.

ПЛ-5

EFFICIENT AND GREENER CATALYTIC REACTORS AND PROCESSES VIA INTENSIFICATION

Ahmet K. Avci

Department of Chemical Engineering, Bogazici University, Bebek 34342, Istanbul, Turkiye, avciahme@bogazici.edu.tr

Increasing concerns about global warming induced by greenhouse gas emissions and fossil-fuel-based energy consumption have boosted efforts to investigate alternative technologies for the synthesis of fuels and chemicals. These technologies consider the incorporation of renewable energy, which varies by geography and location that may lack infrastructure. Off-grid operability, together with the scale and intermittent nature of renewable power, requires catalytic reactors that can run profitably at scales less than two orders of magnitude of their conventional counterparts. The so-called intensified catalytic reactors can meet this condition.

Reactor intensification can be realized by increasing the surface area-to-volume ratio and/or by integrating a unit operation that improves the extent of the catalytic reaction. The application of these principles to catalytic reactors and the resulting changes in their performance metrics form the scope of this talk. In the first part, the use of CO_2 as the carbon source for the production of Dimethyl Ether (DME) will be described. The impacts of integrated adsorption, membrane separation, and structuring/miniaturizing the flow paths as intensification strategies on CO_2 conversion and DME yield will be explained. The reverse water-gas shift reaction to make synthesis gas from CO_2 will be the scope of the second part of the talk. In addition to catalysis and adsorption, and catalysis and membrane separation, electrification by induction will be shown as a method to intensify the production of CO from CO_2. The third part of the talk will be about the green NH_3 synthesis. The capabilities of reactor intensification in overcoming the thermodynamic restrictions of NH_3 synthesis at mild conditions will be demonstrated. The possibilities of further performance improvement, namely the NH_3 productivity of the catalyst, by tuning the reactor architecture, will be discussed. An overview of synthesizing a process that is centralized around an intensified reactor for small-scale green NH_3 production, and its economic analysis will be outlined. The talk is expected to highlight the significance of intensification in increasing the efficiency and operational flexibility of the catalytic reactors, making them profitably operable at capacities compatible with those of renewable energy supply.

Acknowledgements

AKA acknowledges the projects TUBITAK-223M302 and BAP-20181 for providing financial support.

КЛЮЧЕВЫЕ ЛЕКЦИИ

КЛ-1

ГАЗОГИДРАТНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Стрижак П.А., Шлегель Н.Е., Школа М.В.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия, pavelspa@tpu.ru

Газовые гидраты представляют собой твердые кристаллические соединения, образованные молекулами воды и газа в условиях высокого давления и низкой температуры [1]. Термобарические условия образования гидрата различны и зависят от газа, из которого синтезируется гидрат. В природе гидрат встречается в районах вечной мерзлоты и на дне океана, где созданы условия для его стабильности [2]. Природный газовый гидрат состоит в основном из метана. Это делает его востребованным в сфере энергетики. Запасы природного газа в гидратных отложениях превышают известные источники углеводородов [3]. Использование гидратного газа в качестве топлива поспособствует снижению антропогенных выбросов, поскольку при сжигании метана образуется меньше углекислого газа, чем при сжигании иного углеродного топлива, к тому же пары воды, содержащиеся в гидратном газе, приводят к снижению температуры дымовых газов.

Газовые гидраты обладают большим потенциалом и в других областях применения: пожаротушение, транспортировка и хранения газа, сепарация газов, разделение эмульсий, опреснение и очищение воды. С помощью газовых гидратов можно осуществлять транспортировку и хранение природного газа. Один объем гидрата способен заключить в себе до 180 объемов природного газа [4]. Для реализации этой технологии требуются более низкое давление и высокая температура, чем для транспортировки газа в сжатом или сжиженном состоянии. Газовый гидрат обладает эффектом самоконсервации (покрытие поверхности гидрата слоем льда), который позволяет ему находится в стабильном состоянии даже при атмосферном давлении [5], что делает его транспортировку намного безопаснее, чем сжатого газа.

В пожаротушении могут применяться гидраты инертных газов (азота, диоксида углерода, аргона). При попадании такого гидрата в очаг возгорания под действием высоких температур начинается процесс диссоциации, сопровождающийся выделением инертного газа. Инертный газ вытесняет из очага возгорания окислитель, что приводит к срыву пламени [6]. Процесс

диссоциации и дальнейшее испарение воды способствуют отводу теплоты и снижению температуры горящей поверхности до точки ниже температуры воспламенения. Такой синергетический эффект газового гидрата делает его перспективным средством ликвидации возгораний.

Процесс синтезирования газового гидрата позволяет проводить следующие операции: сепарацию природного и дымовых газов, разделение эмульсий и опреснение или очищение воды [7, 8]. Процесс сепарации основан на том, что все газы имеют различные термобарические условия гидратообразования. Это позволяет синтезировать гидрат только из определенных газов, тем самым отделяя их от смеси. С помощью синтезирования газового гидрата можно разделять водонефтяные эмульсии. Из воды образуется гидрат, а нефть останется в осадке. Этот способ дешевле, экологичнее и быстрее традиционных способ отчистки нефти. Также в процессе синтезирования гидрата получают очищенную воду. Если гидрат синтезировать из загрязненной или морской воды, все примеси останутся в осадке. После извлечения гидрата и его диссоциации получают отчищенную и опресненную воду.

Таким образом, газовые гидраты представляют собой перспективный ресурс, который может быть использован в различных отраслях.

Список литературы

[1] Wei N. et al. Classification of natural gas hydrate resources: Review, application and prospect // Gas Sci. Eng. 2024. Vol. 124. P. 205269.

[2] Nakane R. et al. Phase equilibrium condition measurements in carbon dioxide hydrate forming system coexisting with seawater // J. Chem. Thermodyn. Academic Press, 2021. Vol. 152. P. 106276.

[3] Wei N. et al. Classification of natural gas hydrate resources: Review, application and prospect // Gas Science and Engineering. – 2024. – С. 205269.

[4] Misyura S.Y. Comparing the dissociation kinetics of various gas hydrates during combustion: Assessment of key factors to improve combustion efficiency // Appl. Energy. Elsevier Ltd, 2020. Vol. 270. P. 115042.

[5] Ravichandran S. et al. Greenhouse gas (GHG) transport as solid natural gas (SNG) hydrate Pellets: Assessment of Self-Preservation & dissociation controls // Fuel. 2024. Vol. 357. P. 129545.

[6] Hatakeyama T. et al. Fire Extinction Using Carbon Dioxide Hydrate // Ind. \& Eng. Chem. Res. 2009. Vol. 48, № 8. P. 4083–4087.

[7] Han G. et al. Hydrogen separation from hydrogen-compressed natural gas blends through successive hydrate formations // Chem. Eng. J. 2024. Vol. 483. P. 149409.

[8] Nallakukkala S., Lal B. Seawater and produced water treatment via gas hydrate: Review // J. Environ. Chem. Eng. Elsevier, 2021. Vol. 9, № 2. P. 105053.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Соглашение № 075-15-2024-543.

КЛ-2

МЕТОДЫ ЗАЩИТЫ КАТАЛИЗАТОРОВ В ПРОЦЕССАХ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ

Решетников С.И.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
reshet@catalysis.ru

Нефтепереработка – это комплекс технологических процессов, направленных на разделение и обработку нефти для получения полезных нефтепродуктов, прежде всего различных видов топлива (бензина, дизельного, авиационного и т. д.) и сырья для последующей химической переработки. Основными каталитическими процессами на предприятиях нефтепереработки являются: крекинг, риформинг и гидропереработка (гидроочистка) различных дистиллятных нефтяных фракций. Для осуществления этих процессов используются алюмосиликатные и цеолитные катализаторы (крекинг), катализаторы, содержащие платину, палладий (риформинг) или никель и молибден (гидроочистка) нанесенные на оксид алюминия.

В процессе эксплуатации катализаторы нефтепереработки подвержены дезактивации. Одной из основных причин дезактивации является отложение кокса, что требует комплексных методов защиты для сохранения активности, в частности, оптимизацию технологических параметров (контроль температурного режима и применение среды с повышенным содержанием водорода). Это позволяет подавлять побочные реакции крекинга и закоксовывание активных центров на поверхности катализаторов.

Увеличение в общем сырьевом балансе нефтеперерабатывающей отрасли России доли тяжелых сернистых и высокосернистых нефтей приводит, к тому, что растет содержание металлов – каталитических ядов (Si, As, Ni, V, Fe и др.). Это является серьезной проблемой, приводящей к необратимой дезактивации катализаторов гидропереработки (гидрокрекинг, гидроочистка). Для защиты катализаторов используются пакеты сорбционно-каталитических материалов – защитные слои, которые загружаются послойно сверху основного катализатора. Слои этих материалов ранжированы по размеру зерен (10÷1.5 мм.) и активности. Защитные слои должны обеспечивать равномерное распределение газо-сырьевого потока и предохранять основной катализатор как от каталитических ядов, так и от загрязнения механическими примесями.

КЛ-2

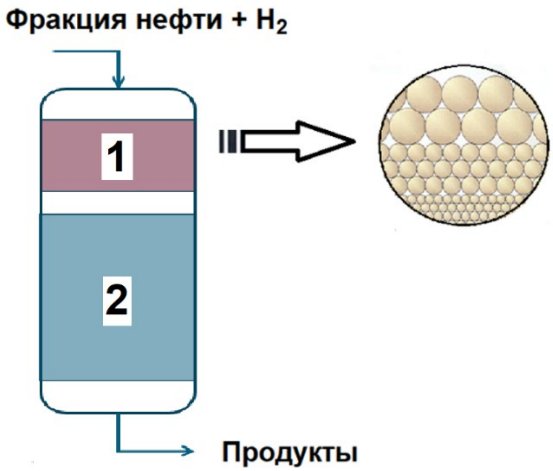


Рисунок. Схематическое изображение реактора гидроочистки с катализаторами защитного слоя, ранжированными по размеру зерен

В последние годы в России ведутся обширные исследования, направленные на разработку катализаторов, как основного, так и защитных слоев, что связано с переходом нефтеперерабатывающей отрасли на катализаторы отечественного производства.

В лекции представлен обзор подходов и методов защиты катализаторов в процессах нефтепереработки (крекинг, риформинг, гидропереработки). Основное внимание уделено вопросам исследования процесса сорбционно-каталитической очистки нефтяных фракций от каталитических ядов и механических примесей в процессах гидроочистки. В заключительной части лекции приведены результаты экспериментов и моделирования динамики изменения содержания кремния (Si) в катализаторах защитного слоя, разрабатываемых в Институте катализа СО РАН в последние годы. Результаты математического моделирования получены на основе совместного применения методов вычислительной гидродинамики (CFD-расчеты) и кинетических данных.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта No 23-19-00214).

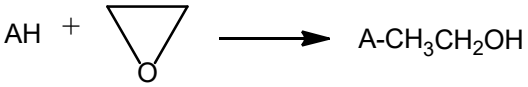
КЛ-3

УПРАВЛЕНИЕ СЕЛЕКТИВНОСТЬЮ В ПРОМЫШЛЕННЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ ОКСИЭТИЛИРОВАНИЯ

Козловский Р.А., Козловский И.А., Сучков Ю.П.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Москва, Россия
kozlovskii.r.a@muctr.ru

Доклад посвящен обобщению фундаментальных и прикладных исследований, накопленных научно-педагогической школой Н.Н. Лебедева (МХТИ/РХТУ им. Д.И. Менделеева), начиная с 60-х годов прошлого столетия, в области механизма, кинетики, катализа и оптимизации промышленного синтеза органических продуктов, получаемых по реакции присоединения оксида этилена к веществам, имеющим подвижный атом водорода (АН):



Сходный механизм реакций присоединения оксида этилена к разным протонодонорным реагентам (карбоновым кислотам, фенолам, спиртам, воде) при катализе основаниями и нуклеофилами позволил получить обобщенное кинетическое уравнение для этих реакций. Учитывая взаимосвязь кислотности субстрата и основности сопряженного с ним основания (катализатора) с реакционной способностью субстрата и каталитической активностью, было получено корреляционной уравнение, позволяющее количественно оценивать предельную степень конверсии оксиэтилируемого субстрата (АН) для достижения требуемой селективности по продукту моноприсоединения.

Показан подход к кинетическому моделированию и оптимизации процессов оксиэтилирования на примере промышленно-значимых реакций синтеза моноэтиленгликоля, ацетатов этиленгликоля, феноксиэтанола, холинхлорида.

КЛ-4

НЕКАТАЛИТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ НЕФТЯНЫХ ОСТАТКОВ И ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЕЙ

Теляшев Э.Г.

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация
gmchtp@mail.ru

Некаталитические технологии – значительный и наиболее многотоннажный блок процессов переработки нефти. Условно их можно разделить на три группы:

1) неконверсионные процессы разделения углеводородов нефти на основе различий в температурах кипения (атмосферная и вакуумная ректификация нефти и нефтепродуктов) или различной растворимости в сжиженных газах и легких жидких углеводородах (деасфальтизация гудрона пропаном, пропан-бутановой смесью, легкой бензиновой фракцией), а также экстрактивные процессы очистки базовых масляных фракций;
2) термические конверсионные процессы с регулируемым разложением и термополиконденсацией высокомолекулярных углеводородов и гетероатомных компонентов (термокрекинг, висбрекинг, замедленное коксование);
3) термоокислительные процессы с участием кислорода воздуха (производство окисленных битумов).

В этих процессах за счет сочетания температуры, давления, времени воздействия, гидродинамики и других параметров происходит целенаправленное достижение поставленных задач по количественным и качественным показателям. Именно эти технологии и их сочетание позволяют наиболее эффективно и малозатратно перерабатывать нефтяные остатки, тяжелые и высоковязкие нефти (ВВН), доля которых неуклонно возрастает в нефтяном балансе страны. Примеры многолетнего опыта по разработке и промышленной реализации некаталитических технологий являются тому подтверждением.

В докладе будут представлены технологические схемы различных процессов с подробными комментариями.

КЛ-5

BRIDGING SCALES DURING THE MULTISCALE MODELING OF TRANSPORT PHENOMENA IN A WALL-COOLED PACKED-BED CATALYTIC REACTOR

Carlos O. Castillo-Araiza

Laboratory of Catalytic Reactor Engineering Applied to Chemical and Biological Systems, Department of Process and Hydraulic Engineering, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Mexico City 09340, Mexico, E-mail: coca@xanum.uam.mx

This keynote lecture aims to elucidate the application of multiscale modeling to study the industrial-scale performance of a reaction concept central to ethylene production, highlighting how advanced computational strategies bridge microscopic insights to macroscopic reactor design. Focusing on the oxidative dehydrogenation of ethane over a promising V-based catalyst in an industrial-scale wall-cooled packed-bed reactor, the lecture will present a combined top-down and bottom-up multiscale approach, refined over 18 years in our research group [1-11]. This approach demonstrates how transport phenomena, including kinetics, can be effectively bridged from microscopic to macroscopic scales, as illustrated in Figure 1. By integrating insights across scales, this methodology overcomes the limitations of conventional modeling strategies, providing a more accurate and robust framework for simulating the performance of wall-cooled packed-bed catalytic reactors, and beyond, offering potential applications to other reaction technologies.

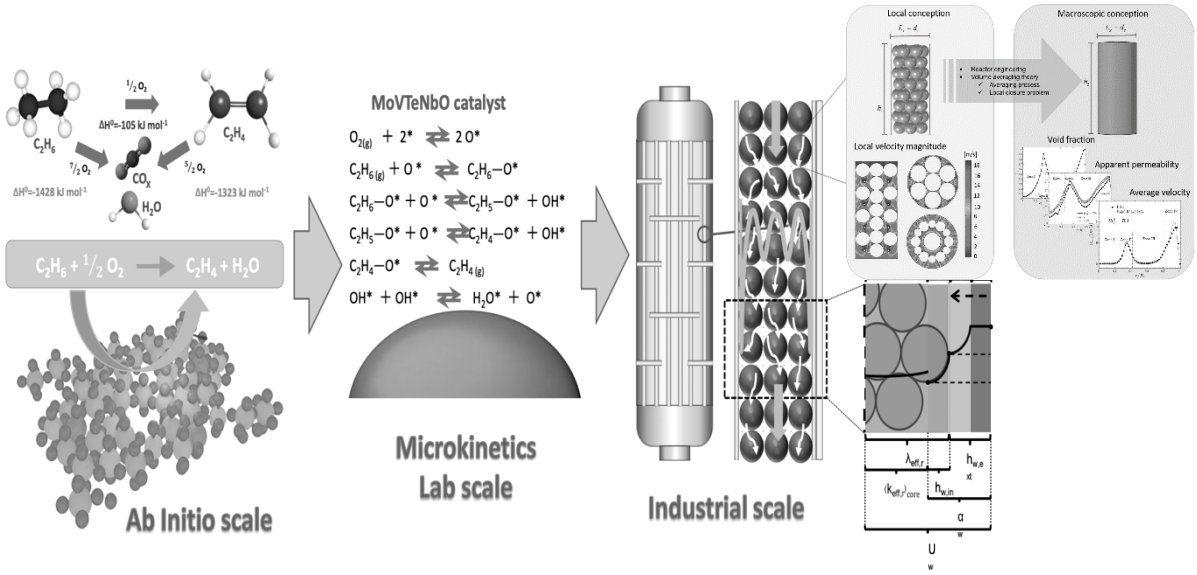


Figure 1. Multiscale modeling strategy studying the industrial-scale performance of a reaction concept central to ethylene production

КЛ-5

Following a top-down multiscale approach, a pseudo-continuous mathematical model is introduced to simulate the performance of an industrial-scale wall-cooled packed-bed catalytic reactor, accounting for all relevant transport phenomena and reaction kinetics without prior assumptions; a regime analysis based on characteristic times then identifies the dominant transport mechanisms influencing reaction kinetics, revealing the high sensitivity of industrial-scale reactor simulations to fluid dynamics, heat transfer, and reaction kinetics.

Thus, a bottom-up multiscale approach is applied, where local-scale Particle-Resolved Simulations (PRS) provide detailed insights into fluid dynamics and heat transfer at the microscopic level, integrating this data into the pseudo-continuous reactor model, while reaction kinetics is characterized through Density Functional Theory (DFT) calculations, leading to a microkinetic model also incorporated into the framework. Compared to conventional methods, this approach offers significant improvements: (i) fluid dynamics is no longer limited to macroscopic pressure drop measurements but incorporates microscopic PRS data, (ii) heat transfer modeling avoids reliance on empirical correlations derived from experimental data and regression methodologies with high uncertainties, and (iii) kinetic modeling ensures parameters remain within the uncertainty range identified via DFT calculations.

In conclusion, the pseudo-continuous reactor model developed through this multiscale approach minimizes uncertainties in key transport and reaction mechanisms, enabling parametric sensitivity studies and optimization, while paving the way for future advancements in reaction technology design.

References

[1] Hernández-Aguirre, A., et al. *Chem. Eng. J.*, 2025, 161298.
[2] Rivera, J.G., et al. *Chem. Eng. J.*, 2025, 506, 159252.
[3] Durán-Pérez, J.F., et al. *Catalysts*, 2025, 15(2), 144.
[4] Dorantes-Landa, D.N., et al. *AIChE J.*, 2024, e18707.
[5] Durán-Pérez, J.F., et al. *Chem. Eng. J.*, 2023, 143939.
[6] Alvarado-Camacho, C., et al. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2023, 62(27), 10342-10357.
[7] Romero-Limones, A., et al. *Chem. Eng. J.*, 2023, 45, 140392.
[8] Hernández-Aguirre, A., et al. *Chem. Eng. J.*, 2022, 429, 132061.
[9] Che-Galicia, G., et al. *AIChE J.*, 2019, 66(4), e16900.
[10] Che-Galicia, G., et al. *Chem. Eng. J.*, 2015, 280, 682-694.
[11] Castillo-Araiza, C.O., et al. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2007, 46(23), 7426-7435.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ I.
РАЗВИТИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОСНОВ ПРОЦЕССОВ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ

УД-I-1

ДВА РАЗНЫХ МЕХАНИЗМА КОЛЕБАНИЙ В ОДНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ЭТИЛЕНА НА Ni

Слинько М.М.[1], **Семендяева Н.Л.**[2]

[1]ФИЦ химической физики РАН им. Н.Н. Семенова,
ул. Косыгина, 4, 119991, Москва, Россия
[2]ФГБОУ ВО Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Факультет вычислительной математики и кибернетики,
Ленинские Горы, 119992, Москва, Россия
slinko@polymer.chph.ras.ru

Колебания скорости реакции окисления этилена на никелевой фольге были обнаружены и исследованы в работе [1]. Особенностью данного явления является очень маленькая область начальных условий, где наблюдаются периодические, регулярные колебания. В основном, в системе устанавливаются «mixed-mode» и апериодические колебания. Для математического моделирования наблюдаемых экспериментально сложных колебаний была предложена точечная математическая модель, состоящая из 12 обыкновенных дифференциальных уравнений, основанная на простейшем механизме реакции окисления этилена на Ni, включающем в себя 14 стадий. Предложенная математическая модель достаточно хорошо описывает экспериментально наблюдаемые сложные и апериодические колебания, возникающие в результате периодического окисления и восстановления поверхности никеля [2].

Настоящая работа посвящена математическому анализу предложенной в работе [2] математической модели, т.к. она представляет фундаментальный интерес для теории нелинейных колебаний. Впервые показано, что при одних и тех же значениях параметров модели, а также температуре и давлении реагирующих веществ, однако при разных начальных состояниях покрытия поверхности оксидом никеля в системе возможно установление двух разных видов колебаний с совершенно различными свойствами (рис. 1). При большой начальной концентрации поверхностного оксида (0.8-0.9) наблюдаются колебания, обусловленные периодическими процессами окисления и восстановления поверхности Ni. Особенностью данного вида колебаний является тот факт, что продукты парциального окисления этилена CO и H_2 и продукты глубокого окисления CO_2 и H_2O колеблются в противофазе (рис. 2а). Другой тип колебаний, возникает в системе на восстановленной поверхности,

при начальной концентрации поверхностного оксида никеля равной нулю. В данном случае колебания скорости реакции возникают за счет периодического покрытия поверхности углеродом и последующего его удаления. В этом случае парциальные давления всех продуктов реакции колеблются в одной фазе. Таким образом, показано, что анализ фаз колебаний продуктов CO и CO_2 может давать информацию не только о механизме наблюдаемых экспериментально колебаний, но и о состоянии поверхности никелевого катализатора.

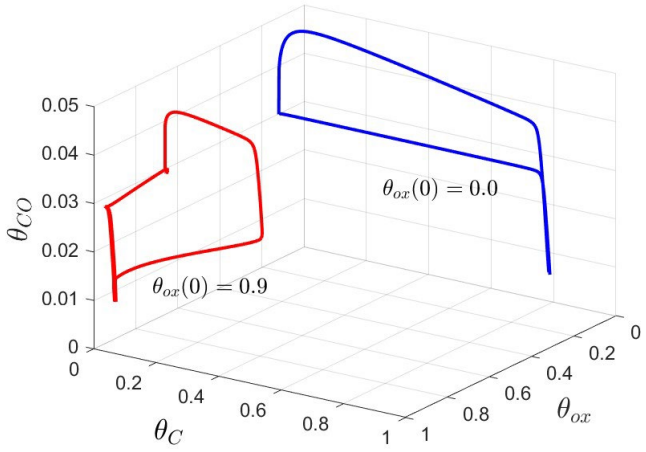


Рис. 1. Два устойчивых предельных цикла для двух разных механизмов колебаний, полученных при одних и тех же значениях параметров и внешних условиях, но при различных начальных концентрациях поверхностного оксида никеля

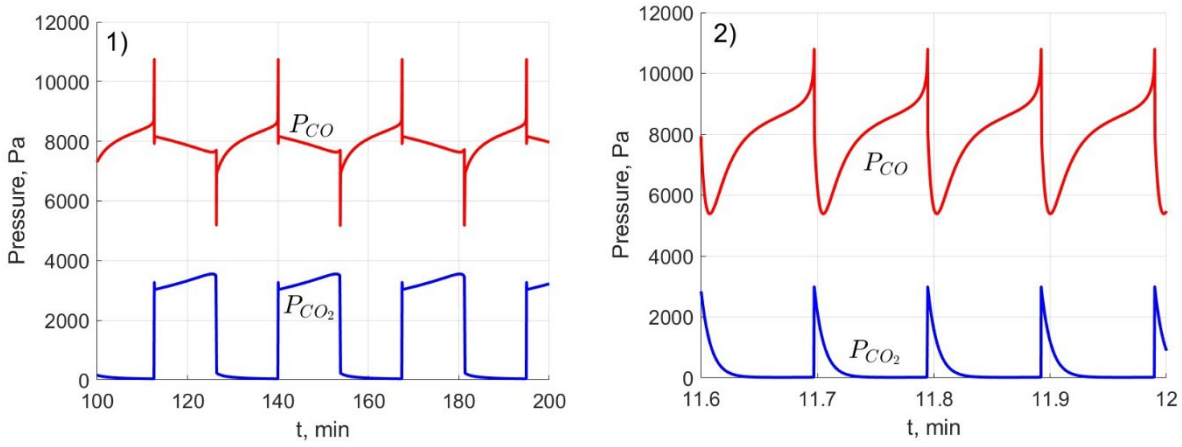


Рис. 2. Колебания парциальных давлений CO и CO_2 для двух разных видов колебаний: 1) колебания за счет периодического окисления-восстановления поверхности Ni, 2) колебания за счет периодической карбонизации поверхности Ni

Список литературы

[1] Bychkov V.Yu., Tulenin Yu.P., Slinko M.M., Lomonosov V.I., Korchak V.N. // Catalysis Letters. 2018.V.148. P. 3646-3654.

[2] Slinko M.M., Semendyaeva N.L., Makeev A.G., Bychkov V.Yu. // Kinetics and Catalysis, 2025, в печати.

УД-I-2

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНО-ПРОГРАММИРУЕМОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ Pt/CeO_2 КАТАЛИЗАТОРОВ ВОДОРОДОМ И МЕТАНОМ

Лашина Е.А., Славинская Е.М., Боронин А.И.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
lashina@catalysis.ru

Катализаторы Pt/CeO_2 широко применяются в гетерогенном катализе для реакций гидрирования, селективного и полного окисления. В промышленных масштабах Pt-Ce-O композиция используется, например, для нейтрализации автомобильных выхлопов, очистки воздуха в помещениях, в топливных элементах и т. д. Одной из основных черт катализаторов Pt/CeO_2 является наличие сильного химического взаимодействия металл-носитель, приводящее к большому разнообразию дисперсных форм платины.

Метод температурно-программируемого восстановления (ТПВ) позволяет получить характеристики процессов восстановления гетерогенных катализаторов.

Серия Pt/CeO_2 катализаторов была исследована методом температурно-программируемого восстановления водородом (ТПВ-H_2) и метаном (ТПВ-CH_4). В результате были выделены температурные интервалы поглощения водорода и метана, определено их количество, а также состав продуктов реакций взаимодействия с катализатором. На основании данных просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) было показано, что на поверхности катализаторов платина присутствует в форме кластеров PtOx и изолированных ионов Pt^{2+} [1]. Методом ТПВ-H_2 было обнаружено поглощение водорода на кластерах PtOx в виде аномально узких пиков.

Для описания данных ТПВ-H_2 был использован метод математического моделирования. При построении математической модели учитывалось, что условия эксперимента близки к условиям реактора идеального смешения. Учитывая Аррениусовскую зависимость скорости поглощения водорода от температуры, в работе выведено соотношение между предэкспоненциальным множителем и энергией активации. В предположении стандартных брутто-реакций предложен критерий, устанавливающий ограничения на полуширину

пика не менее 10 °C. Аномально узкие пики поглощения с полушириной 5 °C и меньше описаны в рамках автокаталитического восстановления кластерных окисленных центров.

Результаты ТПВ-CH_4 демонстрируют, что при взаимодействии метана с изолированными ионами платины (Pt^{2+}) происходит парциальное окисление метана с образованием CO и H_2. Математическое моделирование кривых ТПВ-CH_4 позволило установить, что в ходе взаимодействия метана и Pt^{2+} происходит модификация центра платины с образованием одиночного центра платины в окружении OH групп. Показано, что наблюдаемое в эксперименте увеличение поглощения метана при повышенных температурах связано с одновременным перетоком адсорбированного углерода на носитель и десорбцией H_2 в газовую фазу.

Восстановление метаном кластеров PtO_x происходит при более низких температурах по сравнению с Pt^{2+}. В этом случае для описания данных ТПВ-CH_4 необходимо отдельно рассматривать взаимодействием метана с внутренними и граничными центрами кластера PtO_x. В результате восстановления внутренних центров кластеров PtO_x происходит полное окисление метана с образованием CO_2 и H_2O. Взаимодействие метана с граничными атомами кластеров PtO_x по аналогии с одиночными атомами Pt^{2+} приводит к формированию CO и H_2, то есть происходит парциальное окисление метана.

Список литературы

[1] Lashina E.A., Slavinskaya E.M., Stonkus O.A., Boronin A.I. Abnormally Narrow Peaks in TPR-H_2 over Pt/CeO_2: Experiment and Mathematical Modelling. Int. J. Hydrogen Energy, 2024, 89, 590-604.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания для Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (проект FWUR-2024-0032).

УД-I-3

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ГЕТЕРОГЕННОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ СО СТРАННЫМ АТРАКТОРОМ

Чумаков Г.А.[1], **Чумакова Н.А.**[2]

[1]*Институт математики им. С.Л. Соболева, Новосибирск, Россия,* chumakov@math.nsc.ru
[2]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,* chum@catalysis.ru

В работе обсуждается явление возникновения хаоса в каталитическом реакторе идеального смешения в реакции взаимодействия водорода с кислородом, в которой присутствуют быстрые, умеренные и медленные переменные. Субгармонический каскад бифуркаций удвоения периода, наблюдаемый при изменении управляющего параметра, приводит к глобальному аттрактору. Скелет аттрактора состоит из экстремально запутанного комплекса седловых периодических решений, которые являются заузленными, образуют зацепления высокого порядка и имеют большие периоды. Численные результаты подтверждают, что траектории на аттракторе будут асимптотически хаотичными [1-3].

Механизм реакции

$$\mathrm{H_2} + 2[\mathrm{Me}] \leftrightarrow 2[\mathrm{HMe}], \qquad \mathrm{O_2} + 2[\mathrm{Me}] \leftrightarrow 2[\mathrm{OMe}],$$
$$2[\mathrm{HMe}] + [\mathrm{OMe}] \rightarrow 3[\mathrm{Me}] + [\mathrm{H_2O}], \qquad \mathrm{H_2} + [\mathrm{OMe}] \rightarrow [\mathrm{Me}] + [\mathrm{H_2O}],$$
$$[\mathrm{Me_v}] + [\mathrm{HMe}] \leftrightarrow [\mathrm{HMe_v}] + [\mathrm{Me}], \qquad [\mathrm{Me_v}] + [\mathrm{OMe}] \rightarrow [\mathrm{OMe_v}] + [\mathrm{Me}].$$

Математическая модель:

$$\dot{x}_1 = 2[k_1 x_5 (1 - x_1 - x_2)^2 - k_{-1} x_1^2 - k_3(\mathbf{x}) x_1^2 x_2] - \beta_1 \dot{x}_3,$$
$$\dot{x}_2 = 2[k_2 x_6 (1 - x_1 - x_2)^2 - k_{-2} x_2^2] - k_3(\mathbf{x}) x_1^2 x_2 - k_4(\mathbf{x}) x_5 x_2 - \beta_2 \dot{x}_4,$$
$$\dot{x}_3 = k_5 x_1 (1 - x_3) - k_{-5} x_3 (1 - x_1 - x_2),$$
$$\dot{x}_4 = k_6 x_2 (1 - x_4) - k_{-6} x_4 (1 - x_1 - x_2),$$
$$\delta \dot{x}_5 = -\delta\beta [k_1 x_5 (1 - x_1 - x_2)^2 - k_{-1} x_1^2 - k_4(\mathbf{x}) x_5 x_2] + x_{50} - x_5,$$
$$\delta \dot{x}_6 = -\delta\beta [k_2 x_6 (1 - x_1 - x_2)^2 - k_{-2} x_2^2] + x_{60} - x_6,$$

где x_1 и x_2 – покрытия поверхности металла адсорбированными водородом и кислородом, $x_1 \geq 0$, $x_2 \geq 0$, $x_1 + x_2 \leq 1$; x_3 и x_4 – концентрации водорода и кислорода, растворенных в приповерхностном слое катализатора, определенные как отношение к верхнему предельному значению этих концентраций, соответственно, $0 \leq x_3 \leq 1$ и $0 \leq x_4 \leq 1$; x_5 и x_6 – парциальные давления водорода и кислорода в газовой фазе; x_{50} и x_{60} – входные значения x_5 и x_6, соответствен-но;

$k_{\pm1}$, $k_{\pm2}$, $k_{\pm5}$ и $k_{\pm6}$ – константы скорости обратимых стадий реакции; β_1 и β_2 – верхние пределы значений концентраций водорода и кислорода, растворен-ных в приповерхностном слое, измеренные в числе монослоев; β – пересчет-ный коэффициент для перехода между концентрациями в газовой фазе и на по-верхности катализатора; δ – время пребывания реакционной смеси в реакторе (время контакта с катализатором). Более того, константы скоростей 3-й и 4-й стадий механизма реакции записываются следующим образом:

$k_3(\mathbf{x}) = k_{30} \cdot \exp(\mu_{32}x_2 + \mu_{33}x_3 + \mu_{34}x_4), \quad k_4(\mathbf{x}) = k_{40} \cdot \exp(\mu_{42}x_2 + \mu_{43}x_3 + \mu_{44}x_4),$

где параметры k_{30}, k_{40} положительные и μ_{ij} $(i = 3{,}4,\ j = 2{,}3{,}4)$ – действительные числа. Предполагается, что градиенты растворенных реагентов малы.

Первым уровнем в иерархической системе создания математической модели каталитического процесса является кинетическая модель реакции [4]. На этом уровне по механизму реакций следует создать язык форм, с помощью которого можно разбить пространство варьируемых параметров на области с качественно различной динамикой. Это позволяет выделить области с высокой параметрической чувствительностью и предсказывать потенциальные риски перехода реактора в зоны развития недопустимо высоких или наоборот – низких температур. Отметим, что даже для модельных гетерогенных каталити-ческих реакций окисления водорода и CO известны примеры сложной динамики вплоть до развития хаотического режима.

Список литературы

[1] *Chumakov G.A., Chumakova L.G.* Localization of the Trajectory Bundles of Tunnel Type // AIP Conference Proceedings. 2022. Vol. 1389: International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics, 19–25 September, 2011, Halkidiki, (Greece). ICNAAM 2011. P. 1116–1119. DOI: 10.1063/1.3637809.

[2] *Chumakov G.A., Chumakova N.A., Lashina E.A.* Modeling the Complex Dynamics of Heterogeneous Catalytic Reactions with Fast, Intermediate, and Slow Variables // Chem. Eng. J. 2015. V.282. P.11-19. DOI: 10.1016/j.cej.2015.03.017.

[3] *Чумакова Н.А., Чумаков Г.А.* Язык форм для моделирования нелинейной динамики гетерогенных каталитических реакций // В сб. Международная конференция «Динамические процессы в каталититческих структурах» (ДПКС 2024), Сборник тезисов (28 окт. – 1 нояб. 2024 г., Тюмень, Россия) [Электронный ресурс]. – ИК СО РАН, 2024. – С.27-28. КЛ-6.

[4] *Слинько М.Г.* Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов. – Новосибирск: Институт катализа им. Г.К. Борескова. 2004.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственных заданий Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН (проект FWNF-2022-0005) и Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (проект FWUR-2024-0037). Других источников финансирования проведения или руководства данным исследованием не было.

УД-I-4

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО РЕЖИМА НЕСТАЦИОНАРНОГО ХИМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Язовцева О.С., Пескова Е.Е., Митрюхин И.В.

Национальный исследовательский
Мордовский государственный университет,
Саранск, Республика Мордовия, Российская Федерация
kurinaos@gmail.com

В докладе представлена численная модель для исследования динамического режима нестационарного процесса в слое катализатора с цилиндрической формой зерен. В основе модели лежат регуляризованные уравнения диффузии-конвекции-реакции в осесимметричной постановке и уравнение теплопроводности с интегральным источниковым членом. Для эффективного решения поставленной задачи построен вычислительный алгоритм на основе расщепления по физическим процессам. Для уравнений диффузии-конвекции-реакции и теплопроводности записаны трехслойные разностные схемы [1]. Скорость вынужденного конвективного переноса рассчитана методом характеристик с выбором направления. Уравнения по длине слоя катализатора решены неявным методом Эйлера с пересчетом с целью обхода проблемы интегрирования области высоких градиентов. Граничные условия для зерен катализатора аппроксимированы вторым порядком точности по двум пространственным направлениям [2].

Алгоритм протестирован на задаче с известным аналитическим решением [3]. Также проведено сравнение результатов его работы с результатами работы алгоритма для гиперболической модели нестационарного процесса в слое катализатора с центрально-симметричной постановкой уравнений для зерна катализатора.

С использованием разработанного алгоритма исследован динамический режим нестационарного горения в слое катализатора [4]. Показано, что режим с переключением температуры более эффективен в случае низких концентраций реагентов, он позволяет добиться снижения максимального разогрева среды более, чем на 10 %.

Список литературы

[1] Chetverushkin, B.N. Three-Level Scheme for Solving the Radiation Diffusion Equation / B.N. Chetverushkin, O.G. Olkhovskaya, V.A. Gasilov // Doklady Mathematics. 2023. Vol. 108, No. 1. P. 320-325. DOI 10.1134/s1064562423700837

[2] Yazovtseva, O.S. Numerical Study of Wave Processes during Oxidative Regeneration of a Stationary Catalyst Layer // Mathematical Models and Computer Simulations. 2024. Vol. 16, No. S2. P. S272-S281. DOI 10.1134/S2070048224700972.

[3] Полянин А.Д., Зайцев В.Ф. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики: точные решения. М: ФИЗМАТЛИТ, 2002, 432 с.

[4] Р.М. Масагутов, Б.Ф. Морозов, Б.И. Кутепов. Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. – М.: Химия, 1987, 144 с.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-21-00242, https://rscf.ru/project/25-21-00242/.

УД-I-5

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИКИ В ТРЕХСТРУЙНОМ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УГЛАХ ВВОДА ГАЗА-ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ

Николаев М.С., Картаев Е.В., Ващенко С.П., Ковалев О.Б.

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия, nikolaev@itam.nsc.ru

Многоструйные плазмохимические реакторы проточного типа применяются в различных технологиях: плазменном синтезе, обработке материалов, утилизации отходов и др. [1]. Важным условием работы таких реакторов является эффективное смешение сталкивающихся струй газа-теплоносителя внутри камеры смешения реактора. При вводе сырья в реактор необходимо обеспечивать однородность поперечных профилей температуры, скорости и давления потока газа на выходе из камеры смешения для создания одинаковых условий протекания реакции рабочей зоне реактора. Течение газа внутри камеры смешения включает в себя зоны рециркуляции и возвратные течения. При осевом вводе сырья непосредственно в камеру смешения указанные особенности течения приводят к осаждению на внутренних стенках реактора химического сырья и/или продуктов реакции. Подбор оптимальной геометрии камеры смешения может повысить эффективность смешения струй, уменьшить размер и интенсивность зон циркуляции и возвратного течения, снизить тепловые потери в стенки реактора. Последние могут быть снижены за счет нанесения на внутренние стенки реактора теплозащитного покрытия [2].

В настоящей работе проведено численное исследование особенностей течения сталкивающихся под различными углами струй воздуха в камере смешения трехструйного плазмохимического реактора (ТПХР). Моделирование проведено в трехмерной стационарной постановке с использованием CFD кода Ansys Fluent. Расчетная область (рис. 1) включала в себя область течения газа в соплах плазмотронов и камеры смешения, также решалась сопряженная задача расчета распределения температуры внутри водоохлаждаемых стенок крышки и корпуса ТПХР. В камеру смешения через сопла вводилась тепловая мощность 787,5 кВт с расходом воздуха 75 г/с. Проведен ряд расчетов течения в ТПХР с изменением угла между осями сопел и осью реактора α от 25° до 45°.

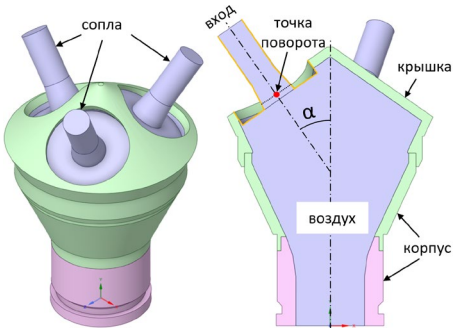


Рисунок 1. Схема расчетной области.

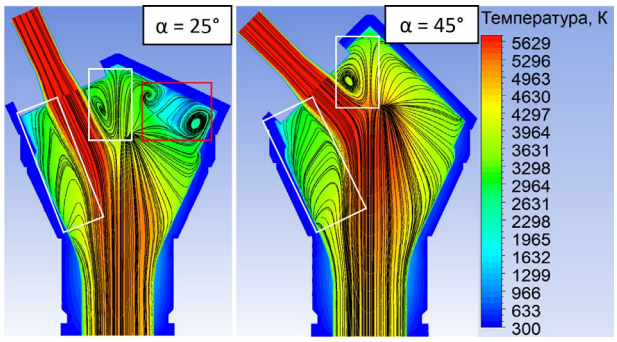


Рисунок 2. Контуры температуры и линии тока (черный контур) ТПХР при α = 25° и 45°.

На рис. 2 представлены примеры картины течения газа внутри ТПХР при α = 25° и 45°. При всех рассмотренных углах α в указанном диапазоне наблюдаются области возвратного течения вдоль стенки камеры смешения под плазмотронами и область рециркуляции в верхней части ТПХР (белый контур на рис. 2). При α < 35° существует дополнительная зона рециркуляции напротив плазмотронов с большим градиентом температуры (красный контур). С увеличением α тепловой КПД реактора уменьшается (с 80,2 % при α = 25° до 72,6 % при α = 45°), скорость обратного течения в верхней части реактора увеличивается. При этом профили скорости и температуры на выходе из реактора становятся более однородными. Кроме того, для угла α равного 35°, проведены расчеты газодинамики при наличии слоя теплозащитного покрытия различной толщины на внутренней стенке корпуса ТПХР. В качестве покрытия брались два материала керамики: беспористый диоксид циркония и стабилизированный оксидом иттрия диоксид циркония. Расчеты показали, что использование теплозащиты повышает тепловой КПД реактора, увеличивает среднемассовую скорость и температуру на выходе из реактора. Помимо этого, покрытие обеспечивает более однородный профиль температуры потока и не оказывает существенного влияния на однородность профиля скорости.

Список литературы

[1] Михайлов Б.И. Электродуговые плазмохимические реакторы раздельного, совмещенного и раздельно-совмещенного типов // Теплофизика и аэромеханика. 2010. Т. 17, № 3. С. 425-440.

[2] Галевский Г.В., Жуков М.Ф., Корнилов А.А., Ноздрин И.В., Гусев А.А. Гидродинамические и теплотехнические характеристики трехструйного прямоточного реактора для высокотемпературного синтеза тонкодисперсных материалов // Новосибирск: ИТ СО РАН. 1990. 40 с.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания ИТПМ СО РАН (№ гос. регистрации 124021500013-7).

УД-I-6

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛО-МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА В ТРУБЕ КРУГЛОГО СЕЧЕНИЯ

Пескова Е.Е.[1], **Снытников В.Н.**[2]

[1]*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет, Саранск, Республика Мордовия, Российская Федерация*
e.e.peskova@math.mrsu.ru
[2]*Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия, snyt@catalysis.ru*

В настоящей работе проводится численное исследование воздействия ИК-лазерного излучения на дозвуковое химически активное течение двухфазной среды метана и наночастиц пыли в прямой трубе круглого сечения. Рассматривается режим, при котором длина теплопроводности у среды сравнима с радиусом трубы, а температура стенки достаточна для протекания эндотермической конверсии метана.

Для исследования указанного процесса используется расширенная на учет лазерного излучения и каталитических наночастиц система уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха [1]. Оттестированный на экспериментальных и аналитических данных вычислительный алгоритм [2,3] реализован в виде программного комплекса для моделирования дозвуковых химически активных течений в присутствии различных источников энергии [4].

Вычислительные эксперименты проведены в трубе, длина которой на порядок больше ее диаметра (диаметр 40 мм, длина 300 мм). С входного торца трубы вводится метан и наночастицы с расходом 240 л/ч, суммарная каталитическая поверхность наночастиц составляет 3141 м^2 в кубическом метре, температура стенок трубы составляет 1123 К. Вдоль оси трубы вводится ИК лазерное излучения, поглощаемое этиленом и наночастицами. Для описания конверсии метана в присутствии каталитических наночастиц, на которых происходит активация метана, используется радикальная схема, разработанная в [5].

Дополнительный подвод энергии внутрь реакционной смеси посредством лазерного излучения мощности 60 Вт приводит к увеличению температуры среды на 300 К в области поглощения излучения с расширением его влияния на химический процесс вне области поглощения и интенсификацией гетерогенно-гомогенных реакций. Расчетная конверсия метана на выходе трубы увеличилась

с 23 % при нулевой мощности до 38 % при 60 Вт с образованием в первую очередь этилена и водорода, а также ацетилена и ароматических соединений.

Расчет теплового потока вдоль стенки трубы показал образование трех областей: начальная область нагрева без химических реакций и без поглощения излучения, область поглощения излучения с теплоотдачей от стенок к газовой смеси и протеканием эндотермического химического процесса, область теплоотдачи от стенок трубы в газопылевую реакционную смесь в отсутствии излучения. В области теплоотдачи от стенок трубы процесс конверсии метана протекает с числом Нуссельта 9 в сравнении с течением однокомпонентного газа с коэффициентом теплоотдачи 3.7 без химических превращений. Режим с тепловым потоком от реакционной среды на стенки трубы возникает, когда мощность лазерного излучения составляет более половины от суммарного теплового потока со стенок без излучения.

При вводе дополнительной ИК-лазерной мощности удельная энергия конверсии метана снижается. Для 60 Вт она составила 8.18 кДж/г. Можно предполагать, что полученные значения можно снизить при переходе к более длинным и узким трубам при оптимизации этого химического процесса по производительности и энергетическим затратам.

Список литературы

[1] Snytnikov V.N., Peskova E.E., Stoyanovskaya O.P. Mathematical Model of a Two-Temperature Medium of Gas–Solid Nanoparticles with Laser Methane Pyrolysis // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. Vol. 15, Iss. 5. P. 877-893.

[2] Пескова Е.Е., Снытников В.Н., Жалнин Р.В. Вычислительный алгоритм для изучения внутренних ламинарных потоков многокомпонентного газа с разномасштабными химическими процессами // Компьютерные исследования и моделирование. 2023. Т. 15, № 5. С. 1169-1187.

[3] Peskova E.E., Snytnikov V.N. Computer simulation of laser radiation influence at internal flows of reactive hydrocarbons // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2024.

[4] Пескова Е.Е., Снытников В.Н. Программный комплекс LasChemFVM-2D для моделирования нестационарных дозвуковых потоков двухфазной реакционной среды. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2024667038 от 19.07.2024. – 2024.

[5] Lashina E.A., Peskova E.E., Snytnikov V.N. Mathematical modeling of the homogeneous-heterogeneous non-oxidative CH4 conversion: the role of gas-phase H or CH3 // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2023. Vol. 136. pp. 1775-1789.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0033.

УД-I-7

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПО НЕТОЧНЫМ ДАННЫМ С ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЬЮ

Шарый С.П.

ФИЦ информационных и вычислительных технологий, Новосибирск, Россия
shary@ict.nsc.ru

В работе предлагается решение математической задачи восстановления функциональных зависимостей (регрессионного анализа, идентификации и т.п.) по данным, которые неточны и имеют интервальную неопределённость. Такие постановки часто возникают при обработке результатов реальных измерений и в математическом моделировании химико-технологических процессов.

Рассмотрим линейную функцию вида

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ \ldots + \beta_n x_n,$$

в которой $x_1,\ x_2,\ \ldots\ ,\ x_n$ – независимые переменные (называемые также входными или предикторными переменными), y – зависимая переменная (называемая также выходной или критериальной переменной), и β_0 , $\beta_1, \ldots , \beta_n$ – некоторые коэффициенты. Эти коэффициенты должны быть определены на основе результатов серии измерений значений $x_1, x_2, \ldots , x_n$ и y.

На практике при решении задач восстановления зависимостей данные почти всегда неточны, и эта неточность традиционно моделируется теоретико-вероятностными инструментами. Мы будем считать, что неопределённости и неточности в данных описываются с помощью интервальных моделей [1]. В этом случае результатами измерений получаются интервалы, которым принадлежат истинные значения измеряемых величин. В частности, в задаче оценивания параметров линейной зависимости предполагается, что в i-ом измерении получены интервалы $\boldsymbol{x}_{ij}$ и $\boldsymbol{y}_i$ для x_j и y соответственно, такие что

$$x_j \in \boldsymbol{x}_{ij} = \left[\ \inf \boldsymbol{x}_{ij}, \sup \boldsymbol{x}_{ij}\ \right], \qquad y \in \boldsymbol{y}_i = \left[\ \inf \boldsymbol{y}_i, \sup \boldsymbol{y}_i\ \right], \qquad i = 1, 2, \ldots, m,$$

где $\inf$ и $\sup$ означают взятие левого и правого концов интервала, а жирный шрифт обозначает интервальные объекты (в соответствии с международным неформальным стандартом). Тогда имеем набор интервальных данных

$$\boldsymbol{x}_{11}\ ,\ \boldsymbol{x}_{12}\ ,\ \ \ldots\ \ ,\ \boldsymbol{x}_{1n}\ ,\ \boldsymbol{y}_1,$$
$$\boldsymbol{x}_{21}\ ,\ \boldsymbol{x}_{22}\ ,\ \ \ldots\ \ ,\ \boldsymbol{x}_{2n}\ ,\ \boldsymbol{y}_2,$$
$$\ldots \quad \ldots \quad \ldots \quad \ldots \quad \ldots$$

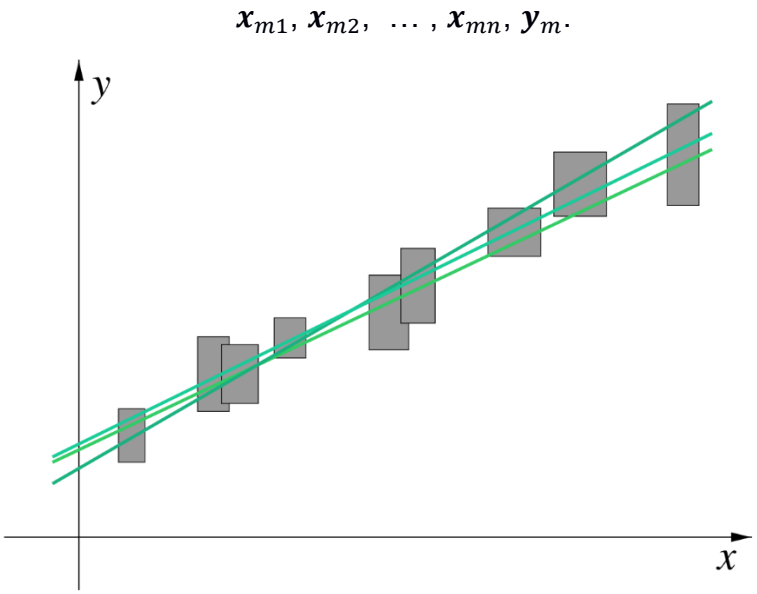


Рис. 1. Задача восстановления линейной функции по интервальным данным

Необходимо найти оценки коэффициентов β_j, $j = 0, 1, \ldots, n$, для которых линейная функция «наилучшим образом» приближает этот набор данных (см. Рис. 1).

Задача восстановления зависимостей в описанной выше формулировке была впервые рассмотрена в 1962 году Л.В. Канторовичем в работе [2], где также были кратко намечены возможные пути её решения. Впоследствии методы решения этой и других близких задач с интервальными данными сформировали отдельную развитую научную дисциплину [1].

В работе представлен общий подход к решению задачи восстановления зависимостей по интервальным данным – метод максимума совместности [1, 3], обсуждается программная реализация и практические аспекты работы с ним. Кроме того, даются сравнения метода максимума совместности с другими существующими подходами к этой задаче.

Список литературы

[1] Баженов А.Н., Жилин С.И., Кумков С.И., Шарый С.П. Обработка и анализ интервальных данных. – Москва-Ижевск: Издательство «ИКИ», 2024.

[2] Канторович Л.В. О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений // Сибирский матем. журнал. 1962. Т. 3, №5. С. 701-709.

[3] Шарый С.П. Задача восстановления зависимостей по данным с интервальной неопределённостью // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2020. Т. 86, №1. С. 62-74.

УД-I-8

ОПТИМИЗАЦИЯ СТЕКЛОВОЛОКОННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ПРОЦЕССА МЕТАНИРОВАНИЯ ОКСИДОВ УГЛЕРОДА ПРИ ПОМОЩИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Мотаев К.А.[1,2], **Михайлов Я.А.**[1], **Жованик И.А.**[1], **Загоруйко А.Н.**[1,2], **Елышев А.В.**[1]

[1]Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
k.a.motaev@utmn.ru

Превращение CO_2 в метан представляет собой перспективное направление для технологии улавливания и использования углерода [1]. Этот метод позволяет перерабатывать промышленные выбросы CO_2 в метан, тем самым снижая их концентрацию в атмосфере. Подобная стратегия не только уменьшает воздействие на климат, но и поддерживает принципы циклической экономики, преобразуя CO_2 в полезный продукт.

Кроме того, синтез метана из CO_2 можно совмещать с возобновляемой энергетикой (солнечной, ветровой и др.), формируя углеродно-нейтральный энергетический цикл [2]. Это открывает возможность запасать избыток "зелёной" энергии в форме метана, который затем можно использовать при недостатке возобновляемых источников, повышая стабильность энергосистемы.

Катализ играет ключевую роль в химических процессах, включая метанирование – реакцию получения метана, востребованную в энергетике и каталитической очистке. Современные методы машинного обучения (МО) в сочетании с механистическим моделированием способны значительно ускорить разработку новых катализаторов.

Одним из способов применения машинного обучения заключается в том, чтобы на основе собранных литературных данных и собственных экспериментов [3] создать модель МО и найти возможные правила для наилучших катализаторов, а также подобрать катализатор с оптимальными параметрами.

В нашей модели было выбрано 17 входных параметров и 3 выходных. Была построена модель случайного леса с коэффициентом детерминации для тестовых данных $R^2 = 0.85$ и средней абсолютной ошибкой равной MAE = 7.24 в кросс валидации Рис. 1. Теперь данную модель можно использовать для предсказания других катализаторов, тем самым сократить время на проведения экспериментов.

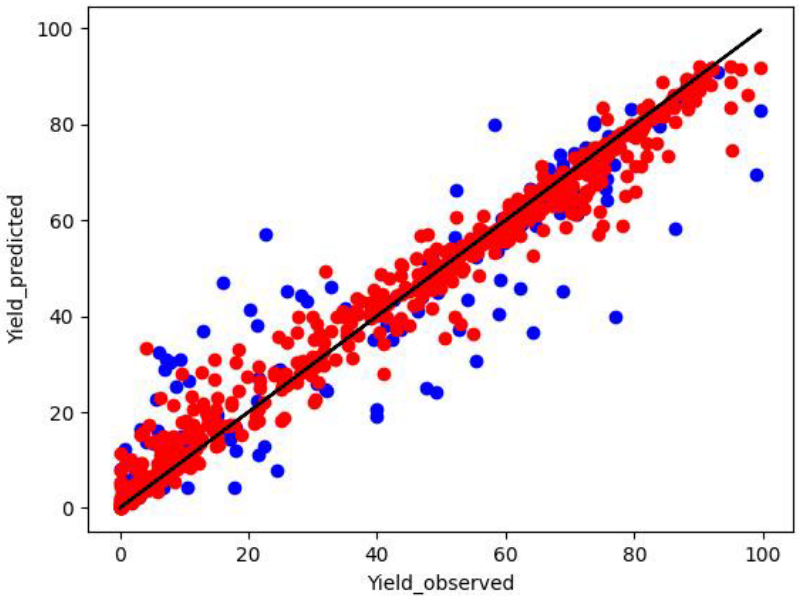


Рисунок 1. График предсказанных значений выхода метана с помощью модели машинного обучения от наблюдаемых значений выхода метана

Список литературы

[1] Baena-Moreno F.M. et al. Carbon capture and utilization technologies: a literature review and recent advances //Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects. – 2019. – Т. 41. – №. 12. – С. 1403-1433.

[2] Zhang Y. Carbon dioxide utilization: A carbon-neutral energy cycle //Nature Reviews Chemistry. – 2017. – Т. 1. – №. 7. – С. 0057.

[3] Mikhailov I.A. et al. Efficiency study of nickel-containing glass-fiber catalysts for CO_2 methanation //e-Prime-Advances in Electrical Engineering, Electronics and Energy. – 2024. – Т. 10. – С. 100774.

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-10015-П, https://rscf.ru/project/22-73-10015-П/.

УД-I-9

ГИПОТЕЗА ОБ АКТИВИРОВАННОМ МАССОПЕРЕНОСЕ НА МЕМБРАННОМ КАТАЛИЗАТОРЕ

Макаров А.С., Скудин В.В., Тарасенко М.А.

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия, E-mail: skudin.v.v@muctr.ru

В результате сопряжения диффузии и химической реакции могут возникать новые массовые потоки, увеличивающие или ослабляющие проницаемость и селективность мембраны для целевого компонента. Энергетическое соединение отдельных процессов приводит к сильному, а в ряде случаев и фундаментальному изменению кинетических и разделительных характеристик мембран. [1]. В углекислотной конверсии метана (УКМ) на мембранных (МК) традиционных (ТК) катализаторах, в качестве активного вещества в которых использовались карбиды вольфрама или молибдена, было установлено, что удельная константа скорости реакции крекинга метана превышала на порядок аналогичную константу на традиционном катализаторе. Гипотеза, объясняющая эту разницу, основана на физическом явлении, которое хорошо известно уже более 150 лет и которое ранее не использовалось для интерпретации результатов в каталитических исследованиях. Суть этого явления может быть кратко представлена следующим образом.

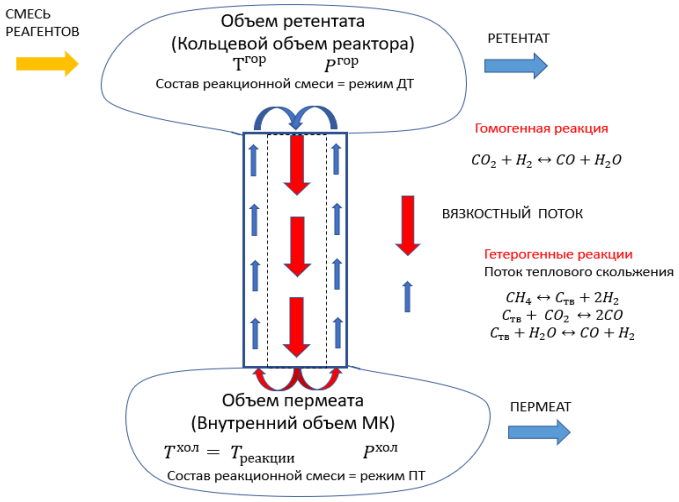


Рис. 1. К пояснению роли теплового скольжения в поровом канале МК

В первом приближении реакционное пространство представлено тремя частями: объемами ретентата, пермеата и единичным поровым каналом, через который эти объемы сообщаются. Длина единичного порового канала соответствует толщине массивного каталитического слоя в МК.

УД-I-9

Состояние газовой среды в поровом канале в последние десятилетия принято характеризовать параметром разреженности δ. Параметр разреженности более точно характеризует состояние разреженности при анализе массопереноса в поровых средах.

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{1}{Kn} = \frac{a \cdot P}{\mu} \left(\frac{m}{2k_B T} \right)^{0,5}$$

где: δ – параметр разрежения в поровом канале; Kn – число Кнудсена; a – средний диаметр порового канала; P – среднее давление в поровом канале; m - масса молекулы; μ – вязкость газа; k_B – константа Больцмана; T – температура газа, *К*.

Потоки реакционной среды в поровом канале МК находятся в различных термодинамических состояниях: тепловое скольжение находится в состоянии разреженности, а вязкостный поток – в состоянии сплошности. В стационарных условиях эти потоки образуют контур микроциркуляции, в котором также участвуют вещества из объемов ретентата и пермеата. Формирование циркуляционного контура в поровом канале является основанием для включения в кинетическую схему УКМ взаимодействия водяного пара с углеродными отложениями в каталитическом слое МК, в дополнение к реакции углекислого газа с ними. Использование математического описания кинетической схемы УКМ на МК позволило определять константы скорости для прямых и обратных реакций на всех промежуточных стадиях процесса [2]. Соотношения этих констант скорости прямых и обратных реакций характеризуют равновесие для соответствующих стадий процесса УКМ. Учет особенностей массопереноса в поровых каналах МК дал основания предположить различную локализацию (расположение) гомогенных и гетерогенных стадий в реакционном пространстве мембранного реактора, и объяснить, как интенсификацию массопереноса, так и кажущуюся «необратимость» гетерогенных ступеней МКМ.

Список литературы

[1] Дытнерский Ю.И., Брыков В.П., Каграманов Г.Г.// Мембранное разделение газов М., Химия, 1991, С. 334.

[2] Н.Н. Гаврилова, С.А. Губин, М.А. Мячина и др. Кинетический анализ углекислотной конверсии метана на традиционном и мембранных катализаторах // Мембраны и мембранные технологии. – 2023. – Т. 13. - №6. – с. 505-520.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FSSM-2023-0004).

УД-I-10

ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ПУЛЬСАЦИОННЫХ АППАРАТОВ

Абиев Р.Ш.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия
abiev.rufat@gmail.com

В работе обсуждаются принципы синтеза и области применения пульсационных аппаратов нового поколения, позволяющие разрабатывать энерго- и ресурсосберегающее оборудование химических производств для процессов с жидкой сплошной средой. Описаны новые типы аппаратов, лабораторные и промышленные испытания которых подтвердили высокие показатели их эффективности [1].

На нескольких примерах продемонстрированы возможности пульсационных аппаратов для проведения процессов экстрагирования, растворения (например, в процессах дегидратации [2]), эмульгирования [3], формирования газожидкостной смеси с пузырями размером d_{32} = 0,55 мм [4]. Разработана теория нелинейных колебаний жидкости в пульсационном аппарате переменного сечения с использованием одномерной математической модели, что позволило рассчитать резонансные частоты колебаний [5]. Обсуждаются перспективы применения пульсационных аппаратов в промышленности.

Список литературы

[1] Абиев Р.Ш. Пульсационные аппараты нового поколения - энерго- и ресурсосберегающее оборудование химических производств// Хим. пром. сегодня, 2008, №4. С. 46-54.

[2] Абиев Р.Ш., Вдовец М. З., Ромащенкова Н. Д., Масликов А. В. Интенсификация процессов массопереноса при проведении химической реакции в многофазных системах с использованием метода резонансного пульсационного перемешивания// Журн. прикл. химии. 2019. Т. 92. Вып. 10. С. 1309-1319. DOI: 10.1134/S0044461819100104.

[3] Vasilev M.P., Abiev R.Sh. Turbulent droplets dispersion in a pulsating flow type apparatus - new type of static disperser// Chem. Eng. J., 2018, V. 349, P. 646-661.

[4] Abiev R.Sh., Galushko A.S. Hydrodynamics of pulsating flow type apparatus: simulation and experiments// Chem. Eng. J., 2013, V. 229, P. 285–295.

[5] Абиев Р.Ш. Моделирование нелинейных колебаний жидкости в пульсационном аппарате переменного сечения с использованием одномерной модели// Теор. основы хим. технол., 2017, Т. 51, № 1, с. 58–71.

УД-I-11

АДАПТИВНОЕ ВРАЩЕНИЕ КАК СПОСОБ ИНТЕНСИФИКАЦИИ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В ВИХРЕВЫХ РЕАКТОРАХ

Наумов И.В., Скрипкин С.Г., Шарифуллин Б.Р.

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
naumov@itp.nsc.ru

Вихревые потоки широко применяются в различных технологических процессах, таких как смешивание жидкостей, сепарация частиц, интенсификация теплообмена и химических реакций. Проблема интенсификации обменных процессов и массопереноса в вихревых течениях занимает важное место в современной науке и технике. Несмотря на значительные достижения в этой области, остаётся актуальной задача эффективного управления вихревыми потоками рабочей жидкости с минимальными дополнительными затратами энергии и ресурсов [1, 2]. Настоящая работа посвящена исследованию вихревого потока жидкой фазы в модельном вихревом реакторе, который решает эту задачу путем использования адаптивного вращения боковой стенки, в отличие от случаев с добавлением энергии для принудительного вращения боковых стенок реактора с фиксированной угловой скоростью.

Целью данной работы является интенсификация обменных процессов и массопереноса вихревым потоком за счет снижения гидравлического сопротивления посредством адаптивного вращения боковой стенки реактора. Экспериментально, с использованием бесконтактных методов оптической диагностики, исследовано влияние свободного вращения боковой стенки на вихревое течение жидкости в модели центробежного реактора. Движение среды в цилиндрическом контейнере генерируется вращением верхнего диска с частотой ω_d. Остальная часть контейнера может свободно вращаться вокруг своей оси с угловой скоростью ω_{cyl}, пропорциональной ω_d и зависящей от вязкости рабочей жидкости и трения в опорном подшипнике. Наличие адаптивного вращения боковой стенки дает увеличение закрутки потока по сравнению с неподвижной боковой стенкой реактора. Такой способ позволяет преобразовать часть энергии, которая ранее расходовалась на трение о неподвижные стенки и рассеивалась в виде тепла, в полезное вращательное движение самих стенок без дополнительных затрат. Было обнаружено, что даже сравнительно слабое свободное вращение боковой стенки подавляет распад

вихря – формирование нежелательной, замедляющей массообмен зоны возвратного течения в приосевой области вихревого реактора, возникающей при неподвижной боковой стенке (см. рисунок).

Предложенная конфигурация реактора позволяет эффективно управлять вихревыми потоками без дополнительных затрат энергии в отличие от случая принудительного вращения боковых стенок реактора. Полученные результаты по управлению и контролю распадом вихря также могут найти применение при проектировании компактных реакторов для биологических, химических и энергетических технологий, где необходимо минимизировать механическое воздействие сохранив эффективность перемешивания ингредиентов при малых числах Рейнольдса.

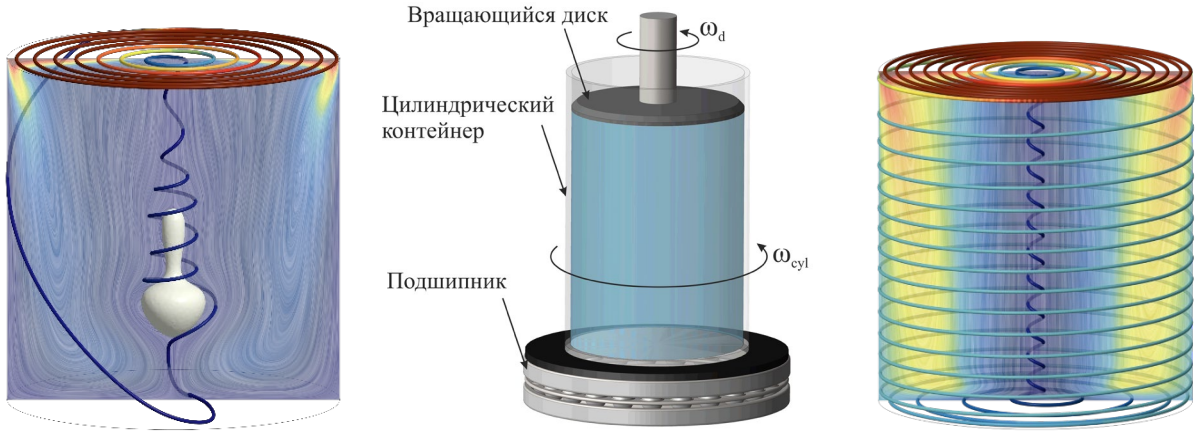


Рис. Схема реакторной установки и примеры траектории движения частиц, слева – в реакторе с неподвижной стенкой, справа – с адаптивно вращающейся стенкой реактора при Re = 2300

Список литературы

[1] Imoula et al., 2016 Imoula M., Saci R., Benkoussas B., Gatignol R. (2016). Characterization of swirling flows in a partly open cylinder. Journal of Applied Fluid Mechanics, 9(6), 3167-3176.

[2] Gonzalez-Quiroga A., Shtern V., Perreault P., Vandewalle L., Marin G., Van Geem K. (2021). Intensifying mass and heat transfer using a high-g stator-rotor vortex chamber. Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, 169, 108638.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00233, https://rscf.ru/project/24-19-00233/.

УД-I-12

МАССОПЕРЕНОС В ДВУХФАЗНОЙ СИСТЕМЕ ЖИДКОСТЬ-ЖИДКОСТЬ ПРИ СНАРЯДНОМ РЕЖИМЕ ТЕЧЕНИЯ В МИКРОРЕАКТОРЕ

Романова В.В.[1], **Абиев Р.Ш.**[2]

[1]*Институт аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
romanova.vv@iapran.ru

Микрореакторные технологии используются для интенсификации процессов тепло- и массопереноса в синтезе органических соединений, неорганических и полимерных материалов [1-2]. Однако вопрос о преобладании роли конвекции или диффузии в двухфазных микроканальных потоках вызывает дискуссию. В данной работе исследовано влияние частоты циркуляции на коэффициенты массопередачи в системе «жидкость-жидкость» в двухфазной системе. Экспериментальная часть включала изучение экстракции янтарной кислоты в модельной системе н-бутанол-янтарная кислота-вода с использованием микрореакторной установки, оснащённой стеклянным микроканалом диаметром d_c = 1,3 мм с коаксиально-сферическим диспергатором. Конвективные потоки, создаваемые вихрями Тейлора, обеспечивают увеличение переноса вещества на несколько порядков выше по сравнению с диффузионным переносом, а возрастание массоотдачи в капле и в слаге приводят к росту общего коэффициента массопередачи. Коэффициенты массопередачи k_L(м/с) и $k_L a$ (1/с) рассчитывались по двухпленочной модели Льюиса-Уитмена:

$$k_{\mathrm{L}}\, a = \frac{q_d}{q_{tp}} \cdot \frac{U_{tp}}{L} \ln\left(\frac{C_{2.0} - C^*_{2.0}}{C_{2.\mathrm{L}} - C^*_{2.\mathrm{L}}}\right), \qquad (1)$$

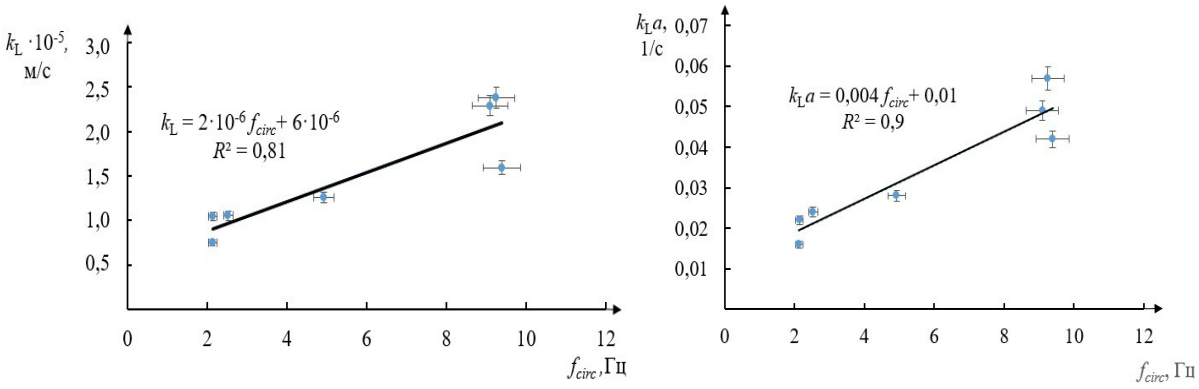
где $C^*_{2.0}$ - равновесная концентрация янтарной кислоты в органической фазе в начале микроканала, моль/м^3, $C^*_{2.\mathrm{L}}$ - равновесная концентрация янтарной кислоты в органической фазе в конце микроканала, моль/м^3, U_{tp} - скорость двухфазного потока, м/с, q_d - средний объемный расход дисперсной фазы, м^3/с, q_{tp} - сумма средних объемных расходов дисперсной и сплошной фаз, м^3/с, L - длина микроканала, м, $C^*_{2.0}$, $C^*_{2.\mathrm{L}}$ - значения равновесных концентраций растворенного вещества в органической фазе в начале и в конце микроканала, моль/м^3, a - удельная поверхность контакта фаз, м^2/м^3.

В разработанной ранее авторами [3] микрореакторной установке проводилась экстракция янтарной кислоты из н-бутанола (дисперсной фазы) в воду (сплошную фазу) при расходах фаз от 0,67 до 2,67 мл/мин. Установлены

зависимости коэффициентов массопередачи от частоты циркуляции f_{circ} (Гц) в капле сплошной фазы по формуле (2), которые вынесены на рисунок:

$$f_{circ} = \frac{U_{tp} - U_d/2}{2L_s}, \qquad (2)$$

где U_d – скорость капли, м/с; L_s – длина снаряда, м.



а б

Рис. Корреляции экспериментальных значений коэффициентов массопередачи k_L (а) и $k_L a$ (б) от частоты циркуляции f_{circ}. Число Рейнольдса $Re = \frac{U_d\, d_c\, \rho_1}{\mu_1}$, основанное на скорости капли U_d, находится в интервале 16…81

Установленная экспериментально корреляция коэффициентов массопередачи от частоты циркуляции подтверждает, что конвективный массоперенос, обусловленный вихрями Тейлора, играет ключевую роль в общем процессе массопереноса. Впервые экспериментально проверена гипотеза о ключевом влиянии частоты циркуляции вихрей Тейлора на скорость массопереноса, применительно к системе «жидкость-жидкость» в микроканалах, при малых и умеренных значениях капиллярных чисел Ca ($1{,}2 \cdot 10^{-3}$ до $6{,}4 \cdot 10^{-3}$). Это создаёт значительные перспективы для применения двухфазных микрореакторов для оптимизации процессов экстракции в фармацевтике и химическом синтезе.

Список литературы

[1] Widianto A.Y., Lorenza V., Clarisa C., Valentino R., Elfa C., Sapei L. On mass transfer phenomena of partially miscible liquids under liquid-liquid slug flow in a circular microchannel // Chemical Engineering Research and Design. 2024. V. 205. Pp. 57-66. DOI: 10.1016/j.cherd.2024.03.013.

[2] Abiev R.S., Butler C., Cid E., Lalanne B., Billet A.-M. Mass transfer characteristics and concentration field evolution for gas-liquid Taylor flow in milli channels // Chemical Engineering Science. 2019. P. 1331-1340. DOI: 10.1016/j.ces.2019.07.046.

[3] Svetlov S.D., Abiev R.Sh. Formation mechanisms and lengths of the bubbles and liquid slugs in a coaxial-spherical micro mixer in Taylor flow regime // Chemical Engineering Journal. 2018. Vol. 354. Pp. 269–284. DOI: 10.1016/j.cej.2018.07.213.

УД-I-13

НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ВИХРЕВЫЕ СТРУКТУРЫ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В РЕАКТОРАХ С ДИСКОВОЙ МЕШАЛКОЙ

Скрипкин С.Г., Суслов Д.А., Наумов И.В.

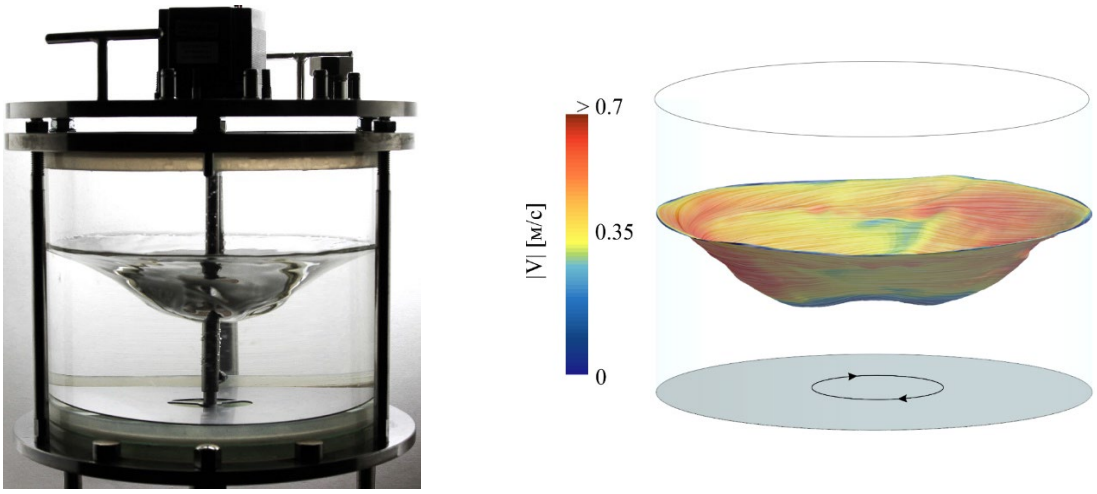
Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
skripkin.s.g@gmail.com

Перемешивание играет ключевую роль в обеспечении эффективности процессов тепломассообмена в реакторах, что особенно важно для биотехнологических и химических технологий. В системах, где смешение реагентов определяет скорость химических или биохимических процессов, управление перемешиванием становится критически важным. Образование застойных зон может приводить к неравномерному распределению компонентов и значительному увеличению времени перемешивания. Одним из перспективных методов интенсификации перемешивания является использование мешалок, устанавливаемых на вращающихся валу внутри реактора. Особенностью таких систем является возникновение сложных, способных оказывать нелинейное влияние на процессы перемешивания, вихревых структур различной природы, характеристики которых зависят от целого комплекса параметров (геометрия мешалки, частота вращения, плотность и вязкость среды) [1].

Экспериментальное исследование вихревого течения проводилось в лабораторном цилиндрическом газовихревом биореакторе (Рис. 1 (а)) «ГВ ФБР 10-И», разработанном Центром вихревых технологий (г. Новосибирск). Ранее реактор был успешно апробирован на живых культурах микроводорослей (спирулина и порфиридиум) [2-3]. Основное преимущество устройства для биотехнологий заключается в создании воздушного вихря, который обеспечивает закрутку и перемешивание основной среды, достигая высокого уровня массопереноса и насыщения кислородом при низком энергопотреблении. Для химических технологий, где требуется интенсивное перемешивание, более перспективной представляется конфигурация закручивающего устройства с механической мешалкой. В рамках настоящего исследования на вал реактора был установлен плоский диск, установленный в нижней части.

В ходе экспериментов был обнаружен новый режим течения, при котором осесимметричная вихревая воронка, не достигая дна реактора, приобретает

эллиптическую форму, а в некоторых случаях распадается на две отдельные вращающиеся воронки.



(а) (б)

Рис. 1. Фотография вихревой воронки в модельном реакторе ГВ ФБР 10-И (а), визуализация численного расчета границей раздела жидкость-воздух (б)

Оценка эффективности перемешивания была основана на получении зависимостей во времени удельной проводимости среды при добавлении 1 мл концентрированного раствора NaCl. Было установлено, что переход к нестационарному режиму с формированием двойной воронки значительно сокращает время перемешивания. Дополнительная информация о механизме интенсификации, распределении полей скорости и кинетической энергии турбулентности была получена с использованием методов численного моделирования (Рис. 1(б)). Полученные данные подтвердили важность формирования вихревых структур для интенсификации процессов перемешивания.

Список литературы

[1] A. Busciglio, F. Grisafi, F. Scargiali, A. Brucato (2014), Mixing dynamics in uncovered unbaffled stirred tanks, Chemical Engineering Journal 254, 210–219.

[2] Naumov I et al. (2023) Topological flow transformations in a universal vortex bioreactor Chemical Engineering and Processing Process Intensification 191 109467

[3] Геворгиз, Р. Г., Шарифуллин, Б. Р., Наумов, И. В., & Железнова, С. Н. (2025). Критическая интенсивность закрученных потоков суспензии и продуктивность накопительной культуры Arthrospira (Spirulina) platensis при различных световых условиях. Marine Biological Journal, 10(1), 21-29.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00233, https://rscf.ru/project/24-19-00233/).

УД-I-14

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ «АДСОРБЕНТ – АДСОРБАТ» ДИНАМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ПРОЦЕССАМ РАЗДЕЛЕНИЯ СМЕСЕЙ ЛЁГКИХ ГАЗОВ

Синев М.Ю.[1], **Гордиенко Ю.А.**[1], **Ломоносов В.И.**[1], **Васютин П.Р.**[1], **Любимов Е.Ю.**[1], **Меняйло С.Е.**[2]

[1]ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия
[2]РТУ МИРЭА, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
mysinev@yandex.ru

Адсорбция на твёрдых адсорбентах является одним из наиболее эффективных методов решения задач разделения газовых смесей в различных областях техники. Подбор адсорбентов, выбор методик и проектирование аппаратов адсорбционного разделения требуют знания физико-химических характеристик взаимодействия в системах «адсорбент – адсорбат» для всех компонентов разделяемых смесей, как правило, содержащих большое их число. Следует учитывать и широкий разнообразия типов и марок адсорбентов, потенциально пригодных для такого разделения, необходимо наличие методов определения таких характеристик, которые должны быть достаточно информативными и не требовать для реализации сложного оборудования.

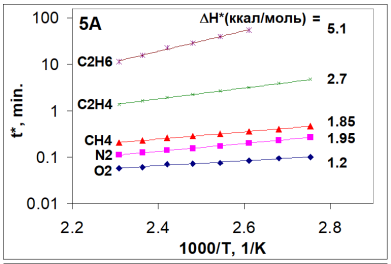
В данной работе рассмотрено использование для решения указанной задачи методов газовой хроматографии (ГХ); основы некоторых из них изложены в монографии [1]. В качестве примера обсуждается разделение осушенных газовых смесей, образующихся в процессе окислительной конденсации метана (ОКМ) и содержащих, как правило, метан, компоненты воздуха (азот и кислород), целевой продукт – этилен, ценный полупродукт – этан, а также продукты побочных превращений – водород, моно- и диоксид углерода. Часть указанных компонентов являются постоянными газами; этилен, этан и CO_2 имеют критические температуры ($T_{кр.}$) выше 0 °C. Полное разделение этой смеси на компоненты является сложной технической задачей. Как правило, ставится более скромная, но также сложная задача выделения и очистки этилена и возвращения в процесс метана и этана.

Наиболее перспективными для разделения таких смесей являются микропористые адсорбенты – активные угли (АУ) и цеолиты. В данной работе исследована возможность разделения реакционных смесей процесса ОКМ с

использованием ряда активных углей (СКТ-6А, БАУ, САУ, ПАУ) и цеолитов CaA, NaX, морденит и ZSM-5. Для оценки эффективности разделения получены следующие физико-химические характеристики систем «адсорбент – адсорбат»:

1. теплоты адсорбции в области Генри – по зависимости времени удерживания при низких заполнениях от температуры в режиме идеального вытеснения (примеры приведены на Рис. 1); примечательно, что на цеолитах различия во временах удерживания компонентов смеси существенно выше, чем на АУ;
2. зависимости величины адсорбции индивидуальных компонентов от концентрации газа-адсорбата в режиме идеального смешения;
3. выходные кривые (концентрация компонентов за слоем адсорбента) при адсорбции смесей (см. Рис. 2А);
4. выходные кривые при термической десорбции (см. Рис. 2Б).

Среди исследованных адсорбентов наиболее эффективны цеолиты типов А и Х и активный уголь САУ. Преимуществами АУ являются устойчивость к влаге и более низкие температуры десорбции; преимущества цеолитов – более высокие степени разделения компонентов. Наиболее эффективно разделение газовой смеси после реактора ОКМ и очистка целевого продукта (этилена) могут быть организованы путём сочетания адсорбционных процессов на разных сорбентах и при комбинировании их с мембранным разделением.



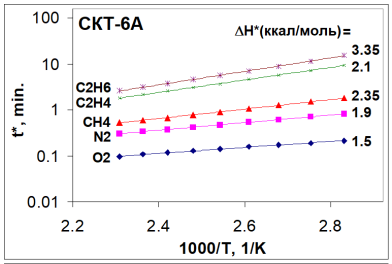
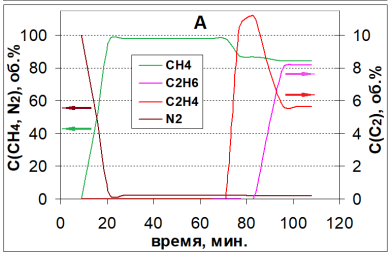


Рис. 1. Зависимости времени удерживания компонентов газовой смеси (~0.1 % в гелии) от обратной температуры и величины теплот адсорбции на цеолите 5А и угле СКТ



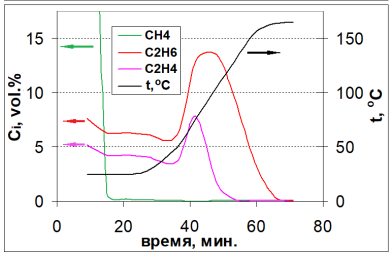


Рис. 2. Выходные кривые этана и этилена при адсорбции их из смеси с метаном (А) и при термической десорбции (Б) после 60 мин. адсорбции (уголь САУ)

Список литературы

[1] Физико-химическое применение газовой хроматографии. Авт.: А.В. Киселев, А.В. Иогансен, К.И. Сакодынский и др. – М.: Химия, 1973. 255 с.

Благодарность

Авторы благодарят ЗАО «ШаГ» (г. Москва) за финансовую поддержку исследования.

УД-I-15

ХИМИЧЕСКИЙ ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН МЕЖДУ УГЛЕКИСЛЫМ ГАЗОМ И ВОДОЙ НА ГЕТЕРОГЕННОМ КАТАЛИЗАТОРЕ В УСЛОВИЯХ ПРОТИВОТОКА

Вораксо И.А., Растунова И.Л., Чеботов А.Ю., Ефимова И.О.

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия, vorakso.i.a@muctr.ru

В настоящий момент основным методом разделения изотопов кислорода являются ректификация воды под вакуумом (коэффициент разделения α = 1,0078-1,0058 при T = 323-353 К) и криогенная ректификация молекулярного кислорода (α = 1,0066-1,0043 при T = 77-99 К). Однако, среди альтернативных способов с точки зрения термодинамики, условий, а также безопасности и доступности рабочих веществ наиболее перспективной выглядит химический изотопный обмен (ХИО) между углекислым газом и водой. Данная система характеризуется значительно большими значениями однократного разделительного эффекта: α = 1,0465-1,0292 при T = 278-373 К [1].

ХИО между углекислым газом и водой является каталитической реакцией. При использовании гетерогенного катализатора процесс идёт в 2 стадии: каталитический изотопный обмен (КИО) между углекислым газом и парами воды на активных центрах катализатора и фазовый изотопный обмен между водой и её парами [1]. Для проведения такого процесса необходимо изолировать активные центры катализатора от жидкой воды. Следовательно, зерна катализатора либо должны иметь гидрофобную поверхность [2], либо быть пространственно отделены от потока жидкой воды [3].

В работе представлены результаты исследования изотопного обмена между углекислым газом и жидкой водой в контактном устройстве мембранного типа (КУМТ), представляющего собой ячейку, в которой катализатор отделён от потока жидкой воды фторполимерной сульфокатионитной мембраной. При этом в парогазовое пространство КУМТ помещались различные катализаторы реакции КИО: Ce_2O_3/Al_2O_3 [4], НТК-10-2ФМ и NiO/Al_2O_3 [5]. Показано улучшение массообменных характеристик процесса (числа единиц переноса (ЧЕП), числа теоретических ступеней разделения (ЧТСР) и коэффициента массопередачи (K_{ox}, м/с)) при увеличении активности катализаторов (k, c^{-1}).

Таблица. Массообменные характеристики изотопного обмена между углекислым газом и водой в КУМТ с различными катализаторами

Катализатор	$T_{КУМТ}$, К	ЧЕП	ЧТСР	$K_{ox}\cdot10^4$, м/с
НТК-10-2ФМ $k^{348\ K}$= 2,35±0,35 c^{-1}	338	0,111±0,010	0,089±0,008	1,94±0,17
	348	0,162±0,012	0,125±0,009	3,34±0,24
	358	0,253±0,017	0,185±0,012	6,77±0,45
Ce_2O_3/Al_2O_3 $k^{348\ K}$= 1,04±0,10 c^{-1}	338	0,074±0,007	0,064±0,006	1,29±0,12
	348	0,116±0,009	0,081±0,006	2,38±0,18
	358	0,210±0,015	0,110±0,008	5,61±0,40
NiO/Al_2O_3 $k^{348\ K}$= 5,02±0,53 c^{-1}	338	0,109±0,010	0,107±0,010	1,90±0,17
	348	0,176±0,014	0,159±0,013	3,61±0,29
	358	0,258±0,019	0,225±0,017	6,89±0,51

Также в работе представлены результаты исследования изотопного обмена между углекислым газом и водой в насадочной колонне, заполненной смесью гидрофобизированного оксида алюминия [2] и гидрофильной насадки в соотношении 1:4. Также был проведён холостой эксперимент на той же колонке, заполненной только спирально-призматической насадкой. Добавление катализатора в насадочный слой привело к значительному улучшению массообменных характеристик процесса. Так, при температуре 65 °C значение высоты, эквивалентной теоретической ступени, уменьшилось с 270 до 44 см, а при температурах 75 и 85 °C составили 29 и 18 см соответственно.

Список литературы

[1] Андреев Б.М. и др. Разделение изотопов биогенных элементов в двухфазных системах. М.: ИздАТ, 2003. 376 с.

[2] Вораксо И.А. и др. Гидрофобный катализатор химического изотопного обмена между углекислыми газом и парами воды // Успехи в химии и химической технологии. 2022. Т. XXXVI, №9 (258). С.77-79.

[3] Контактное устройство для изотопного обмена водорода или углекислого газа с водой: пат. 2 375 107. Рос. Федерация. Растунова И.Л., Розенкевич М.Б. № 2008117569/12; заявл. 06.05.2008; опубл. 10.12.2009.

[4] Вораксо И.А. и др. Каталитическая активность оксидов лантаноидов, нанесённых γ-Al_2O_3, в реакции изотопного обмена кислорода между углекислым газом и парами воды // Химическая промышленность сегодня. 2023. № 6. С.59-66.

[5] Способ получения катализатора обмена углекислого газа и паров воды на основе оксида никеля: пат. 2 831 568. Рос. Федерация. Вораксо И.А., Растунова И.Л., Чеботов А.Ю. № 2024113924, заявл. 22.05.2024; опубл. 09.12.2024.

Благодарность

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д.И. Менделеева «Приоритет 2030».

УД-I-16

ГАЗОГИДРАТНЫЙ МЕТОД КОНЦЕНТРАЦИИ ИОНОВ ЛИТИЯ

Мелешкин А.В., Князьков В.А., Климов Б.А., Чеверда В.В.

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
mav@itp.nsc.ru

Исследование посвящено экспериментальному изучению газогидратного метода концентрации ионов лития (Li^+) из низкоконцентрированных растворов, таких как геотермальные и нефтегазовые рассолы. В условиях роста мирового спроса на литий, обусловленного развитием производства литий-ионных аккумуляторов для электромобилей и возобновляемых источников энергии, традиционные методы добычи лития из солончаков, минералов и термальных вод сталкиваются с рядом ограничений. Эти методы часто связаны с высокими затратами и значительным экологическим воздействием, что стимулирует поиск новых подходов. Газогидратные технологии представляют собой перспективное решение, позволяющее эффективно концентрировать литий из растворов с низким содержанием ионов, минимизируя при этом воздействие на окружающую среду. Кроме того, процесс формирования газовых гидратов обладает синергетическим потенциалом для опреснения воды, что делает его актуальным для решения проблемы дефицита пресной воды в засушливых регионах. Целью данного исследования является экспериментальное изучение процессов формирования и диссоциации газовых гидратов CO_2 в присутствии ионов лития для определения оптимальных условий их селективного захвата в клатратной структуре, а также оценка эффективности метода для добычи лития и опреснения воды.

Эксперименты проводились в специализированном автоклаве с антикоррозийным покрытием, оснащенном высокоточными датчиками давления (диапазон измерений 0,1–10 МПа, погрешность ±0,01 МПа) и температуры (погрешность ±0,1 °C), системой охлаждения и автоматизированной системой сбора данных. Для подготовки растворов использовалась деионизированная вода и хлорид лития (LiCl) с чистотой выше 99,9 %. Концентрация ионов лития в растворах варьировалась от 0,1 до 5 мас. %, а их содержание определялось с помощью потенциометрического метода с использованием ионно-селективного электрода (погрешность измерений ±2 %). Рабочий объем автоклава продувался углекислым газом (CO_2, чистота 99,99 %) и заполнялся газовой смесью под

давлением от 2 до 3 МПа. Раствор охлаждался до температуры 1–4 °C для инициирования процесса формирования гидратов. В ходе экспериментов фиксировались темпы газопоглощения, отражающие кинетику растворения CO_2 и роста гидратов, а также параметры давления и температуры при нуклеации. Полученные гидраты извлекались из автоклава, после чего отжимались с использованием сетчатой пресс-формы и гидравлического пресса с давлением до 10 МПа. Образцы талой воды и отжатого гидрата подвергались анализу для определения массовой концентрации LiCl.

Результаты экспериментов показали, что присутствие ионов лития в концентрациях выше 2 мас. % существенно влияет на процесс формирования гидратов CO_2, увеличивая необходимую степень переохлаждения системы (ΔT = 2–5 °C) для достижения устойчивого роста гидратной фазы. Максимальная скорость газопоглощения наблюдалась при давлении 3 МПа и температуре 2 °C, что указывает на оптимальные условия для формирования гидратов. Анализ талой воды и отжатых гидратов продемонстрировал, что при концентрации LiCl 1–2 мас. %, давлении 3 МПа и температуре 2 °C увеличение концентрации ионов лития в порах клатратной структуры может достигать до 70 %. Помимо концентрации лития, процесс формирования гидратов позволил достичь значительного опреснения воды: содержание солей в талой фазе снижалось на 75–80 %, что подчеркивает потенциал технологии для комбинированного применения в добыче лития и опреснении.

Благодарность

Работа поддержана РНФ (грант № 25-19-00816).

УД-I-17

ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРОШКОВОГО ГРАФИТА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СЖИМАЮЩИХ НАПРЯЖЕНИЙ

Щербакова В.Б., Гринчук П.С., Кияшко М.В., Холод В.М.

Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск
E-mail shch@hmti.ac.by

Процесс Ачесона является основным промышленным способом получения технического карбида кремния – материала, обладающего уникальной комбинацией теплофизических свойств. В основе этого процесса лежит карботермическое восстановление кварцевого песка с помощью кокса при высоких температурах, при этом нагревателем является канал из мелкодисперсного графита, который находится в центральной части плавильной ячейки [1]. Основным способом управления процессом является контроль токовой нагрузки, именно поэтому исследование изменения электропроводности мелкодисперсного графита важно для понимания особенностей и улучшения методов и алгоритмов управления процессом Ачесона.

Измерения электрофизических свойств порошкового графита из канала плавильной ячейки проводились при комнатной температуре. Особенностью данного графита является его высокая пористость и влажность. Помимо мелкого порошка, в образце присутствовали рыхлые агломераты-сростки с размерами порядка 1 см. Для оценки их влияния на электропроводность были проведены измерения для смесей с разным массовым содержанием агломератов при давлениях сжатия до 120 кПа.

Показано, что плотность засыпки в отсутствие нагрузки составляет 200-230 кг/м^3, что говорит о ее высокой пористости. Кроме того, наличие агломератов значительно влияет на форму кривой зависимости плотности от давления. Так, их присутствие уменьшает изгиб кривой изменения плотности. При этом для порошка без крупных агломератов при повышении давления до 90 кПа плотность увеличивается в полтора раза (Рисунок 1 (а)).

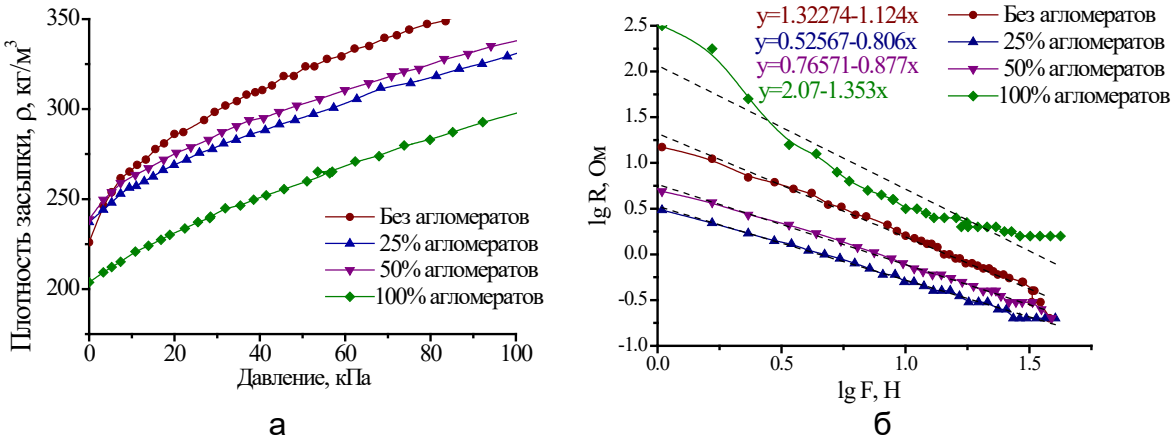


Рисунок 1. Зависимость плотности графитовой засыпки (а) и ее сопротивления (б) от приложенного давления

Известно, что зависимость контактного сопротивления от силы может быть найдена из решений задачи Герца, при этом вид этой зависимости будет степенным, где показатель степени α зависит от формы частиц [2].

$$R_{\text{гр}} \sim F^{-\alpha}$$

Логарифмическое представление экспериментальных данных показывает, что в случае порошкового графита зависимость сопротивления от силы сжатия также может описываться степенной функцией, причем α варьируется от 0.7 до 1.35 в зависимости от содержания агломератов (Рисунок 1 (б)). Данные значения соответствуют габитусу частиц, близкому к сферическому.

Таким образом, была изучена зависимость плотности и электропроводности засыпки от внешнего давления. Показано, что наличие агломератов значительно влияет на электрофизические свойства порошкового графита. Сопоставление полученных данных с теоретическими позволяет предположить близкую к сферической форму частиц углерода и возможность неупругих деформаций при механическом воздействии.

Список литературы

[1] А.П. Гаршин. Новые конструкционные материалы на основе карбида кремния / А.П. Гаршин. – Москва: Юрайт, 2021. – 182 с.

[2] М.С. Разумов, Р.Е. Чаплыгин, П.В. Глазков, О.Н. Мальцев. Исследование зависимости электрического сопротивления железного порошка от усилия сжатия // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2024. Т. 14, № 4. С. 60–70. https://doi.org/10.21869/ 2223-1528-2024-14-4-60-70.

УД-I-18

РАЗРАБОТКА ОПТИЧЕСКИХ И УЛЬТРАЗВУКОВЫХ МЕТОДОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ДИСПЕРСНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ТЕЧЕНИЯ ДЛЯ ВЕРИФИКАЦИИ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ КРУПНОТОННАЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

Кабардин И.К.[1,2], **Меледин В.Г.**[1,2], **Рахманов В.В.**[1,2], **Двойнишников С.В.**[1,2], **Зубанов К.С.**[1], **Гордиенко М.Р.**[1,2], **Какаулин С.В.**[1,2], **Янчат А.Т.**[1,2], **Зуев В.О.**[1,2]

[1]ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия
[2]ФГБУН Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия,
E-mail: ivankabardin@gmail.com

Важнейшим прикладным аспектом химических технологий является создание крупномасштабных химреакторов для получения продукта. Современные научно-инженерные подходы к конструированию химреакторов опираются на газо-гидродинамическое моделирование как инструмент тестирования конструкционных гипотез. Для адекватного предсказательного уровня численной модели, математическое моделирование нуждается в точных исходных данных и экспериментальной валидации расчётов. Измерение газо-гидродинамических характеристик химреакторов является сложной задачей вследствие высокой оптической плотности среды и высоких скоростей течения. Из-за сложности и редкой востребованности данного оборудования, не существует коммерчески доступных решений под конкретные химические процессы. Поэтому разработка измерительного оборудования при исследовании дисперсной составляющей потока в гидродинамической модели химреактора с оптически плотными средами носит эксклюзивный характер. Для снижения удельных энергозатрат требуется поиск методов достижения высокоэффективного массообмена.

Целью данной работы являлась разработка методов лазерной доплеровской анемометрии, волоконно-оптического метода диагностики газосодержания и ультразвуковых методов, а также зондовых эндоскопических методов исследования течения многофазной среды в промышленных химических технологиях.

В настоящее время существует целый ряд методов для диагностики размера пузырей и газосодержания. Все они обладают своими достоинствами и недостатками. Применение оптических методов, которые исследуют среду через иллюминатор часто затруднено в связи с слабой прозрачностью исследуемой

среды. Существует класс методов на основе зондовых оптоволоконных методов и метод диагностики локального газосодержания, которые можно использовать в зондовом исполнении. Диагностические системы на основе таких подходов позволяют измерить локальные распределения размеров пузырей, газосодержания и теплофизических параметров. Примеры применение таких методов встречаются в виде научных статей с применением методов в лабораторных исследованиях. В промышленных технологиях такого рода методы не применялись. Поэтому применение зондов с такого рода методами позволят впервые получить новую информацию о размерах пузырей и о локальном газосодержании в малопрозрачной жидкости, в которой проходит активный химический процесс.

Первый метод – метод лазерной доплеровской анемометрии, позволяющий измерять поля скоростей в двухфазных потоках. Метод измеряет частоту доплеровского сдвига от трассирующих частиц, проходящих через измеряемый объем. Возможности метода позволяют измерять три составляющие вектора скорости с погрешностью не более 0,5 %. Второй метод представляет собой оптоволоконный метод локального измерения газовой фракции. Метод позволяет регистрировать свет, отраженный от газовой среды через оптическое волокно. Третий метод основан на ультразвуковом измерении доплеровского сдвига от неоднородностей в двухфазном потоке. Погрешность двух последних методов не превышает 10 %.

Приведены результаты применения методов измерения кинематических параметров потока и газосодержания в различных технологических приложениях. Показаны как возможности удаленного применения методов, так и реализация в пробном варианте. Результаты применения методов позволили получить новые фундаментальные механизмы и создать новые экспериментальные базы данных для проверки численных расчетов.

Список литературы

[1] Меледин В.Г. Информационная оптоэлектрическая диагностика: Наука и промышленные технологии — Новосибирск: «Академиздат», 2015. — 142 с.

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-79-20007, https://rscf.ru/project/25-79-20007/.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ II.
РАЗРАБОТКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СХЕМ РЕАКЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

УД-II-1

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ РЕАКТОРА РАЗЛИЧНОЙ КОНФИГУРАЦИИ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ПРЕВРАЩЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА В ЭЛЕМЕНТАРНУЮ СЕРУ

Сальников А.В., Хайрулин С.Р.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,
sergk@catalysis.ru

Утилизация токсичного сероводорода с получением элементарной серы – важнейшая проблема для экологически безопасного развития нефтехимических и газохимических производств. В работе представлены процессы очистки от сероводорода с получением востребованных веществ: элементарной серы – производство минеральных удобрений, и водорода – «зеленая» экономика.

1. Селективное окисление H_2S в псевдоожиженным слое катализатора

Процесс окисления сероводорода до элементарной серы характеризуется высокой экзотермичностью [1], а его реализация при концентрации H_2S в исходном газе ≥ 10 % об. требует решения проблемы утилизации выделяющегося тепла. Для подержания температуры в диапазоне достижения оптимальной селективности образования серы (250÷300 °C) были предложены конструкции реакторов с кипящим слоем сферического катализатора (рисунок 1). Такая организация процесса позволила создать на базе результатов фундаментальных исследований ряд промышленных установок для утилизации H_2S в составе различных газов [1], Такие установки эффективно используются как альтернатива крупнотоннажного процесса Клауса.

2. Прямое окисление H_2S в реакторе с блочным катализатором

В условиях, когда потери давления должны быть минимальными или очищаемый газ характеризуется низким избыточным давлением оптимальным является использование блочных катализаторов сотовой структуры, одним из основных достоинств которых является низкое газодинамическое сопротивление и реализация эффективного протекание целевого процесса при температурах существенно ниже точки росы серы (140-150 °C) в гораздо более длительном временном интервале времени без регенерации. Такие уникальные свойства были использованы при создании установок очистки геотермального пара (рисунок 2а) и очистки хвостовые газы процессов Клауса (рисунок 2б).

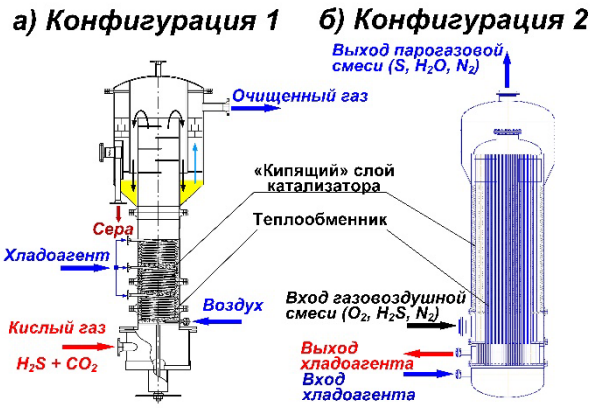


Рисунок 1. Реактор с кипящим слоем

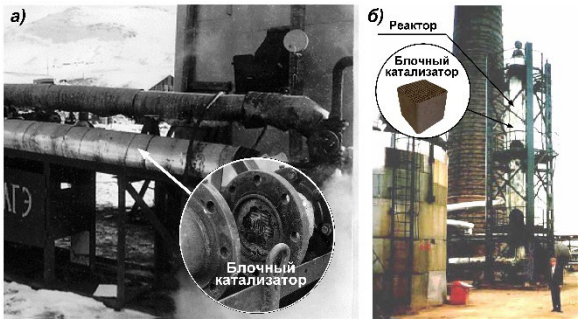


Рисунок 2. Установка очистки геотермального пара (а) и хвостовых газов процесса Клауса (б)

3. Разложение сероводорода в мембранном каталитическом реакторе

Процесс прямого окисления не позволяет полностью использовать потенциал H_2S, поскольку содержащийся в нем водород связывается в виде воды. Альтернативным является процесс разложения H_2S продуктами которого являются сера и водород. Использование каталитического мембранного реактора (рисунок 3) является оптимальным способом повышения эффективности этого «термодинамически» затрудненного процесса за счет селективной проницаемости водорода через мембрану. Результаты исследований показали, что в различных типах каталитических мембранных реакторах, конверсия H_2S достигает величины ~70 % при 900 °C [2].

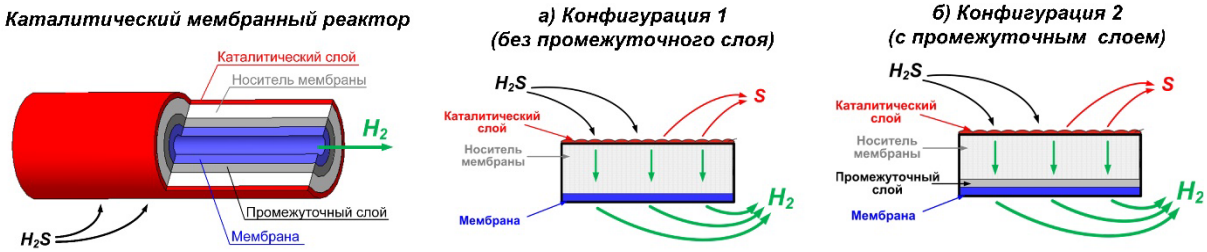


Рисунок 3. Схема каталитического мембранного реактора разложения H_2S

Список литературы

[1] Khairulin S., Kerzhentsev M., Salnikov A., Ismagilov Z.R. Direct Selective Oxidation of Hydrogen Sulfide: Laboratory, Pilot and Industrial Tests. // Catalysts. 2021. V.11. N9. 1109:1-45.

[2] Хайрулин С.Р., Сальников А.В., Керженцев М.А., Исмагилов З.Р. Синтез водорода путем разложения сероводорода в каталитическом мембранном реакторе // Химия в интересах устойчивого развития. 2021. Т.29. №1. С.100–108.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0033).

УД-II-2

ЭЛЕКТРОДУГОВЫЕ ПЛАЗМЕННЫЕ РЕАКТОРЫ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Савчин В.В., **Моссэ А.Л.**

ГНУ Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси,
ул. П. Бровки, 15, 220072, Минск, Беларусь
mosse@itmo.by

В настоящее время разработана классификация известных плазменных реакторов, в которую включены электродуговые плазменные реакторы, необходимые для решения задач крупнотоннажных процессов, где их мощность должна составлять от нескольких до десятков мегаватт, а производительность — от нескольких до десятков тонн. В настоящее время такие параметры могут быть достигнуты только за счет электродугового нагрева плазмообразующего газа в нагревателях-плазмогенераторах различной конструкции и последующей обработки жидких и дисперсных компонентов сырья в электродуговых плазменных реакторах.

Для эффективной обработки газообразных и жидких систем, а также дисперсных и кусковых материалов в ряде работ показана перспективность использования широко применяемого плазменного реактора с много-струйной камерой смешения. Плазменные реакторы с много-струйной камерой смешения характеризуются в ряде случаев достаточно равномерным распределением температуры и скорости в начальном сечении канала, т.е. в плоскости ввода плазменных струй, возможностями организации осесимметричной или распределенной инжекции обрабатываемых сырьевых компонентов, а также повышения мощности реактора за счет увеличения числа плазменных генераторов и единичной мощности каждого из них. К другим достоинствам плазменных реакторов такого типа следует отнести возможность организации на основе многоструйной камеры смешения одно-, двух- и многоструйных (многомодульных) схем реакторов. Эта возможность способствует повышению их мощности и эффективности и расширяет область их применения за счет создания плазменного потока с определенным распределением температуры по сечению канала реактора и по его длине. Особый интерес представляет возможность управления структурой плазменного потока, формируемого в камере смешения, путем изменения геометрии камеры смешения, способа

инжекции плазменных струй и режимов работы плазменных генераторов. Исследована структура плазменного потока при его формировании в цилиндрических и конических камерах смешения с радиальной и тангенциальной инжекцией плазменных струй. Проведены исследования теплообмена потоков плазмы воздуха, азота и водорода в цилиндрических каналах плазменных реакторов, осесимметричных камерам смешения. Эти и другие результаты использованы при разработке методов расчета плазменных реакторов и режимов обработки в них дисперсных материалов и растворов.

На основе экспериментальных данных разработаны технические условия и подготовлен ряд проектов плазменных установок с реакторами модификаций типа Атол, Плутон и УП с подведенной мощностью до 1,5 МВт. Они применяются для исследования и промышленного освоения различных технологических процессов. Ряд известных схем и конструкций электродуговых плазмотронов, применяемых в комплексе с ними, свидетельствуют о технической готовности и возможности внедрения плазменных установок мощностью до 1,5 МВт, что соответствует средней производительности установки более 0,5 т/ч, а также реакторов значительно большей мощности (до 10,0 МВт) и производительности.

Также следует отметить возможность применения в плазменных реакторах не только электродуговых плазмотронов постоянного и переменного тока, но и плазменно-топливных интенсификаторов, представляющих собой гибрид плазмотрона и топливной горелки. При этом вклад электрической мощности, подводимой к плазмотрону, и вклад тепла сгорания топлива в горелке можно регулировать в широких пределах.

Что касается электродуговых нагревательных устройств, то результаты разработки, исследований и их практического применения получены ранее. Показано, что для работы плазменных нагревателей может быть использован, полученный ранее унифицированный ряд плазменных генераторов мощностью от 20 до 200 кВт, т.е. трехструйных плазменных модулей общей мощностью до 0,5-0,6 МВт. Кроме того, для плазменных модулей мощностью до 1,5 МВт разработаны единичные опытные образцы плазменных генераторов мощностью до 0,5 МВт. Эти плазменные реакторы могут быть выполнены в стационарном и мобильном исполнении.

УД-II-3

ПИРОЛИЗ ЛИГНИНА С ПОМОЩЬЮ РЕАКТОРА ИНДУКЦИОННОГО НАГРЕВА

Пензик М.В., Котельникова Д.С., Козлов А.Н.

ФГБУН Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, Иркутск, Россия, penzik@isem.irk.ru

Лигнин является крупнотоннажным побочным продуктом переработки растительного сырья. В настоящее время только 2 % технического лигнина подвергается переработке, остальное сжигается или складируется. С другой стороны, разработка эффективных методов переработки лигнина может позволить получать различные ценные продукты: компоненты топлив, мономеры, водородсодержащий газ, адсорбенты для очистки от техногенных загрязнений.

Ранее нами предложен и изучен способ пиролиза древесины с помощью индукционного нагрева в кварцевом реакторе [1]. Для быстрого и равномерного нагрева сырья в реактор загружается смесь биомассы и различных металлических засыпок. В зависимости от состава металлической засыпки можно получать газа с различным соотношением H_2:CO. Стоит отметить, что имеется ограниченное количество работ, посвященных использованию индукционного нагрева для пиролиза биомассы [2,3].

На рис. 1 показана динамика выделения основных газов (H_2, CH_4, CO, CO_2) при пиролизе смеси лигнина со стальными шариками (а), с железными опилками (б) и смеси со стальными шариками и дополнительным слоем железных опилок (в). Максимальная температура в реакторе составляла 650°C при скорости нагрева 250 °C/мин.

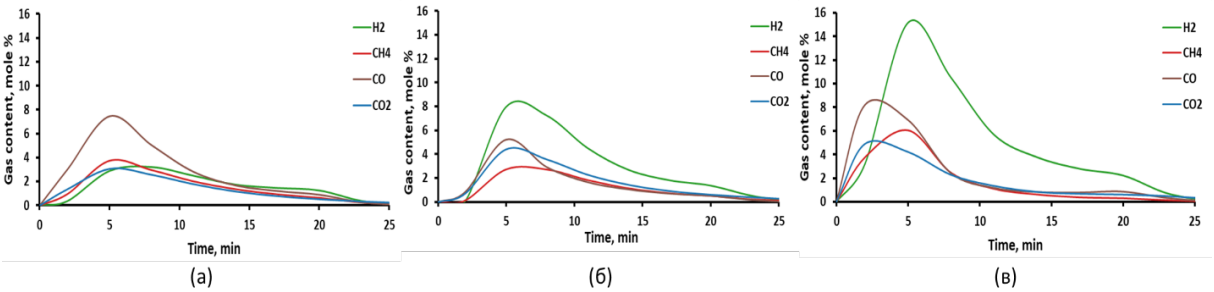


Рис. 1. Динамика выделения основных газов (H_2, CH_4, CO, CO_2) при пиролизе лигнина в смеси со стальными шариками (а), железными опилками (б) и смеси со стальными шариками и дополнительным слоем железных опилок (в)

При использовании железных опилок наблюдается значительное увеличение содержания водорода до 20,7 %, а в случае смеси со стальными шариками и дополнительным слоем железных опилок содержание водорода составляет 39,5 % (Рис. 2, слева). Это объясняется разложением образующихся жидких продуктов пиролиза на поверхности железа, что подтверждается снижением содержания образующихся смол (Рис. 2, справа).

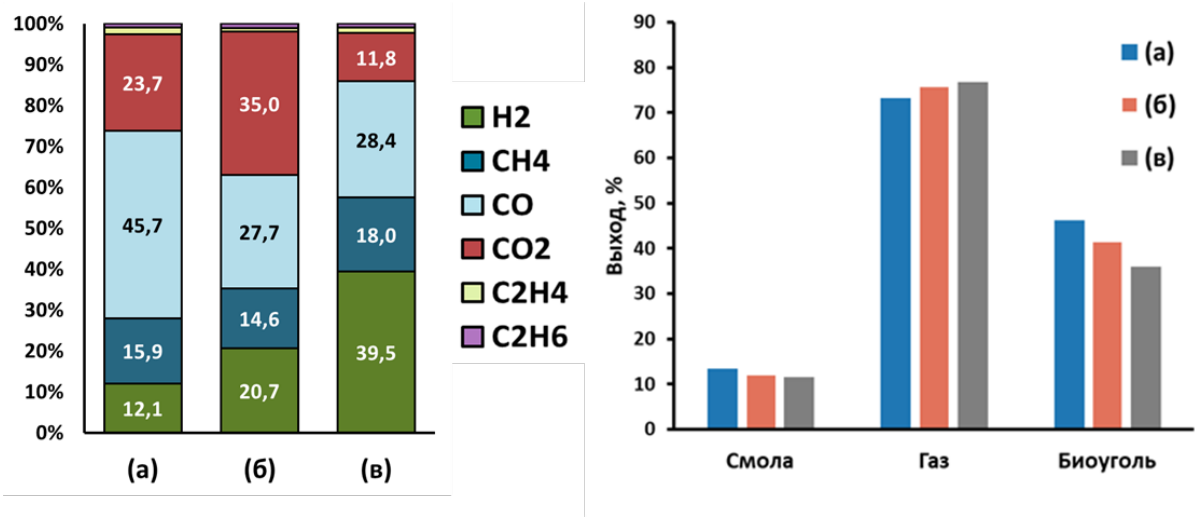


Рис. 2. Состав газа (слева) и выходы смолы, газа и биоугля (справа) при пиролизе лигнина в смеси со стальными шариками (а), железными опилками (б) и смеси со стальными шариками и дополнительным слоем железных опилок (в)

Состав полученных газообразных, жидких и твердых продуктов пиролиза изучен с помощью газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии (ГХ-МС), синхронного термического анализа (ТГ/ДСК-МС).

Список литературы

[1] Penzik, M.V., Zhang, S., Badenko, V.V., Li, B., & Kozlov, A.N. (2025). A method for hydrogen-enriched syngas production from biomass via induction heating. Fuel, 382, 133817.

[2] Muley, P.D., Henkel, C., Abdollahi, K.K., Marculescu, C., Boldor, D. A critical comparison of pyrolysis of cellulose, lignin, and pine sawdust using an induction heating reactor // Energy conversion and management / -2016. – V.117. – P.273-280.

[3] Sabogal, O.S., Valin, S., Thiery, S., Salvador, S. Design and thermal characterization of an induction-heated reactor for pyrolysis of solid waste // Chemical Engineering Research and Design. – 2021. – V. 173. – P.206-214.

Благодарность

Исследование выполнено в рамка проекта Министерства образования и науки Российской Федерации_БРИКС № 13.2251.21.0241 (электронный бюджет № 075-15-2024-659).

УД-II-4

ГИБРИДНЫЕ БИОРЕАКТОРЫ

Кузнецов А.Е.

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия, ae-kuz@yandex.ru

Гибридные биореакторы можно отнести к биотехнологическим системам нового поколения, целенаправленно воспроизводящим и совмещающим по месту и во времени в едином аппарате природные абиотические и биотические реакции и каталитические процессы в контролируемых условиях. Примерами гибридных (совмещенных) систем являются мембранный биореактор (МБР), ферментация с адсорбцией, с экстракцией, с эвапорацией и др. Разработка гибридных биореакторов предусматривает: подбор режимов совместимости абиотических и биотических процессов в едином пространстве и во времени; использование адаптивной микроэволюции, автоселекции для отбора стабильных микроэкосистем с желаемыми свойствами в условиях стрессовых воздействий абиотических факторов; учет функционирования систем репарации и фоторепарации, наличия перекрестных реакции между различными видами стресса и системами стресс-ответа в клетках микроорганизмов, регуляторных функций низких доз стрессорных воздействий, например, активных форм кислорода (АФК) применительно к живым клеткам микроорганизмов.

Различные технологические решения, основанные на совмещении разнородных процессов, были апробированы нами применительно к микробиологическому синтезу, при сочетании химической и биологической деструкции стойких органических загрязнений, в системах высокоинтенсивного культивирования с использованием мембранного биореактора, адсорбционной культуры, в режимах высокоплотностного культивирования с подпиткой субстратом, при биологической очистке сточных вод, при контролируемом оксидативном воздействии на микробиологические процессы. Показаны:

- возможность резкого повышения (в десятки раз) продуктивности МБР при получении этанола и молочной кислоты при снижении расхода дорогостоящих компонентов питательной среды (ростовых факторов) и отсутствии образования отходов в виде избыточной биомассы продуцента;
- резкое (в 20-30 раз) повышение выхода целевого продукта – бактериородопсина при культивировании с адсорбентом галобактерий-

продуцентов с одновременным повышением стабильности процесса и минимальном содержании каротиноидов (как компонентов антиоксидантных систем в клетках галобактерий); по результатам этих исследований была разработана не имеющая мировых аналогов ресурсосберегающая технология получения биомассы галобактерий и бактериородопсина;

- улучшение показателей биосинтеза при высокоплотностном культивировании с дробной подпиткой субстратом (при получении кормовых дрожжей), при молочнокислом и этанольном брожении с одновременным воздействием фотохимических факторов (малых доз АФК) и видимого света («солнечный биореактор», «искусственная пероксисома»);
- - существенное улучшение показателей биологической очистки сточных вод и возможность полной минерализации токсичных загрязнений (на примере фенола) при совместном одновременном воздействии микробиологических и малых доз химических и фотохимических факторов (АФК, УФА-излучение, видимый свет) при снижении затрат на разложение поллютанта по сравнению с использованием только химических или фотохимических методов. По результатам этих исследований разработана не имеющая мировых аналогов ресурсосберегающая технология очистки сточных вод с регулируемым оксидативным воздействием (с контролируемым оксидативным стрессом) – РОВ-технология. Технология может быть реализована на сооружениях аэробной биологической очистки сточных вод на основе аэротенков и других систем с активным илом, в режиме с полным возвратом активного ила с повышением скорости биодеструкции, снижением содержания остаточных загрязнений при относительно небольших дополнительных эксплуатационных затратах, а также при биологическом удалении фосфора в SB-реакторах с гранулированным илом. Опытно-промышленные испытания РОВ-технологии на поселковых и городских очистных сооружениях в Московской области подтвердили положительные эффекты, наблюдавшиеся в лабораторных исследованиях. Разработанная РОВ-технология может быть отнесена к наилучшей доступной из существующих на сегодня технологий одностадийной аэробной биологической очистки.

УД-II-5

ПЛАЗМЕННЫЙ РАЗРЯД В ЖИДКОСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КАВИТАЦИИ КАК МЕТОД СИНТЕЗА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Булычев Н.А.

Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), Москва, Россия
nbulychev@mail.ru

Работа направлена на исследование плазмохимических процессов, которые определяются сочетанием воздействия на жидкофазные среды термически неравновесной низкотемпературной плазмы и интенсивных ультразвуковых колебаний в режиме развитой кавитации. Разработанный метод реализации плазмохимических превращений представляет значительный интерес и преимущества для создания новых наноразмерных материалов с особыми свойствами, т.к. позволяет направленно варьировать электрофизические и акустические характеристики процесса при осуществлении плазмохимических реакций. Практическим следствием решения данной проблемы является создание метода направленного синтеза значимых веществ. Отличительным признаком и существенным преимуществом данного метода является то, что одновременное воздействие на зону реакции термически неравновесной плазмы и ультразвуковой кавитации приводит к созданию условий, недостижимых в других случаях и обуславливает протекание реакций при высокой локальной концентрации энергии и активных частиц [1-4].

Для реализации плазмохимических превращений в жидкофазных средах было сконструировано и изготовлено экспериментальное оборудование, включающее плазмохимический реактор с ультразвуковым волноводом, генератор ультразвуковых колебаний высокой интенсивности и источник питания плазменного разряда.

Было установлено, что в таком акустоплазменном разряде возможно синтезировать наночастицы металлов и их оксидов различного состава, в том числе наночастицы полиметаллических оксидов. При этом размер первичных наночастиц находился на уровне 2 – 50 нм. в зависимости от материала. При интенсивном воздействии ультразвука удавалось получать узкие размерные фракции наночастиц. В ходе экспериментов была также обнаружена возможность синтезировать наноразмерные материалы типа «ядро-оболочка».

В работах по этому направлению показано, что синтезированные в таких условиях наночастицы различного состава обладают активированной поверхностью с большим количеством нескомпенсированных связей и дефектов в результате действия на них интенсивного ультразвука и тем самым способны к эффективному взаимодействию с органическими и неорганическими соединениями, матрицами и т.д., что дает возможность создавать на их основе новые гибридные органо-неорганические композиционные материалы.

Продолжением данного подхода является создание на основе синтезированных дисперсных систем наночастиц оксидов металлов композиционных материалов с использованием органической полимерной матрицы на основе полиэтилена и винилацетата, пригодных для применения в качестве функциональных и конструкционных материалов, исследование принципов их формирования и свойств, в том числе с использованием ультразвуковой кавитации, а также создание композиционных материалов с заданными характеристиками.

Из полученных результатов можно сделать вывод, что применение предварительной ультразвуковой обработки наночастиц наполнителя перед их введением в полимерную матрицу повышает гомогенность частиц и обеспечивает их более равномерное распределение в композиционном материале, что положительно сказывается на физико-механических свойствах.

Список литературы

[1] O.A. Butusova, M.O. Kaptakov, A.V. Babaytsev, N.S. Okorokova, B.A. Garibyan, S.A. Filatov, N.A. Bulychev. Plasma discharge in liquid media under the effect of ultrasound for the synthesis of fillers for polymer composites with enhanced mechanical strength and gas permeability, High Temperature Material Processes, 2024, Vol. 28, No. 4, pp. 1-9.

[2] N.A. Bulychev. Facile synthesis of stable nanosized silver clusters in plasma discharge under ultrasonic cavitation, Fusion Science and Technology, 2024, Vol. 80, I. 7, pp. 916-921.

[3] O.A. Butusova, Yu.G. Mikhaylov, V.A. Mamonov, N.A. Bulychev. Study of hydrogen permeability in polymer films with metal oxide nanoparticles synthesized in plasma under the effect of ultrasound, International Journal of Hydrogen Energy, 2024, Vol. 87, pp. 68-75.

[4] N.A. Bulychev. Physical and mechanical properties of polymer films with tin oxide nanoparticles obtained in plasma discharge under the effect of ultrasound, High Energy Chemistry, 2024, Vol. 58, Suppl. 2, pp. S111–S114.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Проект № 23-19-00540).

УД-II-6

СТРУКТУРИРОВАННЫЕ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ КАК ОСНОВА ДЛЯ НОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОКИСЛЕНИЯ ДИОКСИДА СЕРЫ

Загоруйко А.Н.[1,2]

[1]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2]*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*
E-mail: zagor@catalysis.ru

Для создания новых процессов окисления SO_2 в сернокислотных производствах может быть использован стекловолокнистый катализатор (СВК) с низким содержанием платины (менее 0.1 %) на основе структурированного стекловолокнистого носителя [1,2]. Катализатор показал уникально высокую активность в реакции окисления диоксида серы и температуру «зажигания» реакции ~ 300 °C, что намного ниже, чем у известных мировых аналогов (для наиболее активных ванадиевых катализаторов она составляет не менее ~ 360-400 °C).

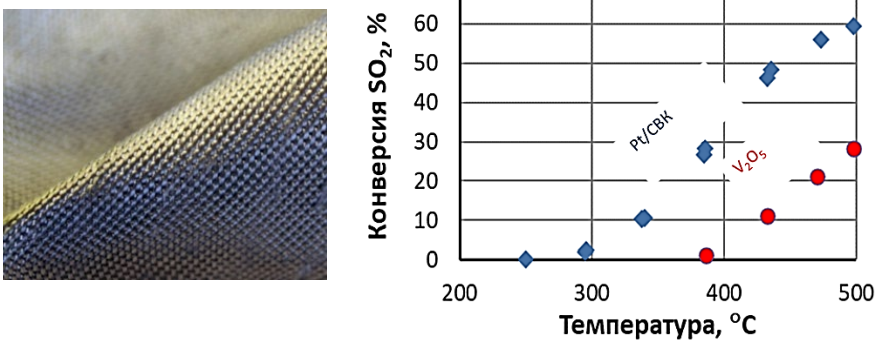


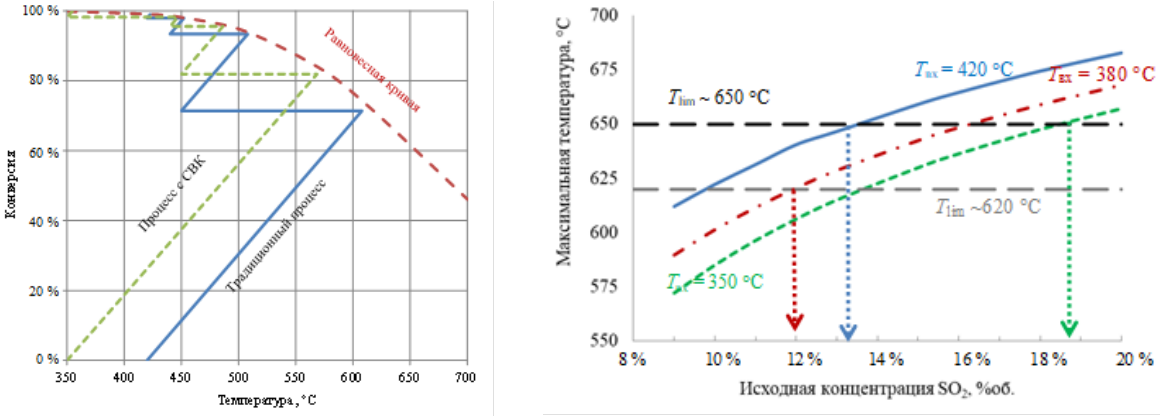
Рисунок 1. Внешний вид Pt/СВК (слева) и зависимость конверсии SO_2 от температуры на платиновом СВК и традиционном ванадиевом катализаторе

Ресурсные испытания Pt-содержащего СВК на пилотной установке в реальных газах сернокислотного производства (7-9 % SO_2) показали отсутствие его дезактивации в течение более 900 часов. СВК может применяться в составе структурированных картриджей, которые отличаются от слоев традиционных катализаторов более высокой наблюдаемой активностью, достигаемой как за счет высокой активности самого катализатора, так и за счет высокой эффективности массообмена в картриджах.

Pt/СВК может быть использован в традиционных сернокислотных реакторах как вместо традиционного ванадиевого катализатора, так и в комбинации с ним. Наиболее целесообразно его размещение в качестве форслоя в первом слое аппарата, а также в его последнем слое.

Снижение начальной температуры реакции в последнем слое до 350 °C обуславливает улучшение условий для реакции окисления SO_2, что, в случае 4-полочного аппарата, позволяет повысить общую конверсию диоксида серы с

98.9 % до 99.8 % (рис. 2а), что соответствует снижению выбросов диоксида серы с отходящими газами более чем в шесть раз.



а б

Рисунок 2. а) X-T-диаграмма процесса окисления диоксида серы в четырехслойном адиабатическом реакторе (состав исходной смеси – 9 % об. SO_2, 14 % O_2) и б) Равновесная адиабатическая температура на выходе из слоя катализатора в зависимости от концентрации диоксида серы и температуры газа на входе в 1-ый слой

Pt/СВК, способные работать при входной температуре ~350 °C и имеющие предел термостойкости не ниже ~650 °C, позволяют весьма существенно, по сравнению с ванадиевыми катализаторами (рис. 2б), увеличить предельную концентрацию SO_2 (до ~18,5 %) на входе в аппарат. Это открывает возможности для повышения производительности существующих сернокислотных установок до 1,5 раз фактически без дополнительных капитальных затрат только за счет замены традиционного ванадиевого катализатора в первом слое реактора на Pt/СВК.

Также перспективной областью применения Pt/СВК являются процессы окисления диоксида серы в металлургических газах, которые могут содержать переменные (до 1 % об.) CO. В этом случае эффективное окисление CO при температурах ниже точки зажигания реакции окисления SO_2 позволит существенно стабилизировать процесс и исключить неизбежные при использовании ванадиевого катализатора скачки температуры, негативно влияющие на общую эффективность процесса.

Список литературы

[1] А.Н. Загоруйко, С.А. Лопатин. Структурированные каталитические системы на основе стекловолокнистых катализаторов. Новосибирск, издательство НГТУ, 2018, 204 с.

[2] K. Golyashova, et al. Chem. Eng. J., Volume 378, 2019, https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122194.

Благодарности

Данная работа проводилась при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственных заданий для Тюменского государственного (FEWZ-2024-0015) и для Института катализа им. Борескова (проект FWUR-2024-0037).

УД-II-7

УНИВЕРСАЛЬНАЯ РАСЧЕТНАЯ МОДЕЛЬ РЕАКТОРОВ ПАРОВОЙ И ПАРОКИСЛОРОДНОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА

Заев И.А.[1], Зведенюк Л.Б.[1], Ивчик Л.Ф.[1], Кедало Е.М.[1], Книжник А.А.[1], Лебедев А.В.[1], Соколов А.А.[1], Хорьков В.А.[1], Потапкин Б.В.[1], Воронин А.В.[2], Иванов Д.В.[2], Усачев В.Б.[2]

[1]ООО «Кинтех Лаб», Москва, Россия
[2]АО «НИИ НПО «ЛУЧ», Протвинский филиал, Протвино, Московская область
zaev@kintechlabs.com

АО «НИИ НПО «ЛУЧ» выполняет работы по проектированию химико-технологической части (ХТЧ) атомной энерго-технологической станции (АЭТС), в рамках которой предполагается реализовать технологический процесс риформинга метана с целью получения водорода и водород-содержащих газов как конечных продуктов. Согласно принятой технологической схемы, в состав ХТЧ входят реакторы паровой конверсии метана с газовым обогревом и парокислородной конверсии метана.

Обоснование принимаемых конструкторских решений при проектировании реакторов может быть выполнено на основе моделирования. В виду многоуровневого и мультифизичного характера физико-химических процессов в указанных реакторах, функционал доступных на рынке коммерческих программных продуктов не позволяет описать их в полной мере. ООО «Кинтех Лаб» разработана универсальная расчетная модель, позволяющая выполнять гидродинамическое моделирование физических и химических процессов в реакторах с учетом их конструкции.

Разработанная модель состоит из следующих основных компонент. Во-первых, базовая программная библиотека, включающая модели расчета термодинамических свойств и молекулярных коэффициентов переноса многокомпонентных газовых сред на основе атомно-молекулярных свойств индивидуальных веществ, специализированные алгоритмы решения жестких дифференциально-алгебраических систем уравнений химической кинетики и модели идеальных химических реакторов, используемые для генерации табличных данных. Данная программная библиотека лежит в основе программных продуктов, ранее разработанных ООО «Кинтех Лаб» [1]. Во-вторых, специализированная программная библиотека, реализующая модели расчета физико-химических свойств реагирующего потока в засыпке каталитических гранул. Данная программная библиотека используется для расчета эффективных коэффициентов тепло- и массопереноса в засыпке с учетом их анизотропии, коэффициентов теплообмена потока со стенками,

входящих в состав уравнений течения реагирующего потока. Также в рамках библиотеки реализована модель отдельной гранулы катализатора с целью расчета коэффициента использования гранулы на основе решения одномерной задачи типа «реакция-диффузия» в порах, что позволяет учесть эффекты диффузионного лимитирования реакций на поверхности катализатора. В-третьих, разработана модель для описания трехмерного турбулентного течения реагирующего газа в камере сгорания реактора парокислородной конверсии на основе модели турбулентного горения типа флеймлетов, включая подмодели образования сажи, и течения парогазовой смеси в каталитической секции реакторов паровой и парокислородной конверсии. При программной реализации алгоритмов формальная запись уравнений в частных производных, их дискретизация на конечно-объемной сетке и итерационное решение полученной системы алгебраических уравнений выполнены с использованием программной библиотеки OpenFOAM [2].

Разработанная модель позволяет решать следующие задачи: 1) моделирование течения, каталитической конверсии метана и теплообмена в реакционных трубах газообогреваемого реактора паровой конверсии метана, 2) моделирование параметров пламени и профиля температуры/состава газа в камере сгорания и каталитической секции реактора парокислородной конверсии метана, 3) определение теплового состояния элементов конструкции реакторов с учетом конвективного и радиационного переноса тепла, 4) оценка сажеобразования в камере сгорания реактора парокислородной конверсии. Исходными данными для моделирования являются конструкция реактора, параметры катализатора, состав парогазовой смеси.

Разработанная расчетная модель валидирована на доступных в открытой литературе экспериментальных данных с лабораторных установок по следующим параметрам: 1) характеристики турбулентного пламени [3, 4], 2) паровой риформинг метана [5, 6].

Список литературы

[1] https://www.kintechlabs.com/

[2] https://openfoam.org/

[3] Richter A., et al., A large-scale benchmark for the CFD modeling of non-catalytic reforming of natural gas based on the Freiberg test plant HP POX, Fuel, Volume 152, 2015, Pages 110-121.

[4] Barlow, R. S. and Frank, J. H., Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 27, 1998, Pages 1087-1095.

[5] Сосна, Михаил Хаймович. Энергосберегающая технология конверсии метана : автореферат дис. ... доктора технических наук : 05.17.01, 05.17.08 / Сосна Михаил Хаймович ; [Место защиты: Московский химико-технологический институт имени Д. И. Менделеева]. – Москва, 1990. – 32 с.

[6] Rostrup-Nielsen J. R., Christiansen L. J., Hansen J. H. B. Activity of steam reforming catalysts: role and assessment. Applied Catalysis. Volume 43, 1988, No. 2, Pages 287-303.

УД-II-8

РАЗРАБОТКА МОБИЛЬНОЙ УТИЛИЗАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ДВУХСТАДИЙНОГО ПРОЦЕССА ПИРОЛИЗА

Трушляков В.И., Давыдович Д.Ю.

Омский государственный технический университет, Омск, Россия
info@omgtu.ru, d-davydovich@mail.ru

Дальнейшее освоении Арктики связано со значительными объёмами завозимых горюче-смазочных материалов и, соответственно, нефтепродуктовой тары (НПТ). Традиционное использование металлической НПТ приводит к значительным нагружением на окружающую среду, увеличению затрат на её предварительную утилизацию и последующую транспортировку в места окончательной утилизации.

В работах [1-3] рассмотрены предложения по созданию НПТ на основе полимерных композиционных материалов, обеспечивающих условия функционирования в условиях Арктики, с последующей её утилизацией на мобильной утилизационной системе (МУС), которая предусматривает модульный состав, обеспечивающий её доставку в районы Арктики.

На рис. 1 приведена схема МУС, реализующей двухстадийный процесс.

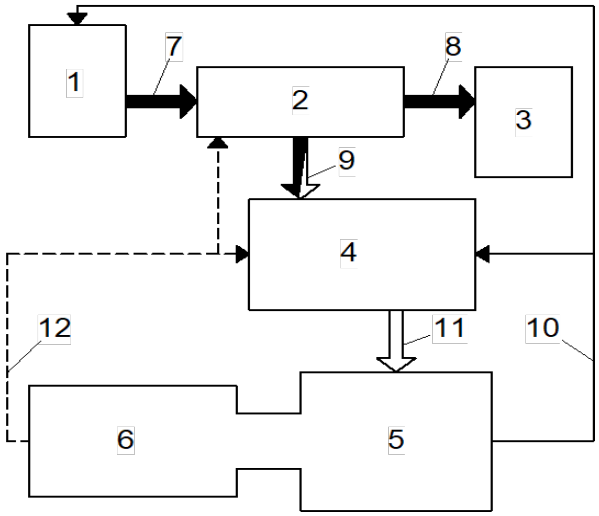


Рис. 1. Состав подсистем МСУ:
1 – загрузочный узел утилизируемого сырья; 2 – индукционный цилиндрический реактор; 3 – узел выгрузки твердых остатков пиролиза; 4 – микроволновый реактор; 5 – газопоршневой двигатель (ГПА); 6 – электрогенератор ГПА; 7 – подача твердого утилизируемого сырья; 8 – подача твердых остатков пиролиза; 9 – подача парогазовой смеси; 10 – подача дымовых газов ГПА; 11 – подача синтез-газа; 12 – подача электричества

Преимущества двухстадийного процесса пиролиза перед одностадийным – это возможность оптимизации результатов каждой стадии под требуемую задачу:

– пиролиз утилизируемого материала, отделение твёрдой фракции и получение парогазовой смеси на стадии индукционного нагрева;

– повышение выхода водорода и энергетической составляющей синтез-газа на этапе микроволнового нагрева;

– минимизация или полное исключение образования жидких фракций на этапе микроволнового нагрева.

МУС предусматривает в своём составе автономную энергетическую установку на основе ГПА, работающего на продуктах пиролиза, в частности, обогащённом синтез-газе, получаемого на второй стадии процесса пиролиза. Производительность МУС определяется мощностью ГПА, обеспечивающим электричеством функционирование всех подсистем МУС, соответственно, мощность ГПА определяется массовой производительностью и энергетической составляющей обогащённого синтез-газа на второй стадии процесса пиролиза.

Список литературы

[1] V.I. Trushlyakov, A.V. Fedyuhin, D.Yu. Davydovich Development of a Comprehensive Theoretical and Experimental Methodology for Evaluating the Parameters of Recycling by the Pyrolysis of Plastic Based on Polycarbonate and Polyethylene/ Russian Journal of Physical Chemistry B, 2024, Vol. 18, No. 2, pp. 582–591. DOI: 10.1134/S1990793124020325.

[2] Трушляков В.И., Давыдович Д.Ю., Федюхин А.В. Патент РФ № 2824773 F23G 5/027, B09B 3/00. Способ утилизации углеродсодержащего материала в автономной малогабаритной утилизационной модульной установке и устройство для его реализации.

[3] Русских Г.С., Трушляков В.И. Концепция жизненного цикла полимерной нефтепродуктовой тары, эксплуатируемой в районах Арктики, с возможностью последующей утилизации// Состояние и перспективы развития современной науки по направлению «Новые материалы и энергетика в Вооружённых силах РФ»: сб. ст. науч.-техн. конф. (Анапа, 20 апр. 2022 г.). – Анапа: ЭРА, 2022. – С. 9-14. https://www.elibrary.ru/item.asp?id=49432775.

УД-II-9

ПРОЦЕСС УПРАВЛЯЕМОГО КОНДИЦИОНИРОВАНИЯ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ УГОЛЬНЫХ ТЭЦ ТРИОКСИДОМ СЕРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Голяшова К.Е.[1,2], **Зажигалов С.В.**[1,2], **Загоруйко А.Н.**[1,2]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
g.k.e.95@mail.ru

На угольных ТЭЦ зола удаляется электрофильтрами; в то же время степень очистки газов при высоком удельном электрическом сопротивлении золы существенно снижается. Для повышения эффективности улавливания летучей золы применяется технология кондиционирования дымовых газов SO_3. Данная технология заключается в контролируемом введении в газовый поток небольших количеств триоксида серы, который сорбируется на поверхности золы, тем самым снижая электрическое сопротивление. Получать SO_3 можно путём каталитического окисления SO_2, который образуется в результате сгорания соединений серы, содержащихся в угле.

В работе [1] было показано, что структурированные каталитические системы на основе платиновых стекловолокнистых катализаторов обладают низкой температурой зажигания и высокой активностью в реакции окисления SO_2 в SO_3, а также благодаря их низкому гидравлическому сопротивлению и высокой проницаемости могут размещаться непосредственно в высокотемпературной зоне (420-450 °C) газового тракта без создания отдельного реактора. Наиболее подходящей структурой для такого процесса является структурированный картридж без гофрированных структурирующих элементов с высотой каналов 5 мм (рисунок 1).

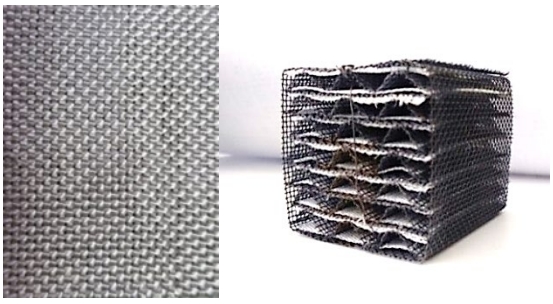
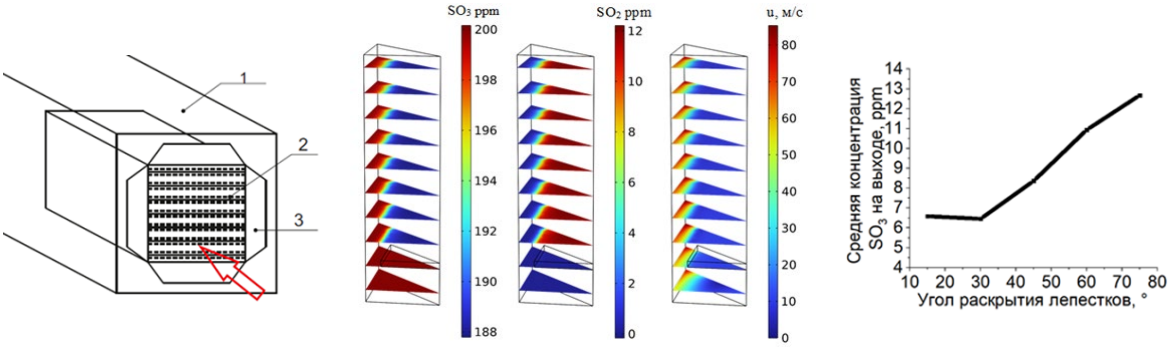


Рисунок 1. Внешний вид Pt/СВК и структурированного картриджа

При этом поперечное сечение газохода перекрывается каталитическим картриджем частично (рисунок 2а), поскольку расположение каталитического слоя по всему сечению может приводить к проблемам с гидравлическим сопротивлением и образованию избыточного количества SO_3, который способствует коррозии оборудования и газоходов. Для управления

концентрацией триоксида серы каталитический картридж на входе оснащается специальным лепестковым устройством, которое путём изменения гидравлического сопротивления увеличивает/снижает поступление диоксида серы вместе с потоком [2], проходящим через каталитический блок, вследствие чего изменяется количество получаемого триоксида серы.



(а) (б) (в)

Рисунок 2. а) Схема каталитического картриджа с регулирующим устройством в газоходе: 1 – газоход; 2 – каталитический картридж; 3 – лепестковое регулирующее устройство; стрелка – направление газового потока; б) поля концентраций и скоростей потока в газоходе по данным CFD моделирования; в) зависимость концентрации SO_3 в газовом потоке от угла раскрытия лепестков регулирующего устройства

Данный процесс исследовался методом гидродинамического (CFD) моделирования (рис. 2б), с помощью которого была подтверждена возможность регулирования количества SO_3 (рис. 2в), что позволяет достигать эффективного кондиционирования дымовых газов в условиях изменчивости их состава.

Также для обеспечения однородного распределения кондиционирующего агента по всему объему газа рассматривается расположение каталитических картриджей «зебрами», где свободное пространство чередуется с блоками небольшой площади сечения, что позволяет избежать градиентов концентраций в пристеночном пространстве газового тракта.

Список литературы

[1] Golyashova K., Mikenin P., Elyshev A., Bobylev A., Matigorov A., Paukshtis E., Lopatin S., Zagoruiko A. Structured Catalytic Cartridges for SO_2 Oxidation in Flue Gases of Coal-Fired Powerplants. Chemical Engineering Journal, 2019, V.378, 122194.

[2] Голяшова К.Е., Загоруйко А.Н., Лопатин С.А. Способ химического кондиционирования дымовых газов. Патент РФ №2825406, 2023.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 22-73-10015) и в рамках государственного задания ИК СО РАН (FWUR-2024-0037).

УД-II-10

ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПИРОЛИЗА ЭТАНА С УЧЕТОМ ОТЛОЖЕНИЯ КОКСА

Верниковская Н.В.[1,2], **Чумаченко В.А.**[1], **Носков А.С.**[1]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия, vernik@catalysis.ru

Этилен - один из ключевых углеводородов химической промышленности, его получают путем термического пиролиза этана в трубчатых печах. Побочные реакции приводят к образованию углеродистых отложений (кокса), в результате чего ухудшается теплопередача через стенку змеевика и растет перепад давления. При периодическом выжиге кокса прерывается рабочий цикл и снижается производство этилена. Цифровая модель трубы пиролиза необходима для оптимизации условий работы печи, при этом модель должна включать как стационарные уравнения относительно газовых компонентов, так и динамику образования кокса.

Работа посвящена исследованию трубчатой печи пиролиза этана по модели, описывающей стационарные процессы переноса тепла, вещества и импульса энергии внутри змеевика, с добавлением нестационарного уравнения для учета динамики накопления кокса на стенках змеевика. Впервые была предложена двумерная (2D) модель, позволяющая рассчитывать градиенты температур и концентраций в аксиальном направлении и по радиусу трубы, что значительно повышает надежность прогноза критических условий процесса.

Стационарная 2D модель каталитических процессов в трубчатых реакторах [1] была модифицирована для описания гомогенного процесса пиролиза. Введено изменение коэффициентов теплопроводности и диффузии по радиусу трубы; для расчета перепада давления учтено различие коэффициентов трения и конвективного теплообмена со стенкой на прямых и закругленных участках трубы; для расчета теплопередачи через стенку учтены теплопроводности коксового отложения и материала трубы, а также конвективный теплообмен и теплообмен излучением. Кинетическая модель включает 7 уравнений основных и побочных реакций относительно концентраций наблюдаемых веществ [2,3], а также нестационарное уравнение реакции образования кокса [2]:

$$\frac{dc}{dt} = r_c, \quad r_c = k_c \left(\frac{x C_{C4H6}}{1 + \delta + x} \right) M_{C4H6},$$

где c – содержание кокса, k_c – константа скорости реакции, x – степень превращения этана, δ – доля паров воды, C_{C4H6} – концентрация бутадиена (прекурсора кокса).

Отложение кокса на стенке приводит к уменьшению свободного сечения трубы и росту гидравлического сопротивления. Уравнение изменения давления

в каждый момент времени решается при фиксированном давлении на выходе из трубы, в результате определяется необходимое давление на входе. Затем при новом сечении трубы и давлении на входе рассчитываются профили температур и концентраций внутри трубы по 2D модели, и т.д. Так как скорость отложения кокса много меньше скоростей химических реакций, процессы внутри трубы можно считать квазистационарными.

Расчеты состава компонентов пиролизного газа по стационарной модели без учета образования кокса хорошо согласуются с экспериментальными данными, приведенными в [4, 5].

Расчеты процесса с учетом отложения кокса на стенках трубы показали следующее. Сужение проходного сечения происходит со сдвигом от выхода из трубы ко входу (рис. 1а); через 55 дней выходной диаметр уменьшается на 20 % (линия 4). Из-за ухудшения теплопередачи через стенку и снижения конверсии снижается температура на выходе, для поддержания постоянного давления на выходе нужно поднять входное давление от 2.86 до 3.25 атм (Рис. 1б).

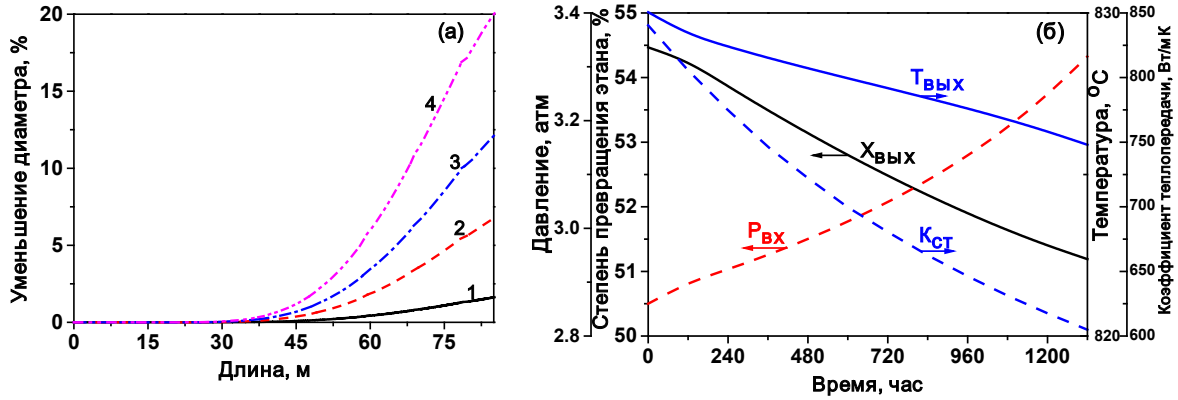


Рисунок 1. Уменьшение диаметра трубы по длине в течение *1*-5, *2*-20, *3*-35, *4*-55 суток (а); изменение показателей процесса во времени (б). Условия соответствуют работе [3]

Анализ процесса пиролиза этана по цифровой модели с учетом динамики накопления кокса позволяет оценить возможность повышения эффективности действующих трубчатых печей пиролиза и предложить к рассмотрению наиболее рациональные варианты их эксплуатации в промышленных условиях.

Список литературы

[1] Кагырманова А.П. и др., ТОХТ 2006 40 (2) 171.
[2] Sundaram K.M., Froment G.F., Chem. Eng. Sci 1977 32 601.
[3] Sundaram K.M., Van Damme P.S., Froment G.F., AIChE J. 1981 27 6 946.
[4] Андреева М.М., Прикладные аспекты химической термодинамики. 2010 136.
[5] Sundaram K.M., Froment G.F., Chem. Eng. Sci 1980 35 364-371.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0037).

УД-II-11

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРООЧИСТКИ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Абдулла О.Б.[1], **Загоруйко А.Н.**[1,2], **Зажигалов С.В.**[1,2], **Елышев А.В.**[1]

[1]Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
[2]Институт катализа им. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
E-mail: osabdulla@mail.ru

Процесс окислительной регенерации сопровождается большим тепловым эффектом – реакции окисления кокса и компонентов катализатора являются экзотермическими [1]. Неконтролируемый рост температуры может привести к порче катализатора, а также привести к поломке оборудования в системе.

Метод математического моделирования позволяет безопасно подобрать оптимальные условия для процесса регенерации. Ему отводится роль средства анализа, осмысления и адекватного переноса получаемой исследовательской информации между масштабными уровнями разрабатываемых систем [2].

На основе анализа кинетики горения нескольких форм кокса и серы [3] была разработана математическая модель катализатора гидроочистки. Модель представляет собой реальный прототип гранулы с соответствующими характеристиками (рис. 1).

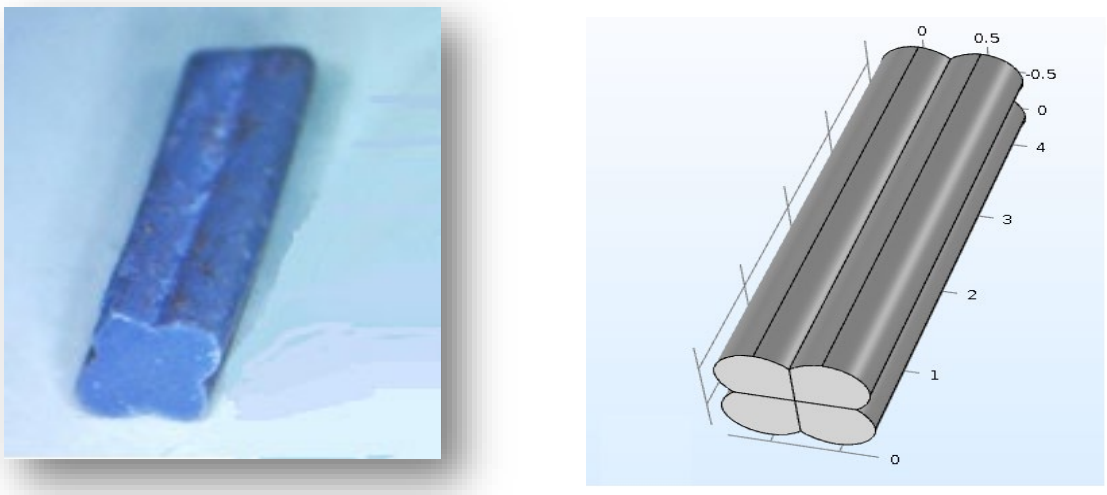


Рисунок 1. Реальная гранула катализатора (слева) и геометрия математической модели, построенная в программе COMSOL (справа)

Модель учитывает эффекты массопереноса и теплопереноса, а также тепловые эффекты химических реакций. Скорость реакции окисления кокса и

компонентов катализатора описывается уравнением Аррениуса [4]. Кинетические параметры рассчитаны авторским программным обеспечением.

В ходе моделирования было оценено влияние начальной температуры процесса, концентраций кокса и сульфидов, диффузии кислорода в поры катализатора на эффективность регенерации и максимальное значение температуры.

Показано существенное влияние внутридиффузионных торможений на протекание процесса. Моделирование показало послойное горение кокса внутри гранул, наблюдаемое в экспериментах (рис. 2).

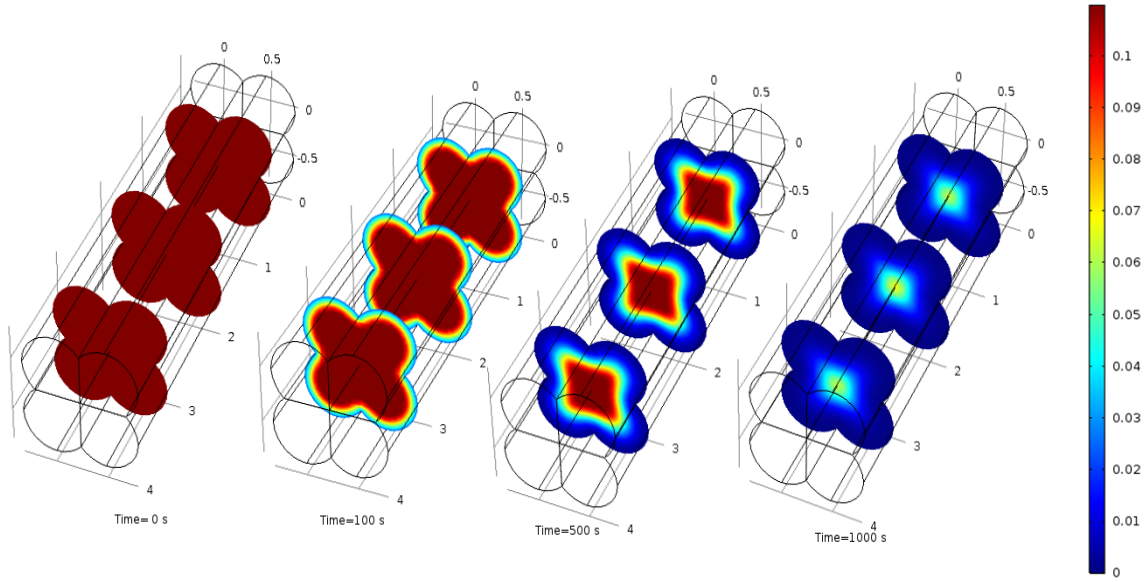


Рисунок 2. Распределение кокса в разрезе в разные моменты времени

Список литературы

[1] M. Marafi, A. Stanislaus, E. Furimsky, Hanbook of spent hydroprocessing catalysts, first ed., Elsevier, UK, 2010.

[2] Загоруйко А. Н. / Основы математического моделирования каталитических реакторов. Учебное пособие // Новосибирск: издательство Новосибирского государственного университета, 2015. – 64 с.

[3] Abdulla O.B., Zagoruiko A.N., Zazhigalov S.V., Elyshev A.V. / Kinetic model for oxidative regeneration of spent hydroprocessing catalysts based on multiply forms of surface coke and sulfur. Chemical Engineering Science. – 2025. – Vol. 310. – P. 121534. https://doi.org/10.1016/j.ces.2025.121534

[4] Панченков Г.М., Лебедев В.П. / Химическая кинетика и катализ // М.: Химия, 1985. – 592 с.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (№ 22-73-10015-П).

УД-II-12

ПОЛУЧЕНИЕ ВОДОРОДА В КАТАЛИТИЧЕСКОМ МЕМБРАННОМ РЕАКТОРЕ

Беспалко Ю.Н., Еремеев Н.Ф., Садыков В.А.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
Bespalko@catalysis.ru

Поиск и исследование свойств материалов с высокой кислородной подвижностью связан с возможностью их использования в различных электрохимических устройствах (топливных элементах, электролизерах и др.). Кроме того, протонпроводящие мембраны на их основе могут использоваться для создания компактных каталитических мембранных реакторов, в которых в одном пространстве расположены высокоактивный катализатор и мембрана с селективной проницаемостью, что является эффективным, недорогим и экологически чистым способом получения чистого водорода из биотоплив. Для создания таких устройств важно получение газоплотной керамики, поэтому помимо традиционного спекания в печи, привлекательным является использование радиационно-термического спекания, позволяющее существенно снизить температуру и сократить время обработки. Это обусловлено особенностями взаимодействия электронных пучков и твердых материалов, таких как диссипация энергии и эффект радиационно-стимулированной диффузии. Для создания нанесенных газоплотных ассиметричных мембран для выделения водорода наиболее перспективными материалами считаются нанокомпозиты, состоящие из оксидов со смешанной электрон-ионной проводимостью. Металлокерамические композиты с высокой смешанной протонно-электронной проводимостью обладают большим потенциалом для использования в каталитических мембранных реакторах, поскольку они отвечают требованиям высокой термической и механической прочности наряду с химической стабильностью в рабочих средах. Металлическая фаза повышает электронную проводимость и реакционную способность в поверхностных процессах водородообмена, в то время как керамическая фаза, в дополнение к ионной проводимости, способствует повышению механической прочности композита. В данной работе представлены результаты синтеза и исследования сложных оксидов (ортониобаты и скандаты лантаноидов) и нанокомпозитов на их основе со сплавов никеля и меди для использования их в качестве

протонпроводящих слоев мембран. Они являются перспективными материалами для мембран для выделения водорода благодаря их высокой протонной проводимости. Нанокомпозиты были получены путем обработки в планетарной шаровой мельнице смеси смешанных оксидов ($La_{0,96}Sr_{0,04}ScO_3$, $LaNb_{0,8}Mo_{0,2}O_4$, $La_{0.99}Ca_{0.01}NbO_4$), прокаленных при температуре 700 °C, и сплава NiCu с добавлением изопропанола. Порошки композитов были спрессованы в таблетки и спечены с использованием обычного спекания в печи на воздухе в течении 10 ч, а также с использованием радиационно-термического спекания при температуре 1100 °C в течении 30 минут. Исследовано влияние структуры нанокомпозитов и условий спекания на транспортные свойства полученных материалов. По данным рентгеноструктурного анализа, в нанокомпозитах наблюдались основные фазы шеелита $LaNb_{0,8}Mo_{0,2}O_4$ и перовскита $La_{0,96}Sr_{0,04}ScO_3$. Химического взаимодействия между наночастицами сплава и смеси оксидов не наблюдалось. Исследования подвижности кислорода с помощью температурно-программируемого гетерообмена с $C^{18}O_2$ выявили два типа каналов массовой миграции кислорода, связанных с двумя фазами в образцах. Исследуемые композитные материалы были нанесены на металлические подложки с градиентной пористостью на основе Ni-Al пеносплава из суспензии с последующей прокалкой при 1100 °C. Блочный носитель сотовой структуры был изготовлен на основе фольги из фехраля с защитным слоем α-Al_2O_3, на который был нанесен методом пропитки активный компонент (Ni+ $Ru/Pr_{0,3}Sm_xCe_{0,35}Zr_{0,35}O_{2-x}$) [1,2]. Полученная конструкция мембранного каталитического реактора была протестирована с варьированием параметров: концентрации и скорость подачи исходных реагентов, температурные режимы.

Список литературы

[1] Bobrova L., Eremeev N., Vernikovskaya N., Sadykov V., Smorygo O. Effect of Asymmetric Membrane Structure on Hydrogen Transport Resistance and Performance of a Catalytic Membrane Reactor for Ethanol Steam Reforming. Membranes. 2021. V.11. N5. 332:1-29.

[2] Eremeev N., Krasnov A., Bespalko Y., Bobrova L., Smorygo O., Sadykov V. An Experimental Performance Study of a Catalytic Membrane Reactor for Ethanol Steam Reforming over a Metal Honeycomb Catalyst. Membranes. 2021. V.11. N10. 790:1-21.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, проект 23-73-00045.

УД-II-13

ПАРОВОЙ РИФОРМИНГ МЕТАНА, МЕТАНОЛА В МЕМБРАННОМ РЕАКТОРЕ СО СВЕРХПРОНИЦАЕМЫМИ ПАЛЛАДИЕВЫМИ МЕМБРАНАМИ: КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ НА ПОВЕРХНОСТИ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР

Петриев И.С.[1,2], **Пушанкина П.Д.**[1], **Хачатрян А.Ш.**[1], **Иванин С.Н.**[1], **Папежук М.В.**[1], **Симонов А.И.**[1]

[1]Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия
[2]Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону, Россия
petriev_iliya@mail.ru

На сегодняшний день водород является не только экологически чистым источником энергии будущего, но и находит широкое применение в качестве сырья во многих областях промышленности. Распространенным и наиболее эффективным методом получения водорода является паровой риформинг углеводородов [1]. Перспективным в таком ключе является использование мембранных реакторов на основе Pd-мембран. Важной задачей является повышение производительности такого реактора и снижение рабочих температур. Перспективным решением является снижение толщины мембраны и модификация поверхности наноструктурированным покрытием [2]. Поэтому целью работы была разработка и исследование высокопроизводительного композитного наноструктурированного мембранного материала для выделения водорода в процессах парового риформинга углеводородов.

В качестве основы мембраны использовали пористые пленки сплава Hastelloy X, на которые наносили гидроксиаппатит (ГА). ГА использовался для уменьшения распределения пор по размерам и в качестве интердиффузионного слоя. На поверхность подготовленной основы-носителя методом магнетронного распыления наносилась ультратонкая селективная пленка сплава Pd-Cu. Далее полученный композитный материал модифицировали наноструктурированным покрытием на основе наночастиц, по форме напоминающих нити с поперечным сечением порядка 5-10 нм (рисунок 1).

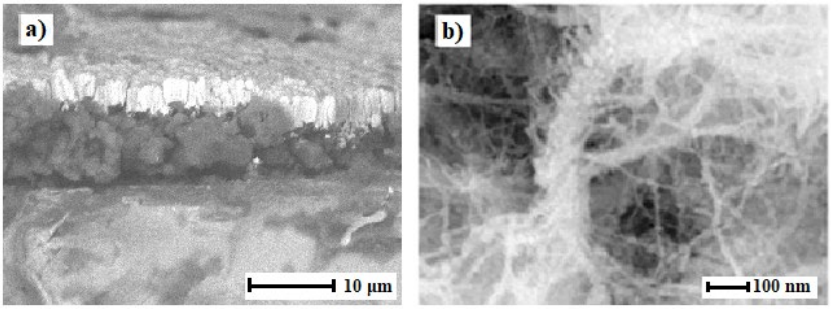


Рисунок 1. Микрофотографии среза и модифицированной поверхности композитной Pd-Cu мембраны

Полученные композитные мембранные материалы были исследованы в мембранном реакторе парового риформинга метанола. Измерения проводили для композитных мембран без покрытия, с модифицирующим покрытием и в отсутствии дополнительного катализатора (рисунок 2). Значительный выход водорода наблюдался для мембран с модифицированной поверхностью – до 2 раз больше, чем для мембран без покрытия. В то же время меньший, но достаточно хороший выход водорода наблюдался для модифицированный мембран без дополнительного катализатора, что может свидетельствовать о высокой активности наноструктурированного каталитического слоя.

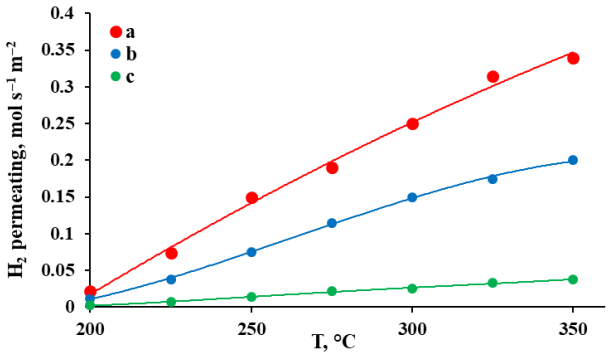


Рисунок 2. Зависимость выхода водорода от температуры в мембранном реакторе с катализатором CuO-ZnO-Al_2O_3 модифицированной мембраной (a), без модификатора (b) и модифицированной мембраной без катализатора (c)

Использование разрабатываемых наноструктурированных мембранных материалов позволит значительно интенсифицировать транспорт водорода и снизить рабочие температуры реактора, что положительно скажется на снижении энергетических затрат в процессе получения высокочистого водорода. Разработанные мембранные материалы смогут стать основой как для устройств низкотемпературной диффузионной очистки водорода, так и для мембранных модулей реакторов парового риформинга углеводородов.

Список литературы

[1] Boshagh F., Yoon H.-J., Lee C.-J. / Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2025. V. 218. P. 115777.

[2] Petriev I.S., Pushankina P.D., Andreev G.A., Yaroslavtsev A.B. // Int. J. Hydrogen Energy. 2024. V. 70. P. 404–413.

Благодарность

Исследование выполнено при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках научного проекта № 24-19-20070. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-20070.

УД-II-14

МАСШТАБИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ СИНТЕТИЧЕСКОГО ЦЕРЕЗИНА ИЗ ПРИРОДНОГО ГАЗА

Чемес А.А., Нарочный Г.Б., Савостьянов А.П., Яковенко Р.Е.

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова, Новочеркасск, Ростовской обл., Россия
nastaukuc1@mail.ru

Интерес к синтезу Фишера–Тропша (СФТ) связан со способностью преобразовывать синтез-газ, полученный из ненефтяного сырья (природный газ, уголь, биомасса и др.), в широкий спектр углеводородов. Особое значение имеет возможность получения продуктов, которые невозможно синтезировать в достаточных объемах из нефти, — длинноцепочечных линейных углеводородов C_{19}–C_{100} (синтетические воски). Эти воски являются ценным сырьем для пищевой, фармацевтической, парфюмерной промышленностей, а также применяются в качестве основы для создания высококачественных изопарафиновых масел [1, 2]. Ярким примером является технология компании Shell, внедренная на заводе Pearl GTL в Катаре, где путем каталитической изомеризации восков получают масла категории III+. Такие продукты отличаются исключительным индексом вязкости (до 140–150), что на 30–40 % превышает показатели традиционных минеральных масел групп I–III.

Развитие собственного производства синтетических углеводородов, включая длинноцепочечные воски, критически важно для России. В настоящее время страна импортирует до 20 тыс. тонн этой продукции ежегодно, не имея собственных промышленных мощностей.

В ЮРГПУ(НПИ) разработан кобальалюмосиликагелевый катализатор синтеза углеводородов из CO и H_2 с повышенной селективностью по длинноцепочечным углеводородам.

Цель настоящей работы – масштабирование технологии получения синтетического церезина из природного газа.

Для масштабирования технологии в ЮРГПУ(НПИ) создан пилотный комплекс с 6-метровым реактором Фишера–Тропша, включающий блоки: **очистки природного газа** (цеолит NaX и ZnO-катализатор) с остаточным содержанием серы ≤0,05 мг/м³; **пароуглекислотной конверсии метана** (катализатор К-905-D1, 870 °C, 2,0 МПа) с получением синтез-газа (H_2/CO=2,2; 47,1% H_2, 21,2% CO);

синтеза Фишера–Тропша на кобальталюмосиликагелевом катализаторе (0,6 дм³, 2,0–3,0 мм, 557 ч, 2,0 МПа, ОСГ 300 $ч^{-1}$).

Результаты испытаний кобальталюмосиликагелевого катализатора в лабораторном и пилотном реакторе представлены в таблице 1.

Таблица 1. Показатели синтеза углеводородов в лабораторном и пилотном трубчатых реакторах

Тип реакто-ра	$V_{кат}$, $см^3$	τ, ч	$h_к$, мм	t, °C	X_{CO}, %	Селективность, %				G_{C5+}, кг/($м^3$кат.·ч)
						CH_4	C_2-C_4	C_{5+}	CO_2	
лабора-торный	25	54	135	205	80,8	14,3	6,5	77,7	1,5	40,6
пилот-ный	600	424	4718	204,5-212,6	82,9	14,4	15,3	69,6	0,7	36,6

При масштабировании с лабораторного на пилотный реактор конверсия CO имеет достаточно близкие значения (80,8 % → 82,9 %). Однако селективность по целевым C_5+ упала на 8,1 %, а доля C_2–C_4 выросла в 2,3 раза, вероятно, из-за неравномерного теплопереноса в крупном реакторе. Производительность C_5+ снизилась на 9,8 %, но содержание CO_2 уменьшилось вдвое. Полученные результаты подтверждают принципиальную возможность масштабирования технологии и открывают путь к её коммерциализации.

В докладе будет представлен детальный анализ результатов исследования, включающий данные о составе продуктов синтеза с акцентом на распределение углеводородов по фракциям. Рассматривается динамика ключевых параметров процесса, таких как конверсия CO, селективность по целевым продуктам и производительность, в зависимости от времени работы реакторов. Особое внимание уделено температурным профилям, их влиянию на стабильность катализатора и эффективность синтеза.

Список литературы

[1] Karaba, A. Fischer-Tropsch Wax from Renewable Resources as an Excellent Feedstock for the Steam-Cracking Process / A. Karaba, J. Rozhon, J. Patera, J. Hájek, P. Zámostný // Chemical Engineering &Technology. – 2021. – V. 44. – No 2. – P. 329338.

[2] Sahir A.H., Zhang Y., Tan E.C.D., Tao L. Understanding the role of Fischer-Tropsch reaction kinetics in techno-economic analysis for co-conversion of natural gas and biomass to liquid transportation fuels // Biofuels, Bioproducts and Biorefining. 2019. V. 13. No 5. P. 1306-1320.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, государственное задание FENN-2024-0002.

УД-II-15

ЛАЗЕРНАЯ НЕОКИСЛИТЕЛЬНАЯ КОНВЕРСИЯ МЕТАНА В ВОДОРОД И УГЛЕВОДОРОДЫ

Снытников В.Н.[1], **Пескова Е.Е.**[2]

[1]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2]*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет, Саранск, Республика Мордовия, Российская Федерация*
snyt@catalysis.ru

Создание малотоннажной квалифицированной переработки природного газа в этилен и другие углеводороды остается актуальной научно-технической задачей. Один из возможных подходов к ее решению – разработка лазерного каталитического реактора неокислительной конверсии метана. Известный механизм неокислительной димеризации метана в первом приближении может быть представлен пятью этапами химических реакций $CH_4 \rightarrow C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 \rightarrow C_2H_2 \rightarrow C_6H_6 \rightarrow C$. Здесь C_6H_6 - суммарно бензол и другие ароматические соединения (толуол, ксилолы). На первом этапе необходимо вложить энергию примерно 65 кДж на моль этана. Температура газофазной активации метана 1450 К. Для второго этапа нужна энергия 137 кДж на моль этилена, а температура промышленного процесса пиролиза этана порядка 1100 К. Однако в углеводородной среде при температурах около 1450 К происходят фактически неуправляемые процессы с появлением пиролитического углерода, водорода, ацетилена, бензола. Использование катализатора с временами контакта более 0.1 сек снижает температуру эндотермического процесса димеризации метана. Но ранее испытанные катализаторы ускоряют реакции и других этапов, кроме того, они быстро зауглероживаются с падением активности. Время контакта более 0.1 сек определяется необходимостью вложить требуемую энергию в среду для высоких конверсий метана. Наша основная идея каталитического процесса неокислительного связывания метана с лазерным излучением (LNOCM) состоит в том, чтобы пространственно разделить димеризацию метана и пиролиз этана в реакторе при температурах пиролиза этана. При этом скорость димеризации метана повышается использованием катализатора, но времена контакта сокращаются на порядок до десятка миллисекунд. Требуемая тепловая энергия вводится от стенок и лазерным излучением с высоким потоком мощности локально в зону димеризации метана. Бо**о**льшая энергия для дальнейшего пиролиза полученной углеводородной смеси этана, водорода, метана вводится от стенок теплообменом.

УД-II-15

Для изучения комплекса физико-химических процессов лазерной термохимии в реакторе нами создан численный код [1]. Кинетика радикальных цепных реакций связывания метана с учетом гетерогенного механизма димеризации метана представлена в [2]. Тестирование и примеры использования этого кода для решения задач лазерной термохимии приведены в [3].

В докладе представлены результаты численных расчетов процессов в основной реакционной зоне. В качестве примера приведем вариант с круглой трубой длиной 0,6 м диаметром 40 мм. В ней задан расход метана 6000 нл/час, давление на входе 4 атм. Температура стенок трубы и температура метана на входе в трубу 1223 К. Лазерное излучение мощностью 1600 Вт подается с торца по ходу метана. Оно поглощается в каталитическом слое длиной 12 см, сдвинутом относительно входа на 15 см. Средняя скорость реакционной среды на оси трубы в зоне слоя составила около 6 м/сек. Температура катализатора под воздействием излучения не превысила 1235 К. Конверсия метана в этан и водород происходит в зоне с катализатором. Время пребывания в нем 0,02 сек. На выходе из трубы конверсия метана составила 39 мас %, содержание этилена 16 мас %, этана - 16 мас %, H_2 - мас 3,7 %. Тепловой поток от стенок составил 1,48 кВт. Вместе с лазерным излучением общая вложенная мощность 3,08 кВт. С учетом превращения метана в 0,417 г/сек получен расход вложенной энергии 7,4 МДж/кг. Если принять до 70 % кпд волоконнооптических лазеров электрической энергии от сети и кпд получения тепловой энергии 90 %, затраты энергии на получение C_{2+} углеводородов составляют 9,4 МДж/кг. Полученные данные показывают перспективность развития LNOCM.

Список литературы

[1] Пескова Е.Е., Снытников В.Н. Программный комплекс LasChemFVM-2D для моделирования нестационарных дозвуковых потоков двухфазной реакционной среды. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2024667038 от 19.07.2024. 2024.

[2] Lashina E.A., Peskova E.E., Snytnikov V.N. Mathematical modeling of the homogeneous-heterogeneous non-oxidative CH_4 conversion: the role of gas-phase H or CH_3 // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2023. Vol. 136. pp. 1775-1789.

[3] Пескова Е.Е. Математическое моделирование процессов лазерной термохимии. Автореферат диссертации на соискание ученой степени д.ф.-м.н., Саранск, 2024.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0033.

УД-II-16

ЛЕВИТИРУЮЩИЕ КАПЛИ-МИКРОРЕАКТОРЫ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ 2D-АЭРОЗОЛЯ

Федорец А.А.[1], **Домбровский Л.А.**[1,2], **Носоновский М.И.**[3], **Скорб Е.В.**[3]

[1]ФГАОУ ВО «Тюменский государственный университет», Тюмень, Россия
[2]ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
[3]Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
fedorets@utmn.ru

Технология 2D-аэрозоля позволяет генерировать практически плоский кластер из упорядоченных сферических капель радиусом от 1 до 100 мкм, устойчиво левитирующих в паровоздушном потоке, поднимающемся над локально нагретой поверхностью слоя воды (рис. 1). Капли могут состоять как из чистой воды, так и из водных растворов различных веществ.

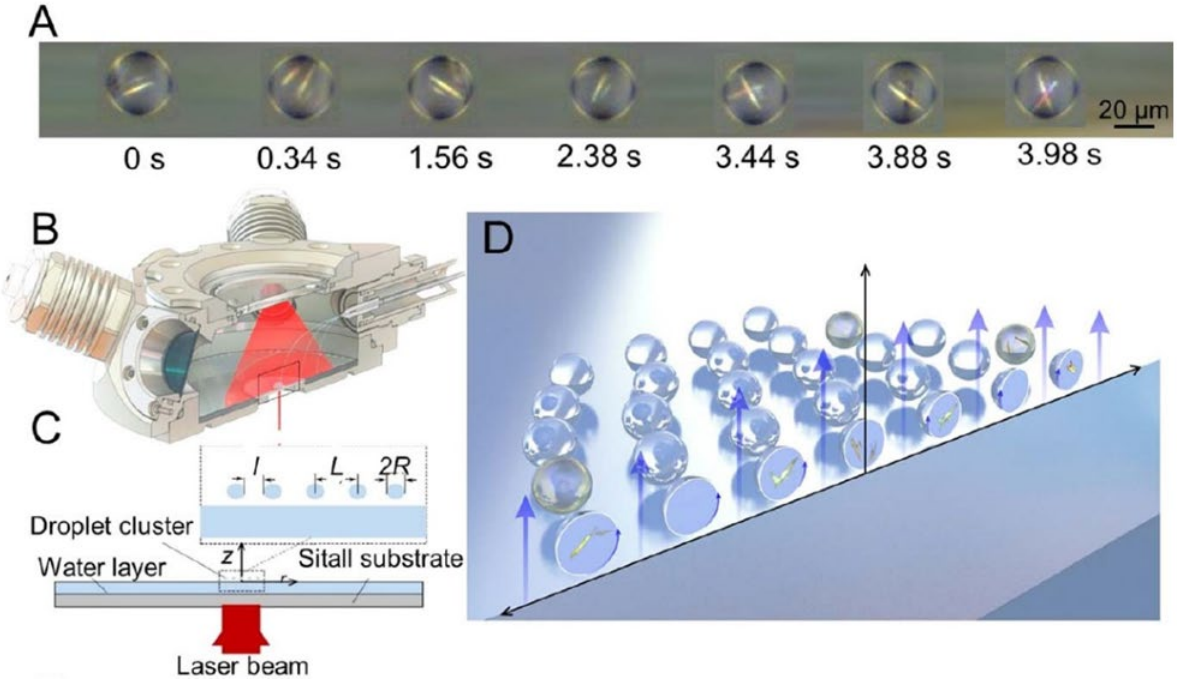


Рис. 1. (A) кристаллы цианурата меламина, выращенные в капле кластера [1];
(B) лабораторное устройство, в котором генерируется капельный кластер;
(C) схема кластера над слоем воды,
(D) схематическое изображение левитирующего капельного кластера

В основе новой технологии лежит физическое явление открытое немногим более 20 лет тому назад [2]. В ходе дальнейших исследований был разработан метод «печати» капельных кластеров из растворов с заданной концентрацией химических примесей, нано- микрочастиц и даже с жизнеспособными микроорганизмами; методы длительной (в течение нескольких часов) стабилизации кластера [3], а также технологии оптической регистрации физико-

химических процессов в отдельных каплях с использованием рамановской, гиперспектральной и флуоресцентной микроскопии [4].

В результате стали возможны лабораторные исследования процессов в равновесно левитирующих каплях-микрореакторах. В [1] на примере меламина и циануровой кислоты продемонстрирована возможность инициирования сложных химических реакций за счет управляемого слияния пар микрокапель, содержащих различные реагенты (в том числе, с образованием кристаллов, рис. 1). В докладе особое внимание уделяется контролю управляемого слияния капель [5] и наблюдению химических реакций.

Список литературы

[1] Fedorets A.A., Koltsov S., Muravev A.A., Fotin A., Zun P., Orekhov N., Nosonovsky M., Skorb E.V. Observation of a chemical reaction in a levitating microdroplet cluster and droplet-generated music // Chemical Science, 2024, V. 15, No.30, P. 12067–12076 (DOI: 10.1039/D3CP00542A).

[2] Федорец А.А. Капельный кластер // Письма в ЖЭТФ, 2004, V. 79, No.8, P. 457–459 (DOI: 10.1134/1.1772434).

[3] Fedorets A.A., Dombrovsky L.A., Bormashenko E., Nosonovsky M. (2023). Levitating Droplet Clusters. New York: Begell House.185 pp. (DOI: 10.1615/978-1-56700-532-5.0).

[4] Fedorets A.A., Kolmakov E.E., Medvedev D.N., Nosonovsky M., Dombrovsky L.A. Fluorescence profiles of water droplets in stable levitating droplet clusters // Physical Chemistry Chemical Physics, 2023, V. 25, P. 15000–15007 (DOI: 10.1039/D3CP00542A).

[5] Fedorets A.A., Dombrovsky L.A., Skorb E.V., Nosonovsky M.I. Induced merger of droplets containing various solutions in a levitating microdroplet cluster // Journal of Molecular Liquids, 2025, V. 428, article number 127520 (DOI: 10.1016/j.molliq.2025.127520).

Благодарность

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания FEWZ-2023-0002.

УД-II-17

ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ МНОГОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В РЕАКТОРАХ С ПСЕВДООЖИЖЕННЫМ СЛОЕМ

Мосеенков С.И., **Заворин А.В.**, **Кузнецов В.Л.**

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,
moseenkov@catalysis.ru

Многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) в силу уникальности их свойств, становятся одними из наиболее широко используемых наноматериалов, находящих применение в качестве добавок в композиционных материалах и компонентов электрохимических устройств. Для облегчения процессов введения МУНТ в композиты или модификации их свойств в ряде случаев требуется функционализация их поверхности или нанесения на них различных наночастиц. Использование жидкофазных процессов сталкивается с необходимостью использования сильных кислот, растворов солей металлов и, как следствие, необходимостью утилизации больших объёмов жидких отходов. В силу этого предпочтительными выглядят газофазные процессы, если они позволяют добиваться тех же результатов, что и жидкофазные процессы.

Для обеспечения эффективного тепло- и массообмена в реакторе, однородности полей температуры и концентраций реагентов, сравнительно невысокого уровня потребления энергии, высокой производительности процесса целесообразно использование реакторов с псевдоожиженным слоем, которые позволяют получать продукты высокого качества, автоматизировать процесс, сделать его экономически эффективным.

В работе представлены два типа процессов:

1. Функционализация МУНТ путём газофазной обработки для создания поверхностных кислородсодержащих групп, которые необходимы для повышения гидрофильности нанотрубок и создания центров для их дальнейшей функционализации. Для этого проведено сравнительное исследование влияния окислительных обработок исходных нанотрубок концентрированной азотной кислотой или газофазной обработкой озоном на состав и содержание поверхностных кислородсодержащих групп. Для контроля за типом функциональных групп и их концентрацией на поверхности МУНТ использовали РФЭС, ИКДО спектроскопию и термопрограммируемую десорбцию с масс-спектроскопическим контролем. Функционализация поверхности МУНТ

существенно повышает стабильность их водных суспензий, что обеспечивает равномерность их распределения в объеме цементного камня, структура которого контролировалась методом растровой электронной микроскопии. Установлено увеличение предела прочности при изгибе цементного камня на 33 – 44 %, при введении в его состав окисленных МУНТ. Отмечена экологичность использования МУНТ, модифицированных с использованием обработки озоном, в силу отсутствия жидких отходов [1].

2. Синтез высокодисперсных частиц кремния на поверхности МУНТ (Si/МУНТ) для получения материалов перспективных для разработки литий-ионных аккумуляторов, который осуществляли методом газофазного химического осаждения (CVD), с использованием термического разложения моносилана (SiH_4) в псевдоожиженном слое многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) [2, 3]. С использованием ПЭМ, РЭМ, РФА, КР- и ИК- Фурье спектроскопии диффузного отражения, исследована структура получаемых наночастиц Si в композитах на основе МУНТ с различными средними диаметрами. Средний размер получаемых частиц Si варьируется от 3 до 45 нм и возрастает с увеличением диаметра МУНТ. Основное количество осажденного кремния в наночастицах находится в аморфном состоянии, с небольшими включениями нанокристаллического кремния (менее 3 нм). Проведена оценка удельной разрядной емкости полученных композитов в качестве анодного материала литий-ионных аккумуляторов.

Список литературы

[1] Мосеенков С.И., Заворин А.В., Кузнецов В.Л. Влияние добавок функционализированных многостенных углеродных нанотрубок на структуру и прочность цементного камня, Химия, физика и механика материалов. 2024. Т.43. №4. С.18-40.

[2] Zavorin A.V., Kuznetsov V.L., Moseenkov S.I., Tsendsuren T-O., Volodin V.A., Galkin P.S., Ishchenko A.V., Chemical Vapor Deposition of Silicon Nanoparticles on the Surface of Multiwalled Carbon Nanotubes, Journal of Structural Chemistry. 2020. V.61. N4. P.617–627. DOI: 10.1134/S0022476620040162.

[3] Zavorin A.V., Kuznetsov V.L., Moseenkov S.I., Selyutin A.G., Ishchenko A.V., Tsendsuren T-O. SiC Formation on the Carbon Nanotube Decorated with Silicon Nanoparticles, Diamond and Related Materials. 2023. V.137. 110113:1-13. DOI: 10.1016/j.diamond.2023.110113.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-23-20103 от 12.04.2024) и Правительства Новосибирской области (грант № р-95 от 22.03.2024).

УД-II-18

ПАССИВНОЕ ТЕРМОРЕГУЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ ХРАНЕНИЯ ВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА В ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТАХ

Васильев Л.Л., Журавлёв А.С.

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь
LVASIL@hmti.ac.by

Снижение потребления углеводородного топлива и сокращение вредных выбросов в атмосферу является актуальной задачей. Существенного оздоровления окружающей среды можно достичь переводом на электроэнергию части авиапарка. Разрабатываются концепции летательных аппаратов (л. а.) с электрической и гибридной (турбоэлектрической) силовыми установками (СУ). Полная электрификация в ближайшие годы ожидает только сверхмалые аппараты, а пассажирские или транспортные самолёты из-за отсутствия мощных электродвигателей и накопителей энергии достаточной ёмкости могут оснащаться гибридными СУ, при этом для газотурбинных двигателей гибридных л. а. целесообразно использовать экологически безопасные синтетическое топливо или водород. Технологии с использованием жидкого водорода были продемонстрированы на примере самолета Ту-155, отличающегося от серийного авиалайнера Ту-154 тем, что один из трех двигателей был модифицирован для использования жидководородного топлива и природного газа.

Система на газообразном водороде привлекательна отсутствием вредных выбросов, однако внедрению ее на практике препятствует необходимость использования баков высокого давления (обычно 350–700 бар), которые значительно тяжелее, чем топливо, помещенное в них, а их большой объем сокращает объем свободного полезного пространства в сравнении с аналогами на керосине [1]. При снижении давления уменьшается и количество топлива. В статьях [2, 3] описана технология хранения водородосодержащих газов при низких давлениях в адсорбированном состоянии с системой терморегулирования на основе контурных термосифонов с кольцевыми каналами в длинных горизонтальных испарителях (рис. 1 и 2). Термосифоны выполняют роль удобных пассивных устройств для охлаждения слоя сорбента. посредством которых выделяющееся при адсорбции топлива (газа) тепло отводится, затем рассеивается или передается на нуждающееся в нагреве оборудование.

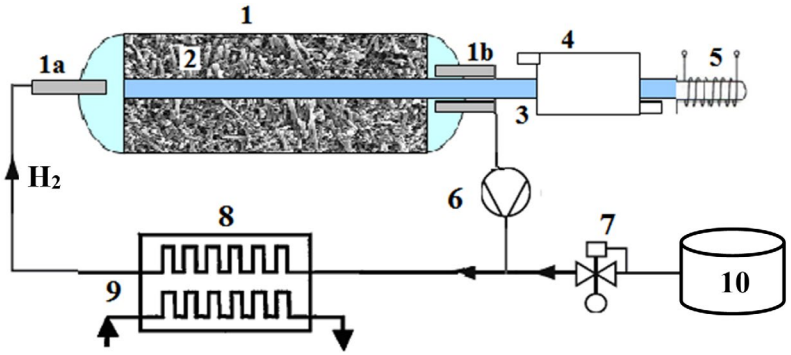


Рис. 1. Терморегулирующее устройство с горизонтальным пародинамическим термосифоном: 1) корпус, 1а и 1б – входная и выходная патрубки с клапанами; 2) сорбент; 3) термосифон; 4) жидкостный теплообменник; 5) электрический нагреватель; 6) регулятор давления; 7) внешний теплообменник/охладитель, 9) стандартный газовый баллон

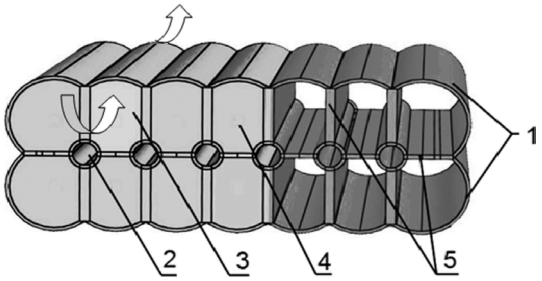


Рис. 2. Плоский модульный резервуар адсорбированного газа с термосифонным терморегулированием (светлый – с сорбентом, темный –без сорбента): 1) корпус, 2) термосифон, 3) предварительно охлажденный в циркуляционном контуре газ проходит через слой сорбента, 4) сорбент, 5) продольные металлические ребра/перегородки

Терморегулирование с использованием термосифонов и охлаждаемого контура рециркуляции газа позволяет сократить время заполнения резервуара газом, контролировать уровень и распределение температуры в слое адсорбента.

Представленная система позволяет хранить водородное топливо либо используемый в качестве авиационного топлива природный газ в связанном состоянии при относительно низких давлениях. Это дает возможность снизить массу топливных баков за счет уменьшения толщины стенок емкостей, что очень важно для авиационной техники, где проблема снижения массы конструкции является очень актуальной.

Список литературы

[1] Кулагин В.А., Грушевенко Д.А. Сможет ли водород стать топливом будущего? Теплоэнергетика. 2020. № 4. С. 3-17.

[2] Канончик Л.Е. Васильев Л.Л. Исследование зарядки сорбционного аккумулятора природного газа, терморегулируемого термосифоном и контуром циркуляции. Тепловые процессы в технике. 2019. Т. 11, № 7. С. 305-313.

[3] Vasiliev L., Kanonchik L., Kuzmich M., Kulikouski V. Development of thermosyphon controlled adsorptive natural gas storage system. Applied Thermal Engineering. Oct. 2021, Art. ATE_116184.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ III.
ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКТОРЫ И ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ЦЕЛЕВЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

УД-III-1

ПРИМЕНЕНИЕ ПЕРЕДОВЫХ ОКИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ ОЧИСТКИ ЛИВНЕВЫХ СТОКОВ АЭРОПОРТОВ ОТ ПРИМЕСЕЙ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ

Селищев Д.С.[1], Фазлиев Т.Р.[1], Селищева С.А.[1], Люлюкин М.Н.[1,2], Першин А.А.[3], Козлов Д.В.[1], Яковлев В.А.[1]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Институт органической и физической химии РАН, Казань, Россия
[3]ООО «Завод Аэролайф», Москва, Россия
selishev@catalysis.ru

Актуальной проблемой является наличие в сточных водах примесей этиленгликоля (ЭГ), который используется в большом количестве в качестве антифриза, противообледенительной жидкости (ПОЖ) и растворителя. Сам по себе этиленгликоль является умеренно токсичным соединением, но при повышенных концентрациях в ходе залповых выбросов он обеспечивает рост показателей ХПК и БПК воды, что приводит к гибели большого количества микроорганизмов в водных экосистемах. Данный факт является причиной установления строгого контроля за содержанием ЭГ в сточных водах и необходимости их дополнительной очистки при превышении установленных норм [1]. Таким образом, создание простого способа удаления примесей этиленгликоля из воды, обладающего высокой эффективностью и низкими операционными затратами, является актуальной задачей, для решения которой могут быть использованы передовые окислительные процессы, обеспечивающие его окислительную деструкцию.

В рамках создания системы очистки ливневых сточных вод аэропортов авторами было детально исследовано окисление этиленгликоля в водных растворах пероксидом водорода в условиях его фотохимической активации излучением УФ-С диапазона [2]. Показано влияние состава реакционной среды и интенсивности энергетического воздействия на эффективность процесса. Установлено, что наибольшая скорость минерализации этиленгликоля может быть достигнута в диапазоне двух-трехкратного мольного избытка пероксида водорода (Рис. 1а) относительно стехиометрического соотношения в соответствии со следующим брутто-уравнением: $C_2H_6O_2 + 5H_2O_2 = 2CO_2 + 8H_2O$.

При этом было обнаружено, что дополнительное барботирование реакционной смеси воздухом или кислородом приводит к значительному

увеличению скорости и степени минерализации этиленгликоля, особенно для соотношений ЭГ:H_2O_2 меньше стехиометрического (Рис. 1б). Анализ состава реакционной смеси в ходе эксперимента продемонстрировал значительное увеличение скорости окисления промежуточных продуктов деструкции этиленгликоля при барботировании реакционной смеси кислородом, таких как гликолевый альдегид и гликолевая кислота, а также позволил подтвердить наличие двух маршрутов для данного процесса (Рис. 1в).

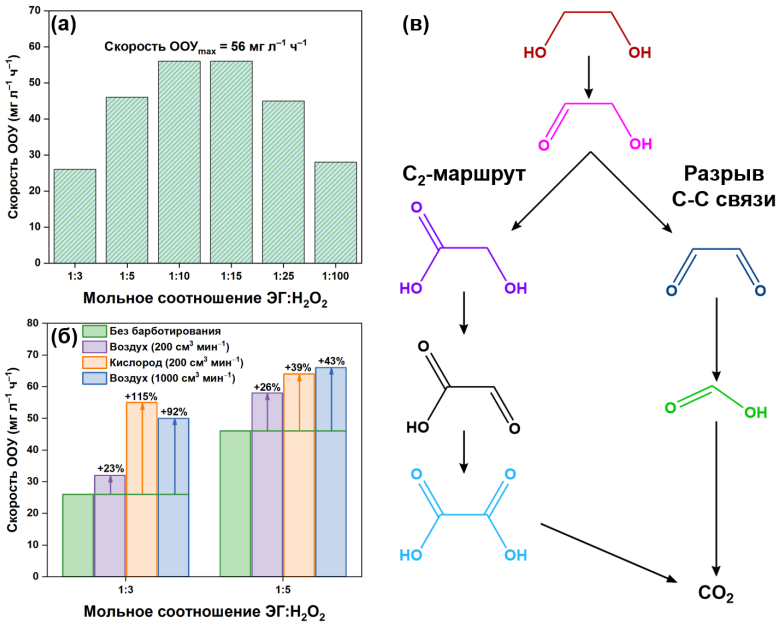


Рис. 1. (а) Зависимость скорости снижения общего органического углерода при окислении ЭГ от начального мольного соотношения ЭГ:H_2O_2, (б) влияние барботируемого газа на скорость минерализации ЭГ, (в) предполагаемый маршрут окисления ЭГ в системе H_2O_2/УФ-С

Внедрение на практике передовых методов окислительной деструкции органических загрязнителей, в частности этиленгликоля как основного компонента ливневых сточных вод аэропортов, будет способствовать снижению негативного антропогенного влияния на окружающую среду.

Список литературы

[1] Межгосударственный стандарт ГОСТ 19710-2019. Этиленгликоль. Технические условия (Ethylene glycol. Specifications), дата введения – 01.05.2020.

[2] T. Fazliev, M. Lyulyukin, D. Kozlov, D. Selishchev, Kinetic Aspects of Ethylene Glycol Degradation Using UV-C Activated Hydrogen Peroxide (H_2O_2/UV-C), Molecules 30 (2025) 49.

Благодарность

Работа выполнена в рамках гранта Министерства науки и высшего образования РФ на проведение крупных научных проектов по приоритетным направлениям научно-технологического развития (проект № 075-15-2024-646).

УД-III-2

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛЫХ СФЕР ИЗ Al_2O_3 В КАЧЕСТВЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ КАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ OPERANDO ИССЛЕДОВАНИЙ ГЕТЕРОГЕННОГО ГИДРИРОВАНИЯ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

Кононенко Е.С.[1,2], Сковпин И.В.[1], Буруева Д.Б.[1], Рогожников В.Н.[3], Шефер К.И.[3], Саланов А.Н.[3], Коптюг И.В.[1]

[1]Международный томографический центр СО РАН,
ул. Институтская 3А, 630090, Новосибирск, Россия
[2]Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова 2, 630090, Новосибирск, Россия
[3]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
пр-т Академика Лаврентьева 5, 630090, Новосибирск, Россия
E-mail: elizaveta.kononenko@tomo.nsc.ru

Методы магнитного резонанса (МР), такие как ядерный магнитный резонанс (ЯМР) и магнитно-резонансная томография (МРТ), являются мощными инструментами для in situ и operando исследований каталитических процессов. Однако их применение ограничено, в частности, низкой чувствительностью и искажением однородности магнитного поля при использовании зернистого слоя катализатора. Повысить чувствительность можно с помощью гиперполяризации спинов, например, за счет индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ) [1]. При этом неоднородность магнитного поля особенно критична для антифазных сигналов, характерных для экспериментов ИППЯ (PASADENA), поскольку уширение спектра приводит к взаимной компенсации сигнала и дополнительному снижению чувствительности [2–3].

Одним из путей решения этих проблем является разработка ЯМР-совместимых систем, минимально влияющих на однородность магнитного поля [4–5]. В работе использовались полые сферы из оксида алюминия (η-Al_2O_3) в качестве носителей катализатора, совместимых с МР исследованиями. Благодаря низкому содержанию твёрдой фазы и сферической форме, такие носители практически не нарушают однородность магнитного поля в отличие от гранулированного носителя [6]. Это позволило проводить operando ЯМР и МРТ исследования работающего реактора с высоким спектральным и пространственным разрешением. Более того, чувствительности метода оказалось достаточно, чтобы в газовой фазе послойно проследить рост

конверсии пропилена в пропан методом пространственно-разрешенной спектроскопии ЯМР даже без применения гиперполяризации (Рис. 1 B).

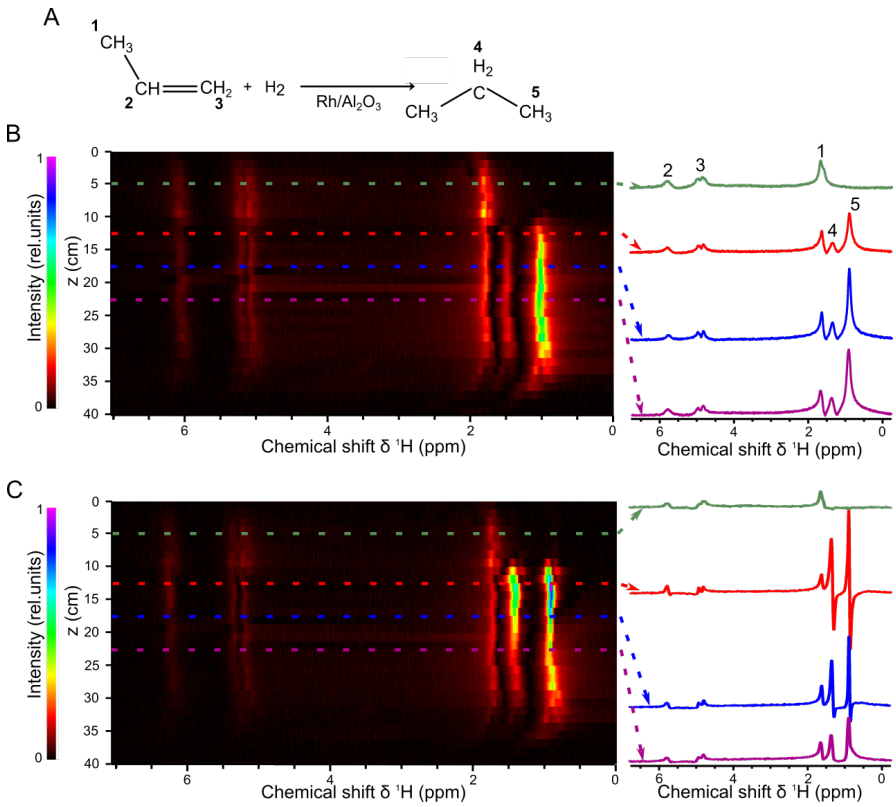


Рис. 1. Схема реакции гетерогенного каталитического гидрирования пропилена (A). Псевдодвумерные пространственно-разрешённые спектры ЯМР ^{1}H реакции гидрирования пропилена с использованием равновесного водорода (B) и параводорода (C), полученные в режиме operando

Выполненные исследования открывают новые возможности для operando исследований гетерогенных каталитических реакторов, которые ранее были значительно затруднены из-за недостаточной чувствительности и низкого спектрального разрешения, вызванных неоднородностью магнитного поля.

Список литературы

[1] J Eills, D. Budker, S. Cavagnero, Ed. Y. Chekmenev, S.J. Elliott, S. Jannin, A. Lesage, J. Matysik, T. Meersmann, T. Prisner, J.A. Reim er, H.Yang, I.V. Koptyug. **2023**, 123 (4), 1417-1551.

[2] L. Buljubasich, I. Prina, M.B. Franzoni, K. Münnemann, H.W. Spiess, R.H. Acosta. J. Magn. Reson. **2013**, 230, 155-159.

[3] E.S. Kononenko, A.I. Svyatova, I.V. Skovpin, L.M. Kovtunova, E.Yu. Gerasimov, I.V. Koptyug. J. Phys. Chem. C **2022**, 126 (35), 14914-14921.

[4] K.V. Kovtunov, D. Lebedev, A. Svyatova, E.V. Pokochueva, I.P. Prosvirin, E.Y. Gerasimov, V.I. Bukhtiyarov, C.R. Müller, A. Fedorov, I.V. Koptyug. ChemCatChem **2019**, 11, 969.

[5] A. Svyatova, E.S. Kononenko, K.V. Kovtunov, D. Lebedev, E.Yu. Gerasimov, A.V. Bukhtiyarov, I.P. Prosvirin, V.I. Bukhtiyarov, C.R. Müller, A. Fedorov and I.V. Koptyug. **2020**,10, 99-104.

[6] T. González-García, T. Margola, A. Silvagni, F. Mancin, F. Rastrelli. Angew Chem Int Ed **2016**, 55 (8), 2733–2737.

Благодарность

Работа была выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант 25-13-00053).

УД-III-3

МИКРОФЛЮИДНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В СИНТЕЗЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ОРГАНИЧЕСКИХ СУБСТРАТОВ: УСКОРЕНИЕ, МАСШТАБИРОВАНИЕ И АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ НА ОСНОВЕ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И *IN SITU* МОНИТОРИНГА

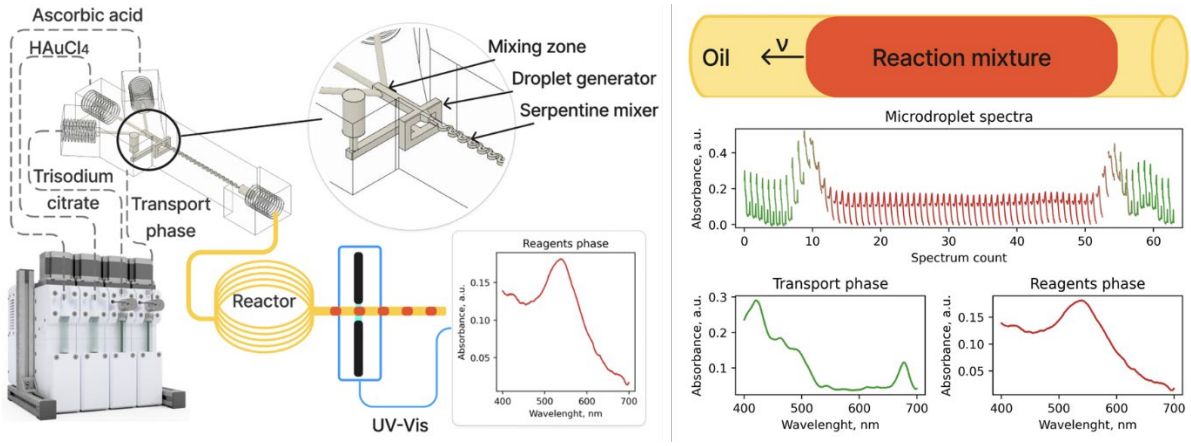
Загребаев А.Д., Нечитайлова И.О., Еид М.Э.А., Терещенко А.А., Эгиль Н.В., Молодцов Д.Ю., Гуда А.А.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия,
zagrebaev@sfedu.ru

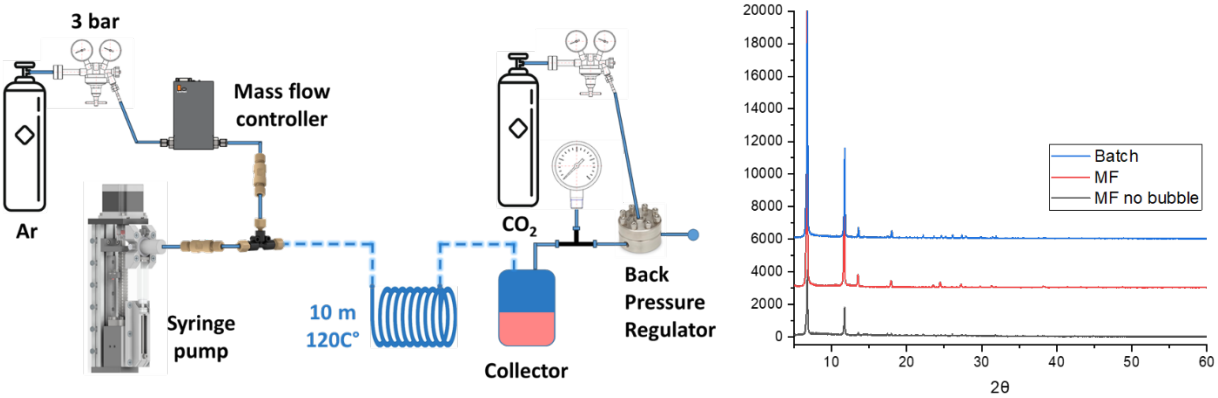
Микрофлюидные технологии обладают значительным потенциалом для синтеза функциональных материалов и органических соединений, однако их масштабирование традиционно сопряжено с техническими сложностями. Эти ограничения успешно преодолеваются за счет интеграции 3D-аддитивной печати и роботизированных систем, обеспечивающих точность и воспроизводимость процессов. Кроме того, уникальные особенности микрофлюидных систем, такие как облегченный тепло- и массообмен, позволяют синтезировать высокочистые продукты с минимальными временными затратами.

Микрофлюидика демонстрирует универсальность, охватывая как синтез сложных молекулярных структур (например, силанов и производных алкалоидов), так и создание функциональных материалов, включая металлоорганические каркасы (МОКП) и наночастицы.

В рамках текущей работы микрофлюидные платформы, интегрированные с 3D-печатными микрореакторами и системами UV-Vis спектральной диагностики, используются для высокопроизводительного скрининга параметров синтеза золотых наночастиц. Автоматизированный подход позволяет за 1 час тестировать 27 комбинаций условий, анализируя данные более чем 1000 индивидуальных капель. Это не только ускоряет оптимизацию процесса, но и обеспечивает непрерывное получение монодисперсных сферических наночастиц с заданными размерами и свойствами, что критически важно для их применения в катализе и медицине.



Параллельно был разработан метод синтеза металлоорганических каркасов CPO-27 потенциально обладающих каталитической активностью с использованием микрофлюидных технологий. Микрофлюидика не только сокращает время синтеза (до рекордных 1.5 минут для кристаллов Cu-CPO27), но и минимизирует ресурсозатраты, соответствуя принципам «зеленой» химии.



Таким образом микрофлюидика, вкупе с аддитивными и автоматизированными решениями, может стать ключевым звеном в трансляции лабораторных разработок в промышленные процессы. Это открывает новые возможности для устойчивого и экономически эффективного производства функциональных материалов и органических соединений.

Благодарность

Alexander Zagrebaev acknowledge financial support from the Russian Science Foundation (project RSF #25-12-00424).

УД-III-4

ДИЗАЙН СТРУКТУРИРОВАННЫХ Ni/H-BETA КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ОДНОСТАДИЙНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО ЦИТРАЛЯ В МЕНТОЛ В НЕПРЕРЫВНОМ РЕЖИМЕ

Симакова И.Л.[1], **Мурзин Д.Ю.**[2]

[1]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2]*Университет Або Академи, Турку, Финляндия*
E-mail: simakova@catalysis.ru

Возобновляемый цитраль является источником ценных коммерческих терпенов: изопулегол, цитронеллол, гераниол и нерол, а также ментол, широко применяющихся в парфюмерии, медицине, фармацевтике и пищевой промышленности (Рис. 1) [1]. Перспективным методом синтеза ментола является *one-pot* превращение цитраля в присутствии бифункционального Ni катализатора [1, 2]. Одним из способов повышения производительности по ментолу может быть переход к непрерывному режиму в присутствии бифункционального структурированного Ni катализатора.

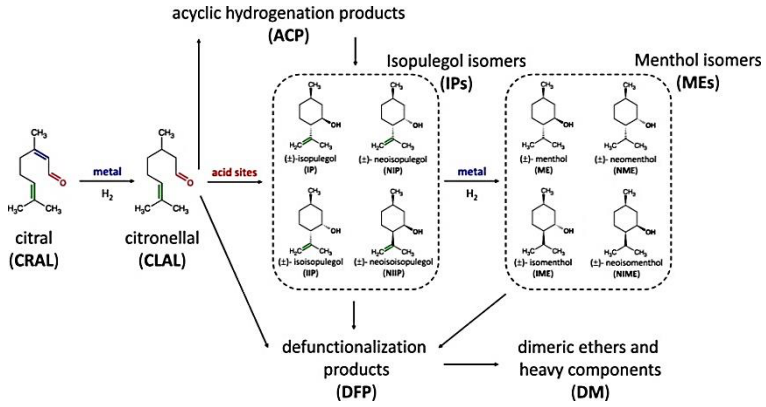


Рис. 1. Схема превращения цитраля

Целью исследования является разработка бифункционального Ni/H-Beta катализатора для непрерывного гидрирования цитраля в ментол, изучение влияния природы связующего и типа предшественника, а также операционных условий на активность Ni/H-Beta катализатора и селективность по целевому ментолу. Сравнение гидрирования цитраля (95 %, Sigma-Aldrich) в циклогексане (0,086 М) проводили в автоклаве и проточном реакторе в присутствии Ni/H-Beta-38 при T = 50-80 °C и PH_2 = 5-10 ати. Количественный анализ осуществляли методом ГЖХ («Хромос ГХ-1000», ПИД, ВР20), идентификацию продуктов - методом ГХ-МС (Agilent 5973N EI/PCI (VF-5ms)). В качестве предшественника никеля использовали – нитрат, хлорид, сульфат, ацетат никеля, в качестве связующего – бентонит, сепиолит, аттапульгит. Катализаторы (порошок и экструдаты) до и после реакции исследованы методами ПЭМ, РФА, РФЭС,

ИК-пиридин, ТПВ-H_2, адсорбции N_2, для экструдатов определены пределы деформации.

По данным ГЖХ анализа основными продуктами гидрирования цитраля на Ni/H-Beta и Ni/(H-Beta+бентонит) являются изопулегол и ментол, на Ni/бентонит – цитронеллаль, цитронеллол и др., что, по-видимому, связано с низкой кислотностью бентонита [3-4]. При этом его введение до 30 вес. % увеличивает удельную поверхность и прочность катализатора без существенного снижения активности. Показано, что катализатор на основе нитрата никеля в качестве предшественника металла проявляет более высокую активность, чем ацетат или хлорид никеля, в то время как полученный из сульфата никеля быстро дезактивируется, по-видимому, из-за блокировки активных центров серосодержащими соединениями (Рис. 2). Снижение выхода ментола связано с его превращением в ментены и гидрированием до ментана и лимонена (Рис. 1).

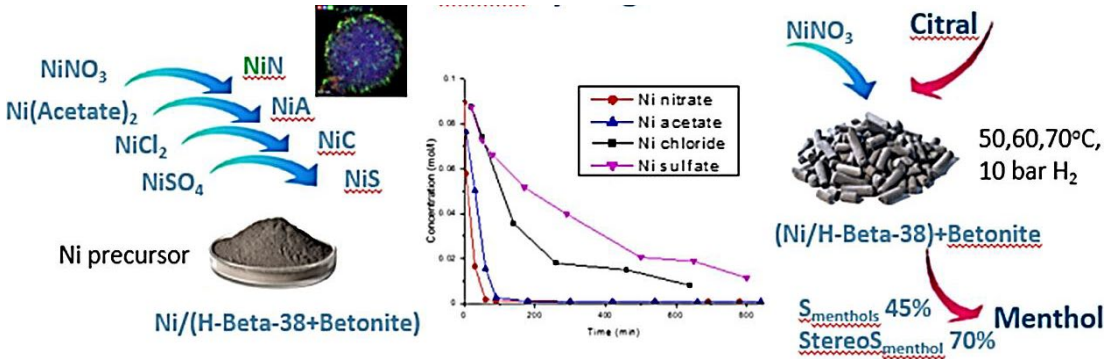


Рис. 2. Влияние прекурсора Ni (нитрат, хлорид, ацетат и сульфат) на конверсию цитраля

В результате проведенных исследований разработан дизайн катализатора Ni/(H-Beta+бентонит) в виде экструдатов для непрерывного «one-pot» синтеза ментола из цитраля, обеспечивающий выход ментола ~75 % (T = 70 °C и P_{H2} = 10).

Список литературы

[1] Trasarti A.F., Marchi A.J., Apesteguía C.R. // Journal of Catalysis. 2007. Vol. 247. P. 155–165.

[2] Simakova I., Mäki-Arvela P., Martinez-Klimov M., Muller J., Vajglova Z., Peurla M., Eränen K., Murzin D.Yu. // Applied Catalysis A: General. 2022. Vol. 636. P. 118586.

[3] Simakova I.L., Vajglová Z., Mäki-Arvela P., Eränen K., Hupa L., Peurla M., Mäkilä E.M., Wärnå J., Murzin D.Y. // Organic Process Research & Development. 2022. Vol. 26, N 2. P. 387-403.

[4] Simakova I.L., Vajglová Z., Martínez-KlimovM., Eränen K., Peurla M., Mäki-Arvela P., Murzin D.Yu. // Organic Process Research & Development. 2023. Vol. 2023. P. 295–310.

Благодарность

Авторы признательны Е.Ю. Герасимову (ПЭМ) и В.А. Пахаруковой (РФА) (ИК СО РАН), а также P. Mäki-Arvela, K. Eränen, M. Martínez-Klimov, M. Peurla, Z. Vajglová (Abo Akademi, Финляндия) за помощь в проведении исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0035).

УД-III-5

КЛАССИФИКАЦИЯ СОВМЕЩЁННЫХ И СОПРЯЖЁННЫХ ПРОЦЕССОВ. СОПРЯЖЁННЫЙ ПРОЦЕСС КОНДЕНСАЦИИ-ГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛЭТИЛКЕТОНА В 5-МЕТИЛ-3-ГЕПТАНОН НА ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Брук Л.Г., Лебедев И.В., Марцинкевич Е.М., Флид В.Р.

Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова РТУ МИРЭА, Москва, Россия, lgbruk@mail.ru

Реакции, протекающие в одном реакторе («one pot reactions») целесообразно разделять на совмещённые, сопряжённые и «каскадные», различающиеся типом взаимосвязи и взаимозависимости.

Совмещённые реакции связаны только тепловым балансом (тепло, выделяющееся или поглощающееся при протекании одной реакции, влияет на температуру в реакторе и, следовательно, на закономерности параллельно или последовательно протекающей второй реакции(й). Кроме того, закономерности последовательно протекающих реакций взаимосвязаны через концентрации продуктов первой реакции, которые являются реагентами второй реакции. К последнему варианту совмещённых процессов относятся реакционно-разделительные процессы, в которых в одном аппарате происходит образование продуктов реакции и их выделение из реакционной смеси (реакционно-ректификационные и реакционно-экстракционные процессы).

Каскадными называют процессы, включающие несколько последовательных реакций, протекающих в одном реакторе. При этом предыдущие реакции создают благоприятные условия для осуществления последующих с достаточно высокими показателями (степень превращения исходных веществ, селективность образования конечных продуктов). Успешная реализация каскадных процессов позволяет обойтись без стадий выделения и очистки промежуточных продуктов, что существенно упрощает технологию производства необходимых веществ. Если последовательные реакции протекают одновременно при одних и тех же условиях, то они ничем не отличаются от совмещённых процессов (см. выше). В случае раздельного проведения последовательных стадий во времени. Последующие стадии могут реализоваться при различных условиях и с использованием разных

катализаторов. В этом случае предыдущая и последующая стадии связаны только через состав продуктов, образующийся в предыдущей стадии.

Сопряжённые процессы, имеющие более сложный характер взаимосвязи и взаимного влияния реакций, можно разделить на два типа [1,2].

1. Процессы с классическим сопряжением (по Н.А. Шилову), в которых можно выделить первичную реакцию, не имеющую термодинамических и кинетических ограничений, и вторичную (зависимую), которая не протекает без первичной реакции.

2. Реакции, взаимосвязанные окислительно-восстановительным балансом или балансом по какому-то элементу.

В докладе будут приведены примеры всех типов сопряжённых процессов. В качестве примера сопряжённого процесса первого типа обсуждается селективное превращение метилэтилкетона (МЭК) в 5-метил-3-гептанон на полифункциональных катализаторах М/активированный уголь, где М – Pd, Ni, Zn и др., с участием водорода (1). Без водорода в тех же условиях (300°, 0,1МПа) образуется широкий набор продуктов альдольно-кротоновой конденсации МЭК (рис. 1). Обсуждается механизм сопряжённого процесса.

$$2\ C_2H_5(CO)CH_3 + H_2 \rightarrow C_2H_5C(CH_3)CH_2C(O)C_2H_5$$

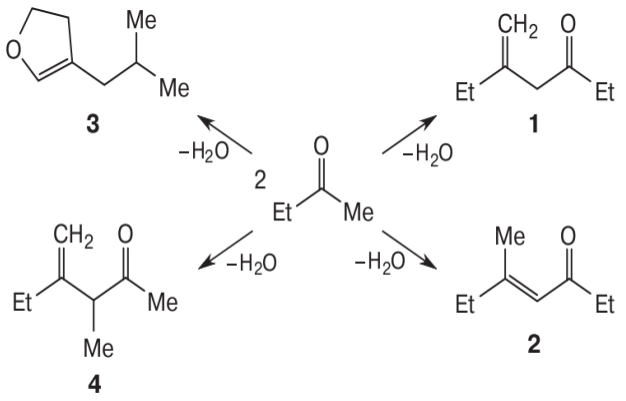


Рис. 1. Схема превращений МЭК в димерные продукты конденсации на катализаторах М/АУ без присутствия водорода в системе

Список литературы

[1] Шилов Н.А. О сопряженных реакциях окисления. М.: Типография Мамонтова, 1905. 304 с.

[2] Брук Л.Г., Темкин О.Н. Кинетика и катализ 2016. Т. 57. No 3. С. 275-296.

[3] Lebedev, I.V., Martsinkevich, E.M., Iskhakova, L.D. et al. Russ Chem Bull, 2024.V.273. P.488.

УД-III-6

ГЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ И ИЗОМЕРИЗАЦИЯ СОЕДИНЕНИЙ НОРБОРНЕНОВОГО РЯДА: СТЕРЕОХИМИЯ, КИНЕТИКА, МЕХАНИЗМ

Флид В.Р., **Замалютин В.В.**

РТУ МИРЭА, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия, vitaly-flid@yandex.ru

Соединения норборненового ряда являются коммерчески доступными субстратами, получаемыми, преимущественно, по реакциям [4+2]-циклоприсоединения из побочных продуктов нефтехимии. Их уникальная напряженная структура открывает возможности для синтеза широкого круга карбоциклических веществ, имеющих квалифицированное применение [1, 2]. Так продукты гидрирования норборненов обладают высокой плотностью и удельной теплотой сгорания, что позволяет их применять в качестве компонентов моторных топлив. Селективное гидрирование (в том числе, парциальное) норборненов и -диенов с сохранением напряженного углеродного каркаса и функциональных групп, является важной фундаментальной и прикладной задачей. Для достижения поставленной цели нами разработан и адаптирован по отношению к объемным карбоциклическим субстратам мезопористый корочковый катализатор ПК-25 (0.25 % Pd/γ-Al_2O_3).

Исследованы основные маршруты протекания жидкофазного гидрирования норборнадиена (ND), *(эндо/экзо)*-5-винил-2-норборненов (VNE), *эндо*-дициклопентадиена (DCPD) и норборненов, содержащих сложноэфирную группу, в интервале температур 25-80 °C и при различных парциальных давлениях водорода [3-6]. Во всех случаях подобраны условия для селективного превращения различных норборненов в норборнаны с сохранением карбоциклического каркаса. Показано, что гидрирование ND и VNE представляет собой сложный последовательно-параллельный процесс, протекающий через образование промежуточных соединений, прежде всего, алкенов, и включает стадии изомеризации. В случае ND механизм реакции усложняется образованием минорного продукта – нортрициклана, а для VNE – миграцией двойной связи с участием винильной группы. При гидрировании *эндо*-DCPD наблюдается последовательное превращение в трициклодекан, который затем может быть полностью изомеризован в *экзо*-изомер на цеолитных катализаторах.

Изучены стереохимические аспекты механизма гидрирования норборненов. На основании строения продуктов сделаны предположения о вариативности

способов координации (адсорбции) карбоциклических субстратов на активном центре катализатора. Изотопными методами доказано, что пространственная адсорбция норборненов на палладии протекает исключительно по *экзо*-типу.

Монодентатная координация VNE и DCPD приводит к образованию изомерных алкенов, сохраняющих структуру субстратов. Их пространственная координация на активном центре катализатора на первой стадии происходит исключительно по более напряженной норборненовой двойной связи, при этом двойные связи другой природы на этом этапе не участвуют. Стадии последовательного гидрирования всех рассматриваемых субстратов четко разделены во времени. При наличии в системе диена, гидрирование алкена полностью подавляется, что свидетельствует о предпочтительной адсорбции диенов на активном палладиевом центре.

В ходе кинетических исследований показано, что скорость гидрирования различных диенов на первой стадии практически одинакова. Практически количественное гидрирование норборненовой связи не затрагивает другие двойные связи – циклопентеновую, винильную и этилиденовую. На этом этапе скорость процесса описывается нулевым кинетическим порядком по субстрату и первым по водороду. Показано, что *экзо*- и *эндо*-изомеры VNE обладают равной активностью в реакции гидрогенизации норборненовой двойной связи [6]. Для всех рассматриваемых диенов скорость их гидрирования незначительно зависит от температуры.

На основании совокупности экспериментальных и теоретических данных с использованием подхода Ленгмюра - Хиншельвуда для рассматриваемых процессов разработаны кинетические модели. Адекватность их описания достигается только при допущении о множественной адсорбции субстратов на одном активном центре гетерогенного катализатора.

Список литературы

[1] Flid V., Gringolts M., Shamsiev R., Finkelshtein E. // Russ. Chem. Rev. 2018. V.87. P. 1169-1205.

[2] Shorunov S.V., Zarezin D.P., Samoilov V.O., Rudakova M.A., Borisov R.S., Maximov A.L., Bermeshev M.V. // Fuel. 2021. V. 283. P. 118935.

[3] Замалютин В.В., Окунева Е.В., Флид В.Р. // Катализ в промышленности. 2024. Т. 24. № 4. С. 35-59.

[4] Zamalyutin V.V., Katsman E.A., Flid V.R. // Pet. Chem. 2023. V. 63. P. 277-288.

[5] Шамсиев Р.С., Флид В.Р. // Кинетика и катализ. 2024. Т. 65. № 3. С. 317-326.

[6] В.В. Замалютин, Е.В. Окунева, А.Ю. Путин, А.И. Ничуговский, В.Р. Флид. Известия Академии наук. Серия химическая, 2025, том 74, № 7, с.2019-2025.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект №23-73-00123.

УД-III-7

ВОЗМОЖНО ЛИ ОКИСЛЕНИЕ НАТИВНОГО ЛИГНИНА ДРЕВЕСИНЫ В ВАНИЛИН В КИНЕТИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ?

Тарабанько В.Е., Кайгородов К.Л., Смирнова М.А., Челбина Ю.В., Коваленко А.Ю., Корсаков А.В.

Институт химии и химической технологии СО РАН,
ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН»,
Россия, 660036, Красноярск, Академгородок, 50/24
veta@icct.ru

Ограниченность природных ископаемых ресурсов ставит химическую промышленность перед неизбежной перспективой постепенного перехода к растительной сырьевой базе. Одна из тактических задач в рамках реализации этой стратегии – получение ванилина и сиреневого альдегида из технических и нативных лигнинов.

Количественное исследование влияния интенсивности массопереноса на скорости поглощения кислорода и накопления ванилина впервые изучено в работах [1,2] на примере окисления костры льна в ванилин. Скорость этого процесса при невысоких плотностях мощности перемешивания описывается линейными зависимостями логарифмов скорости поглощения кислорода и скорости накопления ванилина от логарифма скорости вращения мешалки в цилиндрическом реакторе. Эти зависимости объясняются лимитированием скорости процесса в целом скоростью диффузии кислорода через жидкий диффузионный слой у поверхности раздела фаз газ-жидкость и часто интерпретируются моделью, связывающей скорость лимитируемого диффузией химического процесса с плотностью мощности перемешивания реакционной массы. Изучение влияния объема реакционной массы на поглощение кислорода и накопления ванилина подтвердило адекватность модели плотности мощности перемешивания как основной характеристики, определяющей кинетику исследуемых процессов [2]. Многократное повышение плотности мощности перемешивания (двигатели от 8 до 200 ватт) приводит к смене лимитирующей стадии от внешнедиффузионного переноса кислорода у границы раздела фаз газ-жидкость к внутридиффузионному торможению массопереноса реагентов и продуктов внутри твердых частиц лигноцеллюлозы. Показано, что максимальные выходы ванилина не зависят от плотности мощности перемешивания в широком изученном диапазоне, т.е. они могут быть получены в условиях лимитирования

как внешнедиффузионным, так и внутридиффузионым массопереносом [2]. Возможности перевода процесса окисления нативных лигнинов в ароматические альдегиды из внутридиффузионного режима в кинетический, а также влияние фракционного состава сырья на кинетику процесса в литературе не обсуждаются.

Цель настоящей работы заключается в исследовании влияния фракционного состава загружаемого в реактор порошка сосновой древесины на максимальные выходы ванилина и динамику его накопления и оценке возможности его протекания в кинетическом режиме.

В процессе окисления сосновой древесины различных фракций помола (от фракции порядка 100 микрон до 2 мм) максимальные выходы ванилина (вплоть до 36 % в расчете на лигнин) практически не зависят от фракционного состава. Это означает, что ответ на вопрос, сформулированный в заголовке, получен: в изученных условиях интенсивного массопереноса окисление порошка сосновой древесины протекает в кинетическом режиме. Проведенные расчеты отношений скорости диффузии реагентов и скорости лимитирующей химической реакции (критерий подобия Тиле) подтверждают этот вывод. Полученные выходы ванилина (36 %) превышают известные данные по нитробензольному окислению сосновой древесины (loblolly pine, 30-34 %) и также могут быть обусловлены переходом процесса окисления в кинетический режим в изученных условиях.

Полученные результаты показывают, что для получения высоких выходов ванилина глубокое измельчение древесины не требуется, достаточно использовать опилки фракции менее 2 мм.

Список литературы

[1] Tarabanko V.E., Vigul D.O., Kaygorodov K.L., Kosivtsov Y., Tarabanko N. Chelbina Y.V. BIOMASS CONVERSION AND BIOREFINERY, 2022. - DOI: 10.1007/s13399-022-02366-8.

[2] Tarabanko V.E., Kaygorodov K.L., Kazachenko A.S., Smirnova M.A., Chelbina Yu.V., Kosivtsov Yu., Golubkov V.A. CatalystsБ 2023,13, 1490. DOI: 10.3390/catal13121490.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-26-20104, https://rscf.ru/project/25-26-20104/, и гранта Красноярского краевого фонда науки.

УД-III-8

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ ТРАНСФОРМАЦИИ ВОДНОГО РАСТВОРА ПАРАЦЕТАМОЛА ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ НАНОСЕКУНДНОГО ИМПУЛЬСНОГО ПУЧКА ЭЛЕКТРОНОВ

Бочарникова Е.Н.[1,2], Чайковская О.Н.[1,2], Филатов И.Е.[2], Соломонов В.И.[2], Макарова А.С.[2]

[1]Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия, bocharnikova.2010@mail.ru
[2]Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия, tchon@phys.tsu.ru

В последние время наблюдается рост интереса к экологической значимости фармацевтических соединений в водах. Существуют различные источники этого типа загрязнения, такие как отходы химической промышленности, утилизация в быту и выделения после введения людям и животным. Парацетамол широко используется в качестве противовоспалительного средства и анальгетика. Эффективные методы удаления парацетамола из воды критически важны для защиты окружающей среды и здоровья человека. Технологии, основанные на использовании пучков электронов, демонстрируют потенциал для деградации фармацевтических загрязнителей, однако необходимо детальное изучение продуктов трансформации и их свойств для оценки безопасности и эффективности процесса. Целью работы является изучение физико-химических свойств продуктов трансформации парацетамола, образующихся после обработки парацетамола наносекундным импульсным пучком электронов на слое адсорбента.

Облучение парацетамола было проведено с использованием вертикального электронного пучка от генератора РАДАН-300, установленного в лаборатории квантовой электроники (Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия) [3]. Раствор парацетамола 100 мкл в этаноле (С = 10 г/л) наносился на участок поверхности адсорбента диаметром 2.54 см. В работе продукты трансформации парацетамола были изучены на пластинках для ТСХ (Silufol brend, Kavalier Sázava, Чехия) с SiO_2 адсорбирующим слоем на алюминиевой подложке толщиной 0.093 мкм с размером пор 60 Å и инертным неорганическим люминесцентным индикатором F254. Для исключения «краевого эффекта» боковые края пластинок на подложке очищали от сорбента. Затем облучали импульсным электронным пучком длительностью 2 нс со средней энергией

электронов 170 кэВ, плотностью током 130 А/см^2 и плотностью энергии в импульсе пучка 44.2 мДж/см^2. Количество импульсов облучения от 0 до 1600 с частотой 1 Гц. Для изучения взаимодействия парацетамола с воздушной средой в процессе облучения было выполнено экранирование пластинки для ТСХ слоем фольги из алюминия. После облучения производили экстрагирование 2 мл воды и разбавляли полученный раствор до концентрации 0.01 г/л дистиллированной водой для регистрации спектров поглощения и флуоресценции. Внешний вид пластинок для ТСХ и спектры поглощения и флуоресценции до и после облучения парацетамола на поверхности адсорбента приведены на рис. 1.

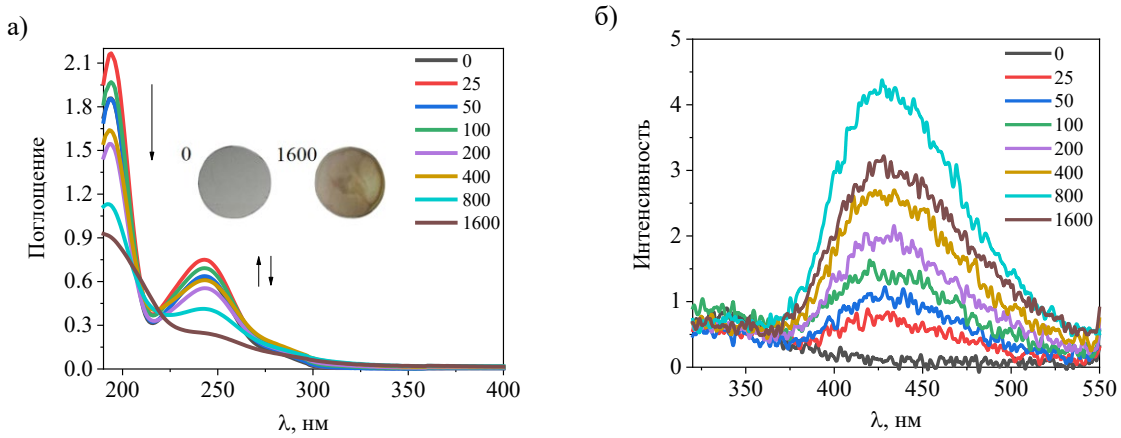


Рис. 1. Спектры поглощения (а) и флуоресценции (б) смыва парацетамола с поверхности пластинки для ТСХ до и после облучения электронным пучком. Цифрами на рисунке указано количество импульсов облучения. Длина волны возбуждения флуоресценции 280 нм

Показано, что при увеличении количества импульсов облучения происходит эффективная убыль парацетамола на поверхности пластинок для ТСХ. Также в работе получены данные об общем содержании фенольных соединений в смеси продуктов трансформации парацетамола после воздействия электронным пучком. Полученные результаты позволят разработать более эффективные и безопасные технологии удаления парацетамола и других фармацевтических загрязнителей из водных ресурсов.

Благодарность

This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 24-19-20031).

УД-III-9

КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ЖИДКОФАЗНОГО ОКИСЛЕНИЯ ПЕРОКСИДОМ ВОДОРОДА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Пай З.П., Хлебникова Т.Б.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
E-mail: zpai@catalysis.ru

Представлены результаты комплексных исследований по методам приготовления и установлению структурных характеристик эффективных катализаторов окисления органических соединений пероксидом водорода с привлечением методов: EXAFS, SAXS, ЯМР, КР и ИК-спектроскопии.

Рассмотрены возможности применения в условиях межфазного катализа бифункциональных гомогенных пероксополиоксокомплексов металлов в сочетании с органическими катионами, имеющими кватернизированный азот, на примерах реакций окисления пероксидом водорода органических соединений различных классов с получением востребованных продуктов – алифатических и ароматических эпоксидов, моно- и дикарбоновых кислот, а также биологически активных соединений медицинского назначения.

Благодаря особенностям комплексов [1-3], основанным на специфической структуре, они являются уникальной платформой для доставки кислорода к субстрату в ходе реакций окисления (Рис. 1).

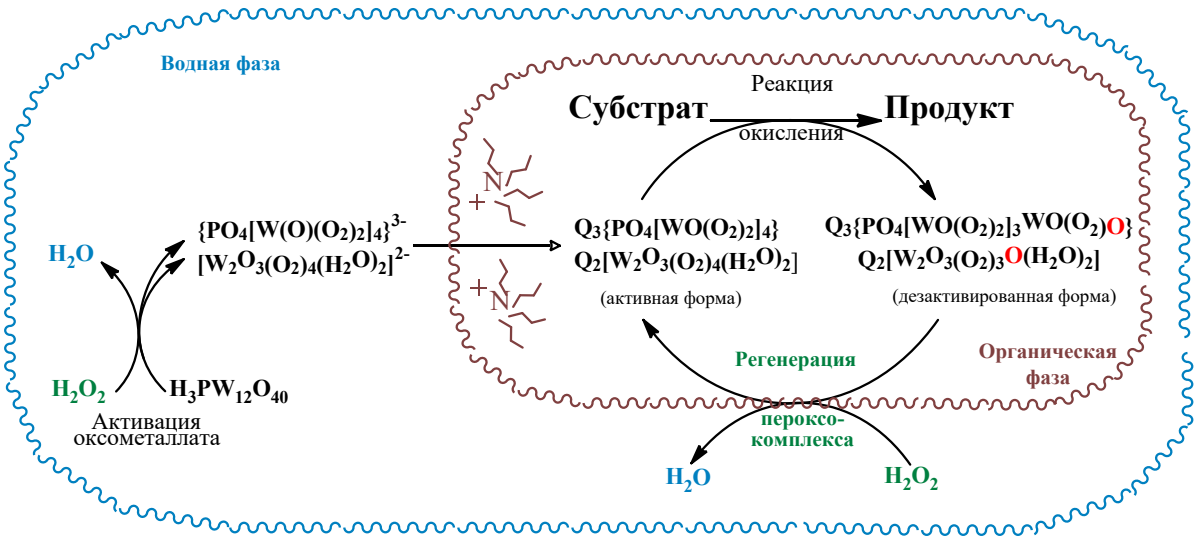


Рисунок 1. Схема механизма проведения реакций окисления в присутствии каталитических комплексов $Q_3\{PO_4[WO(O_2)_2]_4\}^{3-}$ и $Q_2[W_2O_3(O_2)_4(H_2O)_2]$

Липофильный катион Q^+, выполняя роль катализатора межфазного переноса, удерживает комплексный анион $\{PO_4[WO(O_2)_2]_4\}^{3-}$ в органической

фазе. При этом можно выделить следующие стадии: взаимодействие катализатора и субстрата, приводящие к образованию комплекса [**Cat(O_2)**–**Субстрат**], где **Cat(O_2)** содержит активные пероксогруппы (η^2–O_2); последующее образование **Продукта** и неактивной оксо-формы катализатора (**CatO**), содержащего W=O-группы; регенерация катализатора, представляющая собой взаимодействие оксо-формы катализатора с пероксидом водорода и приводящее к получению активной пероксо-формы катализатора (**Cat(O_2)**).

Выбор стратегии интеграции межфазного и гомогенного катализа [2] дает новые возможности управления процессами основанными на проведении реакций окисления H_2O_2 в двухфазных жидких системах для широкого круга органических соединений, позволяя: уменьшить количество стадий синтеза; осуществлять реакции в мягких условиях при $T \leq 100$ °C и атмосферном давлении; отказаться от использования дополнительных органических растворителей, когда роль органической фазы может выполнять субстрат. В итоге это приводит к снижению затрат при организации таких каталитических технологий: снижения капитальных затрат, включая энергопотребление, уменьшение отходов производства и ряд других преимуществ.

Список литературы

[1] Pai Z.P., Chesalov Yu.A., Berdnikova P.V. and others. // Appl. Catal. A: Gen., 2020, V. 604, P. 117786. DOI: 10.1016/j.apcata.2020.117786.

[2] Pai Z.P., Parmon V.N. and Bukhtiyarov V.I. // Kinet. Catal., 2023, V. 64, No 4, P. 329. DOI: 10.1134/s0023158423040110.

[3] Pai Z.P., Khlebnikova T.B., Zhizhina E.G., Tertishnikov I.V., Adonin N.Y., Parmon V.N., Bukhtiyarov V.I. Catalysis in Industry. 2025. V.17. N3. P.274-287. DOI:10.1134/s2070050425700187.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН, проект FWUR-2024-0035.

УД-III-10

РАЗРАБОТКА ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЧИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НИТРАТНО-АММИАЧНЫМ СПОСОБОМ ИЗ ТРИГИДРАТА ГЛИНОЗЕМА

Рувинский П.С.[1], Родина В.О.[1], Максимова О.А.[1], Одинцов Д.С.[1], Коренев В.В.[2], Кругляков В.Ю.[1], Корнаухов Р.Е.[3], Яковлев В.А.[1]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]АО ТВЭЛ, Москва, Россия
[3]АО АЭХК, Ангарск, Россия
yakovlev@catalysis.ru

Оксид алюминия (ОА) из-за широких возможностей варьировать его текстурных характеристики, фазовый состав, введение модификаторов занимает лидирующее место как носитель катализаторов для различных процессов в нефте-, газопереработке. [1],[2]. Особое место в данном списке занимают катализаторы, использующие алюмооксидный носитель высокой чистоты (в частности, по содержанию Na, Fe, Si), такие как катализаторы риформинга, дегидрирования пропана. На данный момент, промышленное получение высокочистого ОА на территории РФ не реализовано. Технология получения высокочистого гидроксида/оксида алюминия нитратно-аммиачный способ переосаждения технического тригидроксида алюминия (гиббсита) была реализована в г. Каменское (Днепродзержинск, СССР), но в настоящий момент отсутствует. Технология включает следующие основные стадии: растворение гиббсита в азотной кислоте, очистка от микропримесей, осаждение нитрата алюминия аммиаком, старение, отфильтровывание и отмывка гидроксида алюминия, сушка гидроксида, получение суспензии или пасты гидроксида, капельная или экструзионное формование, сушка, прокалка до оксидных форм. Гидроксид алюминия характеризуется низким содержанием примесей (Na_2O и Fe_2O_3 на уровне < 0,005 % масс.). Последующая термообработка гидроксида, позволяет получать высокочистый ОА, а также носители на его основе [3].

В работе представлены результаты исследования нитратно-аммиачного переосаждения от лабораторного до опытного уровня. Целью работы создание установки по получению различных типов порошкового гидроксида алюминия (ПГА) производительностью 5 кг/сутки, а также носителей катализаторов на его основе (экструдированного и сферического оксида алюминия (ОА)). Было проведено систематическое изучение всех вышеперечисленных стадий процесса приготовления гидроксида алюминия. Также было осуществлено масштабирование процессов получения четырех типов оксида алюминия: шариковые γ-Al_2O_3 для катализатора риформинга бензиновых фракций в подвижном слое и θ-Al_2O_3 для катализатора дегидрирования пропана по технологии Oleflex и экструдированные γ-Al_2O_3 для катализатора риформинга бензиновых фракций в неподвижном слое и θ-Al_2O_3 для селективного

гидрирования производных ацетилена в пропан-пропиленовой фракции. Для наработки опытных партий по 50 кг каждого типа ОА были созданы технологические линии производительностью 5 кг/сутки. Полученные носители использовались для приготовления соответствующих катализаторов, которые были протестированы на лабораторном уровне в целевых реакциях. Сравнительное тестирование показало, что полученные катализаторы не уступают по своим свойствам зарубежным аналогам.

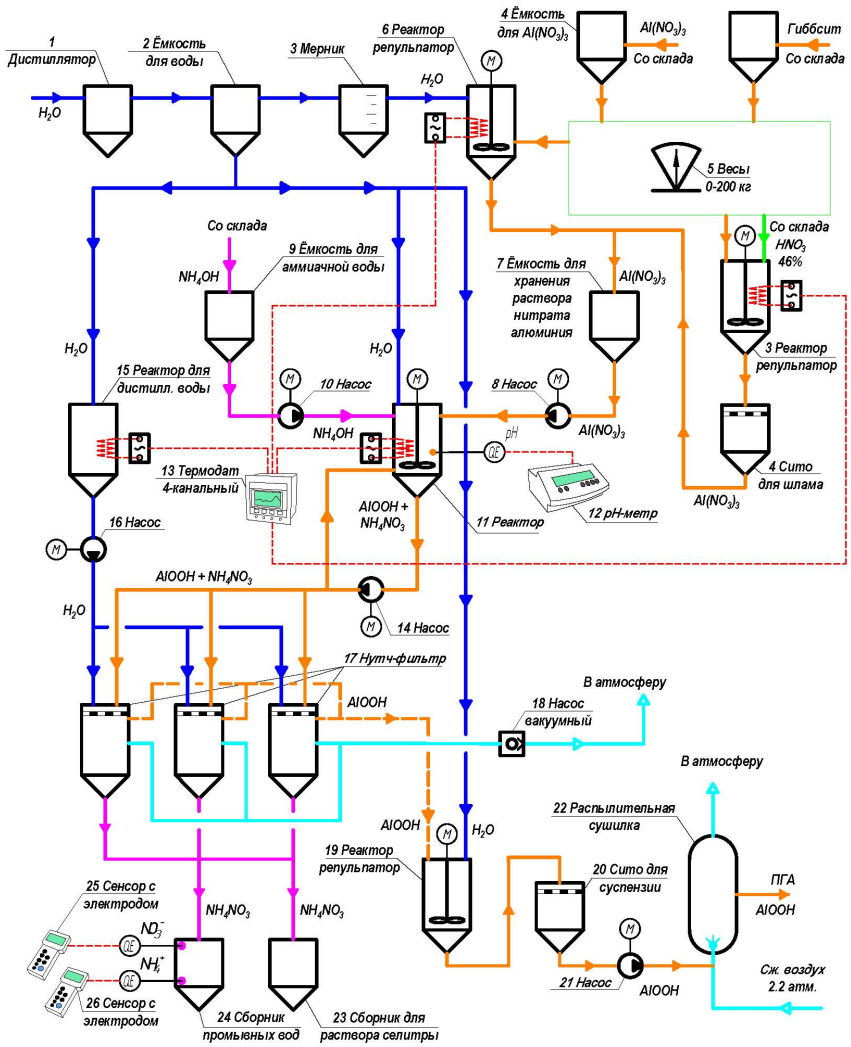


Рис. 1. Технологическая схема получения ПГА из гиббсита по нитратно – аммиачным способом

Следующим этапом является создание опытно-промышленной установки по получению ПГА производительностью 22/год.

Список литературы

[1] Пахомов Н.А. Научные основы приготовления катализаторов: введение в теорию и практику. Новосибирск: СО РАН; 2011.

[2] Иванова А.С. Оксид алюминия: применение, способы получения, структура и кислотно-основные свойства. Промышленный Катализ в Лекциях, Москва: Калвис; 2009, р. 7–56.

[3] Дзисько В.А., Иванова А.С. Основные Методы Получения Активного Оксида Алюминия. Известия Сибирского Отделения Академии Наук СССР 1985; 5:110–9.

УД-III-11

СИСТЕМА КОНТРОЛЯ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ ПЛАТИНЫ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА В ЖИДКОЙ СРЕДЕ

Паперж К.О., Гутерман В.Е., Канцыпа И.В., Зайцева Э.А., Худолей А.В.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
kpaperzh@yandex.ru

Для контроля кинетики фазообразования наночастиц (НЧ) металлов в условиях их синтеза в жидкой фазе применяются УФ-спектроскопия, ЯМР, просвечивающая электронная микроскопия, малоугловое рентгеновское рассеяние и рентгеновская абсорбционная спектроскопия [1]. Как правило, эти дорогостоящие методы применимы для сильно разбавленных (концентрации менее 0.05 М) растворов. В условиях промышленного производства НЧ металлов в жидкой среде используются реакторы большого объема, концентрации реагентов превышают 5 М, что сильно ограничивает применение вышеперечисленных методов контроля. В таких условиях особое значение приобретают методы применимые для изучения кинетики превращений, протекающих в концентрированных растворах, при непрерывном перемешивании и газопропускании.

В настоящем исследовании на примере восстановления Pt(IV) этиленгликолем представлен новый подход к изучению кинетики формирования НЧ Pt, размер и размерное распределение которых определяют характеристики Pt/C катализаторов для топливных элементов с протонообменной мембраной [1]. Подход заключается в непрерывном мониторинге потенциала индикаторного электрода и окраски реакционной среды. Для измерения потенциала использовали платиновый индикаторный электрод и хлоридсеребряный электрод сравнения. Одно колено электролитического мостика было погружено в реакционную среду. При восстановлении прекурсора платины регистрировали изменение потенциала, значение которого в каждый момент времени определялось природой и концентрацией присутствующих в растворе окислителей и восстановителей (Рис. 1 а). Процесс восстановления Pt(IV) протекает с изменением окраски среды: от желтого цвета (соединения платины Pt (IV)) до светло-желтого (Pt (II)) и черного (Pt(0) и Pt НЧ). Изменение окраски среды контролировали с помощью цифрового микроскопа, регистрировавшего три составляющие окраски – синюю, красную и зеленую. По изменению окраски

судили о начале и завершении этапа нуклеации/роста НЧ Pt (Рис. 1 a). Для подтверждения корректности определения стадий превращения прекурсора в металлические НЧ, после начала восстановления отбирали пробы реакционной среды, состав которых исследовали с помощью УФ-спектроскопии (Рис. 1 b,c).

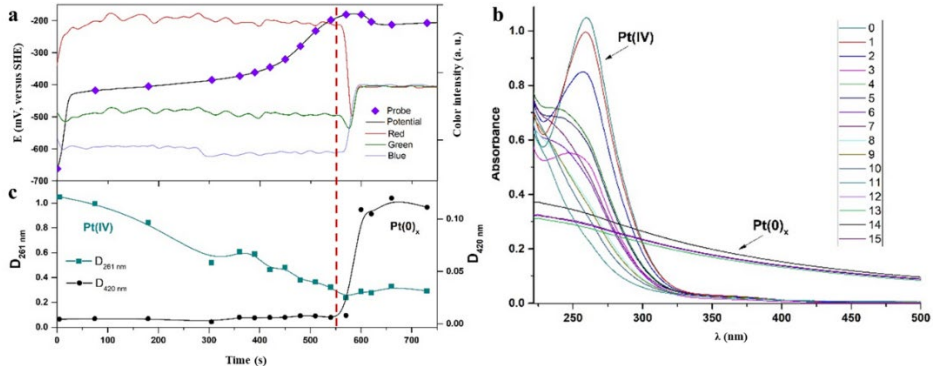


Рисунок 1. (a) Изменение редокс потенциала и трех компонент окраски реакционной среды в процессе синтеза НЧ Pt. (b) Абсорбционные УФ-спектры платины для разбавленных растворов, соответствующих отобранным пробам. (c) Изменение интенсивности электронного поглощения Pt(IV) на длине волны 260 нм и НЧ Pt на длине волны 450 нм

Сопоставление характера кривых изменения окраски и изменения интенсивности сигналов УФ-спектров для проб, отобранных в ходе синтеза (Рис.1), свидетельствует о том, что изменение окраски раствора действительно обусловлено восстановлением Pt(IV) до Pt(II), а затем – до атомов и НЧ металлической Pt. Быстрое формирование зародышей, которые и являются растущими НЧ платины, сопровождается потемнением раствора и соответствует скачкообразному изменению интенсивности 3х компонент окраски (Рис. 1 a). После резкого изменения окраски раствора, превалирующей формой платины в реакционной среде становятся ее НЧ.

Разработанный нами реактор, измерительный комплекс и система контроля фазообразования платины позволила исследовать кинетику образования НЧ в широком диапазоне условий.

Список литературы

[1] V. Guterman, K. Paperzh, I. Kantsypa, E. Vetrova, A. Metelitsa, I. Pankov, Yu. Pankova. Front. Chem. Sci. Eng., 2025. DOI: 10.1007/s11705-025-2559-9.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства Южного федерального университета («Приоритет 2030»).

УД-III-12

ТВЁРДЫЙ КИСЛОТНЫЙ ПОЛИМЕРНЫЙ КАТАЛИЗАТОР ДЛЯ СИНТЕЗА ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Манаенков О.В., Гаврилова Е.П., Кислица О.В., Матвеева В.Г., Сульман М.Г.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
ovman@yandex.ru

Левулиновая кислота (ЛК) является одним из самых ценных «платформенных» соединений, получаемых из биомассы [1, 2]. ЛК является предшественником большого количества необходимых для химический промышленности реагентов и широко используется в производстве смазочных материалов, топливных присадок, растворителей [3], хиральных реагентов, смол, фармацевтических препаратов, биологически активных веществ [4]. В упрощённом виде процесс образования ЛК из фруктозы представлен на рисунке 1. Минеральные кислоты являются очень эффективными катализаторами данных реакций. С введением всё более жёстких экологических стандартов их использование становится менее привлекательным, и альтернативой им могут стать твёрдые кислоты. С этой точки зрения интерес представляет использование в качестве кислотного катализатора сульфированного сверхсшитого полистирола (СПС).

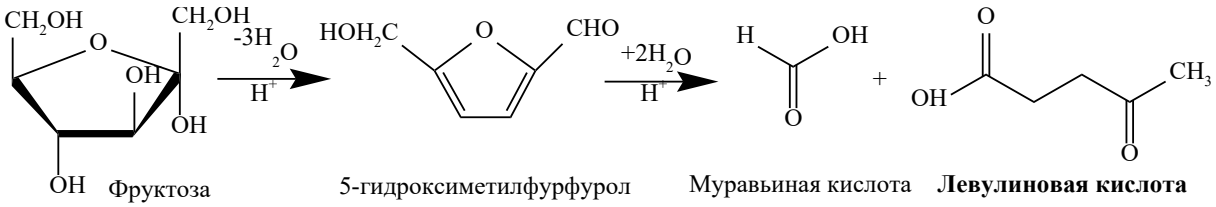


Рис. 1. Конверсия фруктозы в левулиновую кислоту

СПС завоевал большую популярность на коммерческом рынке. Благодаря возможности функционализации область применения СПС значительно расширяется. К настоящему времени накоплен обширный опыт использования СПС для синтеза гетерогенных каталитических систем различного назначения [5].

В данном исследовании предложена простая и недорогая методика синтеза твёрдых кислотных катализаторов на основе сульфированного доступного коммерческого сверхсшитого полистирола MN270. Синтезированные образцы были охарактеризованы различными методами и протестированы в реакции конверсии фруктозы в ЛК. Было показано, что сульфирование полимера в

концентрированной H_2SO_4 приводит, как минимум, к тысячекратному увеличению концентрации кислотных центров на его поверхности. Сами образцы сохраняют микро-мезопористый характер при уменьшении удельной пощади поверхности с 1200 до 650-750 $м^2/г$ и являются термически стабильными до температуры 200 °C. Показано, что время сульфирования и температура процесса не оказывают заметного влияния на каталитические свойства SMN270.

При использовании SMN270 в реакции дегидратации фруктозы были получены выходы ЛК до 39,5 % со 100 %-ной конверсией исходного моносахарида. Очевидно, что дальнейшие исследования должны быть направлены на оптимизацию условий реакции для увеличения выхода ЛК, а также на изучение возможности регенерации и повторного использования катализаторов. Можно предположить, что твёрдые кислотные катализаторы на основе СПС могут стать эффективной заменой минеральным кислотам вследствие своей доступности, простоте синтеза, достаточно высоким выходам ЛК, безопасности для окружающей среды и отсутствию проблем с коррозией оборудования. Таким образом, результаты исследования могут стать основой для создания эффективных технологий каталитической конверсии растительной биомассы в ценные химикаты.

Список литературы

[1] Kohli K., Prajapati R., Sharma B.K. // Energies. 2019. V. 12. P. 233-273.
[2] Yan K., Lafleur T., Wu X., Chai J., Wu G., Xie, X. // Chem. Commun. 2015. V. 51. P. 6984-6987.
[3] Demolis A., Essayem N., Rataboul F. // ACS Sustain. Chem. Eng. 2014. V.2. P. 1338-1352.
[4] Bozell J.J., Moens L., Elliott D.C., Wang Y., Neuenscwander G.G., Fitzpatrick S.W., Bilski R.J., Jarnefeld J.L. // Resour. Conserv. Recycl. 2000. V. 28. P. 227-239.
[5] Manaenkov O., Nikoshvili L., Bykov A., Kislitsa O., Grigoriev M., Sulman M., Matveeva V., Kiwi-Minsker L. // Molecules. 2023. V. 28. P. 8126.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (25-79-20018).

УД-III-13

NOVEL CATALYTIC SYSTEMS FOR CASCADE REACTION OF TERPENOIDS

Agabekov V.E., Sidorenko A.Yu.

Institute of Chemistry of New Materials of NAS of Belarus, Minsk, Belarus
camphene@gmail.com

A promising direction in the development of green chemistry is the use of renewable raw materials in tandem (cascade) reactions, the advantage of which is the sequential formation of several chemical bonds in one reaction space [1].

It was found that SO_3H-functionalized carbon and aluminosilicate nanomaterials (carbon and aluminosilicate nanotubes, montmorillonite, biochar) exhibit catalytic activity in the tandem Prins-Ritter reaction of (-)-isopulegol with benzaldehyde and acetonitrile. The addition of water to the reaction system has been shown to have a strong effect on the overall selectivity and the ratio of stereoisomers formed. The yield of 4R-isomer increases sharply with increasing amount of H_2O, while the highest amount of 4S-isomer was observed with minimal addition of water. Experimental results and DFT calculations clearly indicate kinetic control during the formation of 4R-amide.

It has been shown that in the cascade reaction of the terpenoid 4-hydroxymethyl-2-carene the highest yield of target tetracyclic compounds is observed in the presence of montmorillonite K-10 with acidity (104.0 μmol/g). The condensation of 4-hydroxymethyl-2-carene with a number of carbonyl compounds on a K-10 catalyst dried at 200 °C occurs with yields of the target polycyclic products up to 97.0 % [2].

In the catalytic reaction of α-pinene with formaldehyde in acetic acid, a new terpenoid, 8-acetoxy-4-hydroxymethyllimonene, was formed. It can be considered as a chiral platform for further synthesis. In the presence of acidic zeolite H-Beta-25 (301.0 μmol/g) or phosphoric acid, selectivity for the products of FA addition to the initial reagent (32.3–35.3 %) and its direct protonation (30.0–36.8 %) are comparable. However, when using H_3PO_4, the amount of borneol derivatives formed as a result of the Wagner-Meerwein rearrangement is the smallest (13.5 %), which leads to the greatest selectivity for the target 8-acetoxy-4-hydroxymethyllimonene (24.0 %) [2]. The DFT calculations demonstrated that in the presence of H_3PO_4 there is no significant difference between the energy of the intermediates formed due to formaldehyde addition to α-pinene or its direct protonation, which correlates well with the selectivity

data [2]. It has been shown that the reaction of 8-acetoxy-4-hydroxymethyllimonene with a number of aldehydes produces heterocyclic products with the structure of 1,4- and 1,8-cineole.

Promising catalytic systems are synthetic kaolinite nanotubes, which were activated by a piranha solution (a mixture of sulfuric acid and hydrogen peroxide). In their presence, the isomerization reaction of αpinene epoxide proceeds with the formation of *trans*-carveol (57.0 %) as the main product.

References

[1] A. Behr, A.J. Vorholt, K.A. Ostrowski, T. Seidensticker, Green Chem., 2014, 16, 982–1006.

[2] A.Yu. Sidorenko, V.E. Agabekov, New catalytic systems for the condensation of monoterpene compounds with aldehydes, Rus. J. Gen. Chem., 2024, 94, 1–20.

УД-III-14

ДИЗАЙН КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДЛЯ КАСКАДНЫХ ПРОЦЕССОВ В КОНВЕРСИИ ЦЕЛЛЮЛОЗОСОДЕРЖАЩЕЙ БИОМАССЫ

Матвеева В.Г., Сульман А.М., Тихонов Б.Б., Лисичкин Д.Р., Гребенникова О.В., Молчанов В.П., Соколова А.В., Сидоров А.И.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
valen-matveeva@yandex.ru

С развитием переработки биомассы различные виды биомассы стали перспективным экологически чистым сырьем, способным заменить невозобновляемые ископаемые ресурсы. Как правило, переработка биомассы требует проведения нескольких реакций для получения химических веществ с добавленной стоимостью или биотоплива, даже если сырье является производным биомассы. Чтобы сделать такую переработку экономически и экологически целесообразной, были предложены каскадные (тандемные) реакции, когда каждая каталитическая стадия осуществляется в одном реакторе. Для таких реакций требуются би- или многофункциональные катализаторы, сочетающие различные активные центры на одних и тех же носителях или на смеси носителей. Основной целью разработки многофункциональных катализаторов для каскадных реакций является контроль селективности для предотвращения высоких энергетических и трудовых затрат, связанных с разделением и очисткой, а также достижение высокой каталитической активности [1]. В данной работе представлены основные факторы дизайна каталитических систем, влияющие на соотношение структура–свойства, которые могут различаться в зависимости от типа катализатора. К основным факторам относятся количество и сила кислотных и основных центров, взаимодействие между ними и металлическими центрами, синергетические эффекты, размеры и морфология наночастиц, наноструктуры, пористость и т.д. Изучено несколько направлений создания многофункциональных ферментативных катализаторов для каскадных реакций при переработке биомассы. Многофункциональность может быть создана двумя или более ферментами, ферментами и кислотными или основными группами, ферментами и металлические участки и т.д. В гетерогенных катализаторах различные функциональные свойства могут быть иммобилизованы на одних и тех же или разных носителях. В последнем случае смесь функционализированных носителей используется в каталитической

реакции в одном реакторе. Во всех случаях существует опасность того, что присутствие сильных кислотных групп может дезактивировать ферменты или кислотные группы нейтрализуются ферментами, поэтому тщательный выбор каталитических центров является первостепенной задачей. Существуют различные методы иммобилизации целлюлазы – комплекса ферментов (эндоглюканаз, экзоглюканаз и β-глюкозидаз), который используется для разрушения различных химических связей в целлюлозе. Морфология наноструктурированных носителей (в том числе магнитоотделяемых), мультиэнзимные системы, присутствие металлических активных центров, а также факторы, влияющие на активность ферментов, позволяют достичь максимальной конверсии целлюлозных биологических отходов в сбраживаемые сахара [2].

Каскадная (или тандемная) реакция реализуется, когда в рамках одностадийного процесса выполняется несколько стадий реакции, для которых требуются разные катализаторы. Для успешного проведения этих реакций и наилучших решений основных проблем устойчивой переработки биомассы требуются двух- или многофункциональные катализаторы, включающие ферменты в том числе.

Список литературы

[1] Sulman, A.M.; Matveeva, V.G.; Bronstein, L.M. Cellulase Immobilization on Nanostructured Supports for Biomass Waste Processing. *Nanomaterials* **2022**, *12*, 3796.

[2] Bronstein, L.M.; Matveeva, V.G. Multifunctional Catalysts for Cascade Reactions in Biomass Processing. Nanomaterials **2024**, 14, 1937.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 24-79-10042.

УД-III-15

DESIGN OF PINE NUT SHELL DERIVED ACTIVATED CARBONS USING PHOSPHORIC ACID ACTIVATION TECHNIQUE FOR NON-AQUEOUS ELECTROLYTE BASED SUPERCAPACITORS

Yeletsky P.M.[1,2], Borodina O.A.[1,2], Mozyleva M.A.[1], Lebedeva M.V.[1,2], Yakovlev V.A.[1,2]

[1]Federal Research Center Boreskov Institute of Catalysis SB RAS, Novosibirsk, Russia
[2]Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia
yeletsky@catalysis.ru

Currently, activated carbons (ACs) from vegetable biomass are widely used in supercapacitors (SCs), especially those based on non-aqueous electrolytes. Key requirements to ACs as SC electrodes include [1]: 1) BET specific surface area (BET SSA) ≥1500 m^2/g; 2) maximum possible effective specific surface area; 3) micro-mesoporous structure; 4) increased electrical conductivity to reduce specific resistivity of SCs; 5) maximal density to provide high volumetric capacitive characteristics; 6) economic feasibility.

Synthesis of ACs using orthophosphoric acid is very attractive due to the mild conditions, high yield (30-80 %), and the absence of the feedstock pre-carbonization stage. Among precursors used biomass is known to be the most suitable due to both the environmental friendliness and the activation mechanism [2]. Such ACs have the required porous structure but they are known to have lower S_{BET} (≤~1800 m^2/g).

This study focuses on enhancing H_3PO_4 activation technique to produce high-yield, high-surface area ACs from pine nut shells as a biomass having an elevated density and strength that could be inherited by the ACs being produced. Pine nuts are known to be the only nuts harvested in Russia on an industrial level, and their shell represents an attractive feedstock for AC production.

To enhance this approach in order to obtain ACs with more developed surface area, a pre-treatment stage introduction was investigated. When treating the blends of H_3PO_4 with the ground pine nut shell (PNS) at temperatures higher than mere drying (150-300 °C) followed by activation it was found that this significantly improves textural properties of the ACs being produced (Figure a). Also, an important result was the fact that variation of the ratio of H_3PO_4 to PNS significantly affects pore size distribution of the AC samples (Figure b).

Testing the ACs as electrode materials for SCs based on 1M $BMIMBF_4$/ACN as an electrolyte has shown that their capacitance directly depends on pore size, *i.e.* effective surface area (Table). It was possible to reach the capacitance of 125 F/g in the case of the AC sample with the highest mean pore size indicating on the fact that it has the highest surface utilization degree.

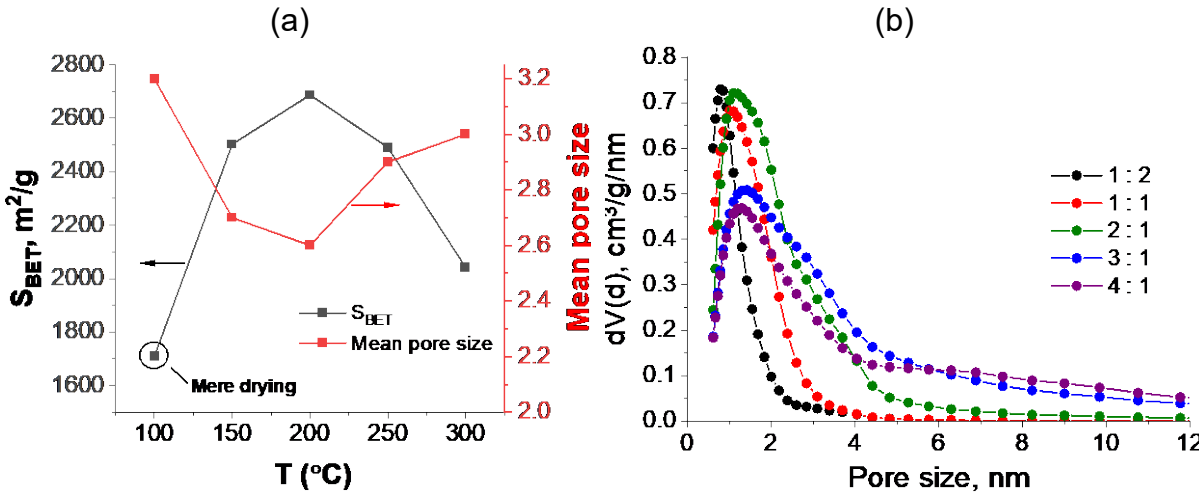


Figure. (a) Dependence of S_{BET} and mean pore size of AC series obtained at different temperatures of the pretreatment of H_3PO_4 + PNS blends (ratio of H_3PO_4 to PNS = 2 : 1); (b) pore size distributions of AC samples obtained using different ratio of H_3PO_4 : PNS (pretreatment at 200 °C). Activation conditions: T = 500 °C, 1 h, Ar flow

Taking account the high yield (~ 30 – 40 wt. %), these ACs are promising materials for supercapacitors based on non-aqueous electrolytes.

Table. Capacitive characteristics of PNS derived ACs and coin-cells based on them

H_3PO_4 : PNS	S_{BET}, m^2/g	$<d_{pore}>$, nm	Gravimetric capacitance, $F \cdot g^{-1}$			C_{2000}/C_1
			0.2 A/g*	10 A/g*	0.2 A/g**	
1 : 2	1616	1.9	94	75	16	0.91
1 : 1	2193	2.1	101	85	19	0.84
2 : 1	2687	2.6	102	89	24	0.86
3 : 1	2281	4.0	118	104	26	0.83
4 : 1	2006	4.7	125	107	28	0.77

* – values obtained at three-electrode cell, ** – values obtained in coin cell CR2032 with an operating voltage of 2.7 V

References

[1] P.M. Yeletsky, M. V. Lebedeva, V.A. Yakovlev // J. Energy Storage. 50 (2022) 104225.

[2] J. Alcañiz-Monge, M. del C. Román-Martínez, M.Á. Lillo-Ródenas // Molecules. 27 (2022) 1630.

Acknowledgments

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within governmental order for the Novosibirsk State University (project № FSUS-2025-0014) and Boreskov Institute of Catalysis SB RAS (project FWUR-2024-0038).

УД-III-16

ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ БИОУГЛЯ ИЗ КОЖУРЫ КАРТОФЕЛЯ МЕТОДОМ ТОРРЕФИКАЦИИ В КИПЯЩЕМ СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА В СРЕДЕ ПЕРЕГРЕТОГО ВОДЯНОГО ПАРА

Исьёмин Р.Л.[1], Кузьмин С.Н.[1], Михалев А.В.[1], Климов Д.В.[1], Муратова Н.С.[1], Милованов О.Ю.[1], Пицуха Е.А.[2], Теплицкий Ю.А.[2]

[1]ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет», Тамбов, Россия, E-mail penergy@list.ru, risemin@gmail.com
[2]Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
tep@hmti.ac.by

Картофель – четвертая по значению сельскохозяйственная культура, выращиваемая для производства продуктов питания [1]. Кожура картофеля образуется в количестве 15 – 40 % от массы сырого картофеля [2] и ее можно рассматривать как сырье для производства биотоплива методом низкотемпературного пиролиза (торрефикации). Целью работы является исследование кинетики процесса торрефикации кожуры картофеля в кипящем слое катализатора (оливинового песка) в среде перегретого водяного пара. Образцы кожуры были получены на ООО «ВИ ФРАЙ» (г. Липецк), крупнейшего в России производителя жареного картофеля, и после высушивания имели следующие характеристики: влажность – 4 %, зольность – 11 %, содержание летучих веществ – 9,8 %, содержание фиксированного углерода – 67,2 %, содержание углерода (на сухую беззольную массу) – 78,8 %, содержание водорода – 7,0 %, содержание азота – 3 %, содержание кислорода – 11,07 %, содержание серы – 0,13 %, низшая теплота сгорания – 24,6 Мдж/кг. Процесс торрефикации осуществлялся в электрообогреваемом реакторе, заполненный смесью частиц, содержащей 60 % (по массе) кожуры картофеля и 40 % катализатора оливинового песка (средний размер частиц 0,35 мм) [2], т.к. только для такого состава слоя наблюдалось устойчивое совместное псевдоожижение кожуры и оливинового песка. В результате дифференциальной сканирующей калориметрии кожуры было получено, что в присутствии оливинового песка термохимическое разложение кожуры завершается при температуре на 80 °C меньше, чем без катализатора. При горении торрефицированной кожуры тепловой эффект достигает 30 Вт/г, тогда как для исходной кожуры тепловой эффект не превышает 10 Вт/г. Общее количество тепла, которое может быть получено при горении торрефицированной кожуры примерно на 60 % больше, чем при горении необработанной кожуры. Процесс торрефикации

осуществлялся при температуре 200, 250 и 300 °С и продолжительности 10, 20 и 30 мин. Потери массы образца кожуры при торрефикации составляли 17 – 63 % и увеличивались с ростом температуры процесса и продолжительности обработки. Были рассчитаны значения константы скорости торрефикации и энергии активации при торрефикации кожуры картофеля в кипящем слое оливинового песка. Константа скорости торрефикации составила 0,011 – 0,0768 1/с; она увеличивалась с ростом температуры торрефикации и уменьшалась с увеличением ее продолжительности. Значения энергии активации кожуры картофеля составили 16,8 – 23,9 МДж/кг; энергия активация увеличивалась с ростом температуры и продолжительности процесса. Торрефикация кожуры не требует значительной энергии для инициирования процесса по сравнению с торрефикацией лигноцеллюлозного материала, для которого энергия активации может составлять до 190 кДж/кг [4]. В результате торрефикации низшая теплота сгорания кожуры картофеля увеличивалась на 12,2 – 61,7 % и достигала 39,8 МДж/кг. Таким образом, торрефикация кожуры картофеля в среде перегретого водяного пара в кипящем слое в смеси с катализатором (оливиновым песком) позволяет получить из этого отхода высококалорийное экологически чистое биотопливо. Для повышения энергоэффективности процесса торрефикации можно использовать отработанный пар, который применяется для удаления кожуры на линии для производства жареного картофеля.

Список литературы

[1] Khanal S., Karimi K., Majumdar S., Vinod Kumar V., Verma R., Bhatia S. K., Kuca K., Esteban J., Kumar D. Sustainable utilization and valorization of potato waste: state of the art, challenges, and perspectives, Biomass Conversion and Biorefinery.

[2] Климов Д.В., Кузьмин С.Н., Исьемин Р.Л., Муратова Н.С. Моделирование термохимических процессов в частице биомассы, погруженной в низкотемпературный кипящий слой катализатора. Вестник Тамбовского государственного технического университета, 2018, том. 24, № 2, с. 287-294.

[3] Ngobese N.Z., Workneh T.S. Development of the Frozen French Fry Industry in South Africa, Am. J. Potato Res. (2017) 94:1–13.

[4] Sarvaramini, A.; Assima, G.P.; Larachi, F. Dry torrefaction of biomass—Torrefied products and torrefaction kinetics using the distributed activation energy model. Chem. Eng. J. 2013, 229, 498–50.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержи Министерства науки и высшего образования РФ (Соглашение № 075-15-2024-660 от «3» сентября 2024 г., наименование проекта «Утилизация отходов производства жареногокартофеля путем сочетания различных технологий для эффективного использования получаемой биоэнергии, отработанной воды и биоудобрений». Головной исполнитель ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет»).

УД-III-17

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ [NiFeCuCo]M (M = W, Mo) ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР

Шивцов Д.М.[1], **Сайгареев Р.А.**[1,2], **Афонникова С.Д.**[1], **Бауман Ю.И.**[1], **Шубин Ю.В.**[2,3], **Мишаков И.В.**[1,2]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия
[3]Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия, danil@catalysis.ru

Углеродные нановолокна (УНВ) – нити нанометрового размера (диаметром до 100 нм), состоящие из уложенных друг на друга графеновых слоёв. Благодаря своим уникальным свойствам (высокие значения удельной поверхности и объёма пор, электрической и термической проводимости) УНВ широко используются в различных областях науки и техники (от носителей для катализаторов до упрочняющих добавок) [1].

Перспективным методом получения углеродных нановолокон является каталитический пиролиз. В данном процессе применяют катализаторы, содержащие металлы подгруппы железа (Ni, Fe и Co). В данном процессе высокой стабильностью и продолжительностью работы обладают сплавы на основе Ni, которые в своём составе имеют промотирующий металл (Cu, Pd и т.д.), [2].

В последние десятилетия активно исследуется новый класс материалов – высокоэнтропийные сплавы. Это системы, которые в своём составе содержат от пяти и более металлов с атомной долей в диапазоне 5 – 35 %. Основным преимуществом высокоэнтропийных сплавов, по сравнению с обычными биметаллическими и триметаллическими системами, является содержание большого количества компонентов. Такие сплавы характеризуются высокой каталитической активностью и достаточно хорошей стабильностью. Данные параметры можно контролировать, регулируя концентрацию каждого компонента в сплаве [3].

Для получения высокоэнтропийных сплавов активно применяют метод механохимического сплавления (МХС), к преимуществам которого относится простота реализации и экологичность. К тому же данный метод позволяет получать сплавы с однородной структурой. В настоящее время незначительное

количество работ посвящено исследованию подобных систем в процессе каталитического пиролиза углеводородов с получением углеродных нановолокон.

Таким образом, целью данной работы является синтез многокомпонентных сплавов [NiFeCuCo]M (M = W, Mo) методом МХС при различных условиях и исследование их активности в процессе каталитического пиролиза углеводородов с получением УНВ. По предварительным данным было установлено, что при ускорении 80 g не происходит полного взаимодействия всех компонентов (рисунок 1).

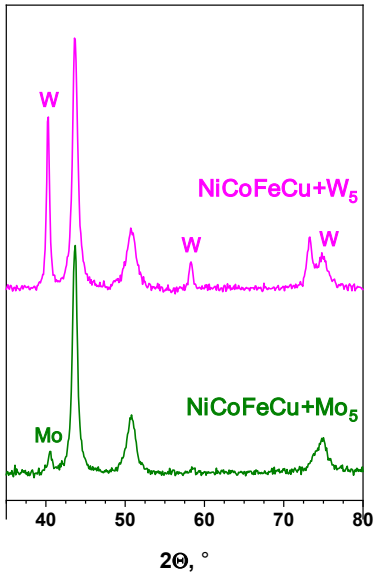


Рисунок 1. Дифрактограммы [NiFeCuCo]M (M = W, Mo) сплавов, полученных методом МХС, при сплавлении в течение 20 минут и ускорении 80 g

В докладе будут представлены результаты по синтезу многокомпонентных сплавов при ускорении до 160g. Также будут подробно рассмотрены физико-химические характеристики синтезированных образцов и их активность в процессе пиролиза С2-С4 смеси с получением углеродных нановолокон.

Список литературы

[1] Ruiz-Cornejo J.C., Sebastián D., Lázaro M.J. Synthesis and applications of carbon nanofibers: a review // Reviews in Chemical Engineering. – 2020. – V. 36. – N 4. – P. 493-511.

[2] Chesnokov V.V., Chichkan A.S. Production of hydrogen by methane catalytic decomposition over Ni–Cu–Fe/Al_2O_3 catalyst // international journal of hydrogen energy. – 2009. – V. 34. – N 7. – P. 2979-2985.

[3] Yao Y. et al. High-entropy nanoparticles: Synthesis-structure-property relationships and data-driven discovery // Science. – 2022. – V. 376. – N 6589. – P. 1-12.

Благодарность

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 22-13-00406-П, https://rscf.ru/project/22-13-00406/

УД-III-18

СИНТЕЗ КАТАЛИЗАТОРОВ РАЗЛОЖЕНИЯ МЕТАНА МЕТОДОМ ГОРЕНИЯ РАСТВОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЛИЦИНА В КАЧЕСТВЕ ТОПЛИВА

Баннов А.Г., Курмашов П.Б.

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия, bannov_a@mail.ru

Переработка углеводородов ряда C_1-C_4 с получением CO_x-нейтрального водорода представляет значительный интерес с фундаментальной и прикладной точек зрения. Большинство исследователей рассматривают каталитическое разложение метана как перспективный процесс получения водорода и углеродных наноматериалов.

$$CH_4 \rightarrow C + 2H_2,\ \Delta H^0 = 75{,}6\ кДж/моль$$

Важным этапом в разработке подобных процессов для промышленности является оптимизация синтеза катализатора. В данной работе рассматривается перспективная методика синтеза катализатора Ni/Al_2O_3 методом горения растворов (solution combustion synthesis, SCS) с использованием глицина в качестве топлива.

Метод заключался в смешении водных нитратов никеля и алюминия с топливом с последующим инициированием горения в муфельной печи. Основной задачей работы являлась оптимизация синтеза при инициировании горения смеси в муфельной печи с использованием регрессионного анализа. Полученные катализаторы исследовали с использованием рентгенофазового анализа, просвечивающей электронной микроскопии, растровой электронной микроскопии, низкотемпературной адсорбции азота и др. Способ синтеза показал свою эффективность в получении катализаторов для синтеза водорода и углеродных нановолокон. Регрессионный анализа показал доминирующую роль коэффициента φ в формировании выходов продуктов разложения метана. Наиболее подходящими параметрами синтеза катализатора является температура 550 °C, скорость нагрева 1°C/мин, время выдержки 40 мин.

Полученные углеродные нановолокна диаметром 10-80 нм продемонстрировали хорошие показатели чувствительности при изготовлении газовых датчиков для определения NO_2 при комнатной температуре.

Благодарность

Работы была выполнена в рамках Госзадания Минобрнауки РФ (проект FSUN-2023-0008).

УД-III-19

CVD СИНТЕЗ ГРАФЕНА И СОЗДАНИЕ КОМПОЗИТНЫХ СТРУКТУР НА ЕГО ОСНОВЕ

Смовж Д.В.[1], **Сорокин Д.В.**[1,2], **Гареев Т.И.**[1,2], **Богомолова А.И.**[1,2], **Зайцев О.В.**[1,2], **Нуриахметов З.Н.**[1,2]

[1]Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия, director@itp.nsc.ru
[2]Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия, smovzh@itp.nsc.ru

Современные масштабируемые подходы к получению графена можно разделить на расщепление графитовых материалов механическими или растворными методами и синтез из газовой фазы на каталитических поверхностях. В первом случае продуктом является малослойный графит (пачки из графеновых слоев) состоящий из 1-10 или более графеновых слоев с характерным размером в плоскости 002 от единиц до десятков микрон. Данные материалы, как правило, используются в качестве наполнителей для создания композитов. Графен, полученный газофазным осаждением из летучего предшественника, представляет собой поликристаллическую пленку толщиной от одного до нескольких (не более 10) графеновых слоев. Размер подобных пленок ограничен размером каталитической подложки, в литературе апробированы режимы синтеза графеновых покрытий с масштабом порядка 1м. К основным задачам развития газофазных методов относятся: увеличение размера графеновых монокристаллов в пленке; контроль дефектности структуры и количества слоев графена. Подобные графеновые пленки перспективны в качестве модифицирующих и защитных покрытий. Малая толщина графеновой пленки не позволяет существенно изменить электростатический потенциал и оптические свойства поверхности, но является непреодолимым барьером для молекул и атомов газов. Большая доля поверхностных атомов позволяет реализовывать на подобных пленках эффективные сенсорные системы.

Настоящий доклад посвящен работам проводимым в ИТ СО РАН, направленным на развитие технологий CVD синтеза графена на медной подложке и разработку барьерных графеновых покрытий для модификации смачивания различных поверхностей [1], защиты от коррозии металлов в воздушной атмосфере и в растворах солей [2,3], защиты от водородного охрупчивания [4]. Представлены результаты исследований влияния графеновых

покрытий на конвективный и лучистый теплообмен [5], сенсорных свойств графеновых пленок и способы модификации графена с использованием магнетронной распылительной системы [6,7]. На основе проведенных экспериментальных и теоретических исследований предложены способы масштабируемого производства функциональных устройств на основе графена и его производных.

Список литературы

[1] Misyura, S.Y., Andryushchenko, V.A., Smovzh, D.V., & Morozov, V.S. (2022). Experimental data and modeling of wettability on graphene-coated copper. Materials Science and Engineering: B, 277, 115588.

[2] Nuriakhmetov, Z., Chernousov, Y., Sakhapov, S., & Smovzh, D. (2023). Graphene passivation effect on copper cavity resonator preserves Q-factor. Nanotechnology, 34(20), 205704.

[3] Misyura, S.Y., Morozov, V.S., Andryushchenko, V.A., Smovzh, D.V., Orlova, E.G., Feoktistov, D.V., ... & Makotchenko, V.G. (2024). Evaporation of Water Droplets and Corrosion on Various Graphene Coatings. Journal of Engineering Thermophysics, 33(2), 289-302.

[4] Kudiiarov, V.N., Anzhigatova, E.D., Kurdyumov, N.E., Kashkarov, E.B., Smovzh, D.V., Sorokin, D.V., & Skirda, M.S. (2024). Graphene protective coatings for hydrogen resistance improving of E110 zirconium alloy. Physica B: Condensed Matter, 694, 416391.

[5] Boyko, E.V., Smovzh, D.V., Sorokin, D.V., Pilnik, A.A., & Maxim, N.K. (2025). Thermoacoustics of CVD graphene. Applied Acoustics, 240, 110920.

[6] Bogomolova, A.I., Gareev, T.I., Nerushev, O.A., Sorokin, D.V., Bannov, A.G., & Smovzh, D.V. (2025). Composite gas sensors based on carbon and tin oxide nanoparticles. Russian Physics Journal, 1-12.

[7] Sorokin, D., Gareev, T., Zaitsev, O., & Smovzh, D. (2024). Photoconductivity of graphene with titanium nanoparticles. In E3S Web of Conferences (Vol. 592, p. 02014). EDP Sciences.

Благодарность

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-15-2025-572.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ IV.
НОВЫЕ РЕАКТОРЫ И ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЙ В ТОПЛИВНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СФЕРЕ

УД-IV-1

ПРИРОДНЫЙ ГАЗ КАК ИСТОЧНИК ЛЕГКИХ АЛКЕНОВ: РОЛЬ ТЕХНОЛОГИЙ МЕТАТЕЗИСА

Карпова Т.Р., Лавренов А.В., Моисеенко М.А.

Центр новых химических технологий ИК СО РАН,
Институт катализа СО РАН, Омск, Россия, ktr@ihcp.ru

Химическая переработка природного газа уже сегодня составляет основу развития многих отраслей промышленности. В том числе все большую актуальность приобретают процессы получения из природного газа лёгких алкенов C_2-C_4, объем производства которых ежегодно увеличивается в связи с ростом потребления пластических масс.

Современная газохимия как и 100 лет назад основана на превращении метана в синтез-газ. Получение алкенов из синтез-газа может быть реализовано посредством традиционных технологий процесса Фишера-Тропша (процессы GTL «Gas to Liquid») или с использованием предварительного синтеза метанола (процессы MTO «Methanol to Olefins» и MTP «Methanol to Propelene»). К числу целевых способов получения этилена из природного газа относится процесс окислительной димеризации метана.

Реакции метатезиса непредельных углеводородов применяются в химической промышленности как для получения уникальных по строению и свойствам соединений, например, фармацевтических препаратов, так и гибкого управления производством алкенов C_2-C_5, учитывающего рыночную конъюнктуру. Реакции метатезиса уникальны с точки зрения открывающихся благодаря им возможностей взаимных превращений алкенов. Прежде всего, это касается этилена и пропилена, в меньшей степени бутенов и пентенов. Процесс метатезиса алкенов на гетерогенных катализаторах был разработан компанией Philips Petroleum Co. и использовался в 1966-1972 гг. для переработки пропилена в этилен и бутены-2. В современном варианте данный процесс представлен в виде технологии OCT (Olefin Conversion Technology) и осуществляется в обратном направлении, т.е. ориентирован на получение пропилена. Применение этой технологии в сочетании с процессом димеризации этилена позволяет получать пропилен только из этилена. Превращение этилена в пропилен происходит в результате последовательного протекания реакций димеризации

этилена, изомеризации образующегося бутена-1 в бутены-2 и метатезиса бутенов-2 с этиленом.

В данной работе в качестве полифункциональных катализаторов превращения этилена в пропилен впервые рассмотрены Ni, Mo-содержащие системы на основе алюмооксидного носителя, подвергнутого катионному или анионному модифицированию. Показано, что анионное модифицирование (B_2O_3-Al_2O_3, SO_4^{2-}-Al_2O_3) способствует росту активности катализаторов и это обусловлено формированием октаэдрически координированных катионов Ni^{2+}, связанных с кислотными центрами поверхности носителя. Катионное модифицирование (Na_2O-Al_2O_3, MgO-Al_2O_3, ZrO_2-Al_2O_3), наоборот, подавляет развитие реакций превращения этилена. Максимальный и коммерчески приемлемый выход пропилена на уровне 51-52 мас. % обеспечивается катализаторами на основе боратсодержащего носителя и немодифицированного оксида алюминия. Последние отличаются наличием на своей поверхности высокодисперсных частиц полимолибдатных соединений и Бренстедовских кислотных центров средней силы.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0039).

УД-IV-2

НЕКАТАЛИТИЧЕСКАЯ КОНВЕРСИЯ ЛЕГКИХ АЛКАНОВ

Арутюнов В.С.[1,2], **Савченко В.И.**[2], **Седов И.В.**[2], **Никитин А.В.**[1,2], **Озерский А.В.**[1,2]

[1]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия
[2]Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка, Московская обл., Россия
V_arutyunov@mail.ru

Легкие алканы, входящие в состав природных, попутных, нефтезаводских газов и являющиеся ресурсной базой газохимии, как правило, имеют более низкую свободную энергию, чем целевые продукты их химической конверсии. Поэтому газохимические процессы требуют для своей реализации высоких температур, и даже в присутствии катализаторов роль газофазных процессов может быть значительной, а в ряде случаев и преобладающей. Перспективы реализации полностью газофазных газохимических процессов, особенно связанных с конверсией метана, делают актуальной задачей исследование кинетики газофазных процессов термической и окислительной конверсии легких алканов.

Кинетический анализ некаталитических процессов конверсии легких углеводородов C_1–C_4, их термического пиролиза, парциального окисления, паровой и углекислотной конверсии, проведен на базе наиболее детального кинетического механизма окисления легких углеводородов NUI Galway (2010), а его результаты качественно подтверждены экспериментами по матричной конверсии углеводородных газов. Установлено, что при температурах 1400–1800 К в изотермических условиях все процессы некаталитической конверсии C_2+ углеводородов начинаются со стадии их термического пиролиза, которая в присутствии различных газов (Ar, N_2, O_2, H_2O, CO_2) протекает примерно одинаково. Это следствие того, что при пиролизе углеводородов C_2+ отрыв $H^{\bullet}$ и последующая конверсия $C_nH_{2n+1}^{\bullet}$ протекают с более высокой скоростью, чем их реакции с другими компонентами реакционной смеси, в т.ч. с кислородсодержащими соединениями O_2, H_2O, CO_2.

Образующийся в цепи быстрых реакций $C_nH_{2n+1}^{\bullet} \rightarrow C_nH_{2n} \rightarrow C_2H_4$ на начальной стадии конверсии углеводородов C_2+ (стадии пиролиза) этилен является основным соединением, взаимодействующим с O_2 на следующей стадии – стадии окисления, приводя при недостатке кислорода к образованию, в

основном, CO и H_2O. Поэтому скорость расхода O_2 при парциальном некаталитическом окислении всех легких углеводородов C_2+ примерно одинакова. Частично C_2H_4 расходуется также по реакции $C_2H_4 \rightarrow C_2H_3^{\bullet} \rightarrow C_2H_2$, превращаясь в наиболее стабильный в этих условиях углеводород – ацетилен.

В отличие от углеводородов C_2+, конверсия метана в присутствии O_2 протекает существенно быстрее, чем в его отсутствие, так как реакция CH_4 (+M) <=> $CH_3^{\bullet}$ + $H^{\bullet}$ (+M) более медленная, чем реакции CH_4 с радикалами $O^{\bullet}$ и $OH^{\bullet}$. Присутствие H_2O и CO_2 при T < 1800 К незначительно влияет на скорость конверсии CH_4, так как в этих условиях его окислительная конверсия значительно быстрее. При парциальном окислении метана этилен также является основным соединением, взаимодействующим с O_2, но образуется он в результате более медленных стадий пиролиза CH_4: $CH_4 \rightarrow CH_3^{\bullet} \rightarrow C_2H_6 \rightarrow C_2H_5^{\bullet} \rightarrow C_2H_4 \rightarrow C_2H_3^{\bullet} \rightarrow C_2H_2$. Поэтому окисление метана протекает существенно медленнее, чем углеводородов C_2+.

После полной конверсии кислорода газовая смесь с T = 1400–1800 К содержит в своем составе H_2, CO, H_2O, CO_2, примеси C_2H_2 и непрореагировавшего CH_4 в далеком от равновесия соотношении. Значительно более медленные процессы конверсии C_2H_2 и CH_4, в которых основными окисляющими агентами являются H_2O и CO_2, приводят к установлению термодинамического равновесия между компонентами реакции водяного газа: H_2, CO, H_2O, CO_2. Далее система медленно приближается к термодинамическому равновесию. В адиабатических условиях или при заданном температурном профиле данная последовательность стадий сохраняется.

В случае адиабатического процесса на начальном этапе установления термодинамического равновесия между компонентами реакции водяного газа для смесей углеводородов C_2+ с высокой концентрацией H_2O из-за экзотермической реакции $CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$, протекающей с более высокой скоростью, чем эндотермические процессы конверсии C_2H_2 и CH_4, отмечается участок повышения температуры газовой смеси вне зоны пламени. При парциальном окислении метана такое повышение температуры не наблюдается.

Список литературы

[1] Savchenko V.I., Nikitin A.V., Zimin Ya.S., Ozerskii A.V., Sedov I.V., Arutyunov V.S. Chem. Eng. Res. Des. 2021. 175. 250–258. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2021.09.009.

[2] Савченко В.И., Озерский А.В., Никитин А.В., Седов И.В., Арутюнов В.С. ЖПХ. 2024. Т. 97. №. 6. С. 470–484. https://doi.org/10.31857/S0044461824060057.

[3] Савченко В.И., Озерский А.В., Никитин А.В., Седов И.В., Арутюнов В.С. Petroleum Chemistry. 2025. В печати.

УД-IV-3

ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИИ БИЦИКЛАР

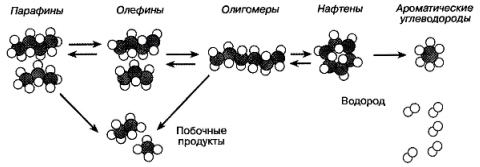
Ечевский Г.В.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,
bic@catalysis.ru, egv@academ.org

Компания BP, осознав проблему транспортировки сжиженных газов в 1975 году, начала исследования по их трансформации в более дорогостоящие жидкие продукты, пригодные для транспортировки менее затратными способами. Результатом этих усилий стала разработка катализатора, который способен за один проход конвертировать сжиженный газ во фракцию БТК (бензол, толуол, ксилол) нефтехимического качества.

Достаточно быстро в BP пришли к осознанию частой регенерации катализатора и направили запрос к UOP по применению ее хорошо зарекомендовавшей себя технологии CCR с непрерывной регенерацией катализатора. UOP разработала для BP рецептуру катализатора, который мог быть применён в технологии CCR, а также использовала реактор с радиальным потоком многоуровневой конструкции, изначально предназначенный для процесса UOP Platforming. Результатом этого технического сотрудничества стал процесс Cyclar компаний BP и UOP.

Промежуточные продукты реакции трансформируются в метан и этан в результате побочной реакции гидрокрекинга, приводя к уменьшению отбора целевого продукта, при рабочих параметрах процесса Cyclar метан и этан не превращаются. На каждый моль ароматических соединений, получаемых из пропана и бутана, приходится пять молей вырабатываемого водорода. Присутствие водорода в реакционной смеси снижает выход ароматических углеводородов. К такому же эффекту приводит увеличение давления процесса. Т.е. все происходит в соответствии с механизмом и кинетическим уравнением процесса.



Реакционный механизм процесса Cyclar

При эксплуатации при пониженном давлении суммарный выход ароматики составляет:

- при пропановом сырье – 62 % масс.;
- при бутановом сырье – 66 % масс.

УД-IV-3

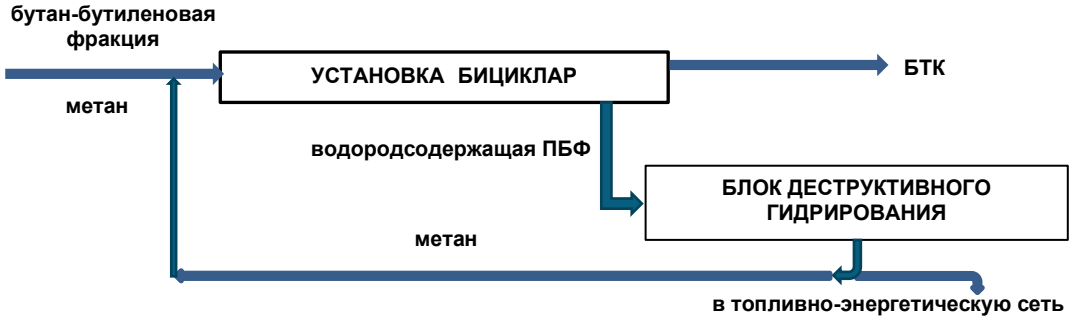
Разработанная в Институте катализа технология Бициклар (совместная конверсия углеводородов C_3-C_4 с метаном) позволяет:

– использовать неподвижный слой специально разработанного цеолитного катализатора за счет замедления скорости его закоксования

– увеличить выход ароматических углеводородов до 90 % мас. в расчете на жирные компоненты сырья (до двух раз по сравнению с процессом ЦИКЛАР) за счет подавления реакции метанирования, а также введения дополнительного блока деструктивного гидрирования отходящих газов процесса Бициклар, позволяющего превратить в метан не превращенные жирные газы и снизить количество остаточного водорода в рециркулирующем газе до 0,25 %

– значительно упростить процесс регенерации катализатора за счет образования кокса практически одинаковой структуры по всему слою и объему катализатора

– значительно снизить капитальные и эксплуатационные затраты на процесс



В настоящее время в Салавате ведется строительство промышленной установки переработки в ароматические углеводороды бутан-бутиленовой фракции, отходящей с установки крекинга FCC ООО «Газпром нефтехим Салават» по технологии БИЦИКЛАР с использованием дополнительного блока каталитического деструктивного гидрирования:

Мощность установки БИЦИКЛАР 130 тыс. тонн в год по ББФ.

Катализатор процесса БИЦИКЛАР - GP-CAT IK-17M.

Катализатор деструктивного гидрирования - НИАП-07-05.

Благодарность

Значительная часть работы выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0035).

УД-IV-4

ОПЫТ РАЗРАБОТКИ И ПРИМЕНЕНИЯ СТРОГИХ ИНЖЕНЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ В ТЕХНОЛОГИЯХ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ И НЕФТЕХИМИИ

Ивашкина Е.Н., Долганова И.О., Долганов И.М., Чузлов В.А., Назарова Г.Ю., Боев А.С.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия, ivashkinaen@tpu.ru

Отрасли нефтегазопереработки и нефтегазохимии сегодня активно внедряют и используют различные цифровые инструменты для повышения эффективности как действующих, так и вновь создаваемых производств. Так, в последние годы в этой сфере появились системы цифровых двойников установок, real-time optimization (RTO) – инструменты, гибридные модели для предиктивного анализа работы промышленных объектов. Широко распространено использование строгих инженерных моделей процессов нефтепереработки для получения исходных данных для календарного планирования производства. Вместе с тем, реализация программ цифровой трансформации компаний сдерживается высоким уровнем зависимости от программного обеспечения западных вендоров. В то же время, санкционные ограничения стимулировали российских разработчиков к созданию аналогов зарубежных моделирующих систем, пригодных для использования в отрасли.

Имеющийся в Томском политехническом университете многолетний опыт разработки математических моделей процессов нефтепереработки и нефтехимии позволил реализовать проект по созданию программного комплекса PROGRESS [1]. В основе комплекса лежат накопленная база знаний и экспертиза в области моделирования работы промышленных реакторов, а также опыт решения практических задач по повышению эффективности их работы.

Так, среди достижений в области моделирования технологии риформинга бензинов нельзя не отметить разработки учёных в рамках научной школы профессоров А.В. Кравцова и Э.Д. Иванчиной [2]. Математическая модель процесса риформинга стала инструментом для выполнения значительного объема численных исследований, результатом которых стали в том числе рекомендации по реконструкции установок риформинга, в частности, по изменению конструкции внутренних устройств реакторов с радиальным вводом сырья в неподвижный зернистый слой катализатора. На основании выполненных экспериментальных и численных исследований существующая математическая модель была актуализирована. Усовершенствованная модель учитывает 200 реакций с участием 51 компонента. Для описания кинетической модели применен матричный метод, позволяющий сделать новую схему гибкой к меняющемуся составу сырья. Актуализированная модель реализована в интерпретируемой среде программирования Python, и её адекватность подтверждена расчетами [3].

В ТПУ разрабатываются и внедряются новые математические модели сложных процессов: каталитического крекинга, гидрокрекинга, гидроочистки

тяжелых нефтяных фракций, комплекса процессов в цепочке получения поверхностно-активных веществ и др. Уникальность моделей заключается в том, что они учитывают сложные физико-химические закономерности реакторных процессов.

Разработана математическая модель сопряженной системы – каталитического процесса в лифт-реакторе и окислительной регенерации [4], ее применение позволило прогнозировать работу полного цикла движения катализатора в системе «лифт–реактор–регенератор». Алгоритм расчета гидродинамики аппарата, учитывающий изменение основных параметров режима работы регенератора и циркулирующего катализатора крекинга, позволил оценить их влияние на характеристики кипящего слоя и показатели процесса. Разработана научная концепция совершенствования жидкофазных процессов получения алкилбензосульфокислот в промышленных реакторах в условиях дезактивации реакционных сред [5] и сформулированы рекомендации по реконструкции реактора сульфирования алкилбензолов путем увеличения диаметра реакционных трубок с 25 до 43 мм и уменьшения их количества со 120 до 40 при постоянном объеме реакционного пространства для увеличения продолжительности межпромывочного цикла работы реактора сульфирования на 45,5 %. Разработанные модели в перспективе станут модулями программного комплекса PROGRESS для проектирования, моделирования и оптимизации процессов переработки углеводородного сырья в полезные химические продукты.

Список литературы

[1] Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024684444 «Программный комплекс для научно-инженерного моделирования процессов переработки нефти и газа PROGRESS».

[2] Иванчина Э.Д. Совершенствование промышленной технологии переработки углеводородного сырья с использованием платиновых катализаторов на основе нестационарной модели: специальность 05.17.08 "Процессы и аппараты химических технологий»: диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук / Иванчина Эмилия Дмитриевна. – Томск, 2002. – 299 с.

[3] Совершенствование математической модели процесса каталитического риформинга со стационарным слоем катализатора / И.В. Пчелинцева, Е.Н. Ивашкина, Е.С. Чернякова и др. // Катализ в промышленности. – 2024. – Т. 24.– № 4. – С. 78-93.

[4] Назарова Г.Ю., Ивашкина Е.Н., Антонов А.В., Самсонов И.А. Разработка двухфазной пузырьковой математической модели процесса окислительной регенерации катализатора крекинга //Теоретические основы химической технологии. – 2024.– Т. 58.– № 4.– С. 458–471.

[5] Долганова И.О. Совершенствование жидкофазных процессов синтеза алкилбензосульфокислот в условиях дезактивации реакционных сред в промышленных реакторах: специальность 2.6.13 "Процессы и аппараты химических технологий»: диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук / Долганова Ирэна Олеговна. – Томск, 2025. – 304 с.

Благодарность

Данное исследование поддержано программой развития ТПУ «Приоритет 2030».

УД-IV-5

КИНЕТИКА ИЗОМЕРИЗАЦИИ ГЕПТАНА НА КАТАЛИЗАТОРЕ Pt/WO_3-ZrO_2

Шкуренок В.А., Яблокова С.С., Лавренов А.В.

Центр новых химических технологий ИК СО РАН,
Институт катализа СО РАН, Омск, Россия
shkurenok@ihcp.ru

Изомеризация гептансодержащих бензиновых фракций является перспективным процессом для получения дополнительных количеств высокооктанового экологически чистого компонента товарных автобензинов. Повышение эффективности изомеризации гептановых углеводородов и оптимизация её условий естественным образом связаны с поиском новых каталитических систем и с изучением кинетических закономерностей как отдельных стадий, так и всего процесса изомеризации в целом.

В рамках данной работы проведены экспериментальные исследования и построена кинетическая модель процесса изомеризации гептана на катализаторе Pt/WO_3-ZrO_2 с применением метода «single-event kinetic modeling approach». При моделировании был рассмотрен монофункциональный механизм изомеризации, согласно которому и описывались элементарные стадии процесса, протекающие на кислотных центрах Бренстеда и Льюиса.

Изомеризацию гептана проводили в присутствии водорода на проточной установке с цилиндрическим реактором с неподвижным слоем катализатора (2 $см^3$, фракция 0,2–0,7 мм). В качестве катализатора был использован образец Pt/WO_3-ZrO_2, содержащий 1 мас. % платины и 25 мас. % оксида вольфрама. Температура процесса варьировалась в интервале 160-240°C, давление составляло 1,5 МПа, мольное отношение водород/гептан равнялось 3. Объемную скорость подачи сырья варьировали от 0,5 до 6 $ч^{-1}$. Аналитический контроль процесса изомеризации осуществляли on line методом газовой хроматографии.

В результате показано, что для бифункциональных по своей природе катализаторов Pt/WO_3-ZrO_2 протекание процесса изомеризации может быть описано на основе монофункционального механизма, который предполагает активацию молекулы гептана и образование соответствующего карбениевого

иона как за счет отщепления гидрид-иона на кислотных центрах Льюиса, так и за счет протонирования молекулы гептана на кислотных центрах Бренстеда.

Наиболее быстрой стадией процесса изомеризации гептана является отрыв карбениевых ионов от БКЦ и ЛКЦ, что приводит к минимизации протекания побочных реакций крекинга. Лимитирующая стадия процесса связана с превращениями протонированных циклопропановых интермедиатов.

Предложенная кинетическая модель обладает прогнозирующей способностью и может быть использована для проектирования и оптимизации реакторных устройств для процессов изомеризации гептансодержащих бензиновых фракций.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0039).

УД-IV-6

ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ УГЛЕВОДОРОДОВ НА РОДИЙ-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Губайдуллин И.М.[1], **Урлуков А.С.**[2,3], **Усков С.И.**[2], **Потемкин Д.И.**[2], **Хашпер А.Л.**[1]

[1]Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[3]Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
irekmars@mail.ru

Сжигание попутного нефтяного газа (ПНГ) остается актуальной проблемой российской нефтедобывающей промышленности. ПНГ представляет собой смесь предельных углеводородов, добываемых на нефтяных месторождениях. Одним из наиболее перспективных способов эффективной утилизации ПНГ является использование его непосредственно на месторождении для выработки электроэнергии и тепла на малых электростанциях для обеспечения собственных нужд месторождения [1]. ПНГ имеет высокое содержание C_{2+}-углеводородов, которые нельзя использовать напрямую в качестве топлива из-за риска поломки двигателей. Для решения этой проблемы предлагается использовать низкотемпературную паровую конверсию (НТПК) C_{2+}-углеводородов, входящих в состав ПНГ, с преимущественным образованием метан-водородных смесей [2], которые уже можно использовать в качестве топлива.

В настоящей работе были исследованы свойства высокодисперсных Rh катализаторов, нанесенных на смешанные оксиды церия-циркония ($Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$, $Ce_{0.4}Zr_{0.5}Y_{0.05}La_{0.05}O_2$, $Ce_{0.5}Zr_{0.5}O_2$), в НТПК модельных смесей ПНГ, содержащих этан и пропан в избытке метана. Катализаторы проявляли высокую стабильность, активность и обеспечивали полную конверсию «жирных» углеводородов в CH_4, CO_2 и H_2 при T = 320-350 °C. Кроме того, конверсия пропана на Rh-катализаторах в диапазоне низких температур (200-300 °C) увеличивает концентрацию этана в реакционной смеси. Этан образуется в результате параллельной реакции гидрогенолиза пропана. Этан имеет более высокую теплоту сгорания, чем метан, и способен компенсировать негативное влияние разбавления углекислым газом и водородом на характеристики топливной смеси.

УД-IV-6

Для более детального понимания кинетики процесса НТПК углеводородов на Rh катализаторов и оптимизации условий его проведения было выполнено математическое моделирование.

Была построена математическая модель реакции НТПК этана в присутствии катализатора, представляющая собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ). Для решения полученной СОНДУ был реализован численный метод, учитывающий изменения порядка по водороду в ходе химической реакции [3]. Для получения кинетических параметров, минимизирующих сумму абсолютных отклонений расчётных концентраций от экспериментальных, был реализован метод Нелдера-Мида [4]. В результате решения обратной кинетической задачи были получены значения констант скоростей реакции, минимизирующие отклонения расчётных данных от экспериментальных для каждой температуры. В предположении, что реакция описывается уравнением Аррениуса [5], через полученные значения констант скоростей методом наименьших квадратов были вычислены предэкспоненциальный множитель k_0 и энергия активации E_a (Дж/моль) для каждой стадии реакции. Затем расчетные концентрации были пересчитаны через вычисленные k_0 и E_a.

Были отдельно рассмотрены реакции гидрогенолиза этана и метанирования диоксида углерода, которые протекают в процессе НТПК этана в присутствии катализатора $Rh/Ce_{0.4}Zr_{0.5}Y_{0.05}La_{0.05}O_2$.

Результаты моделирования демонстрируют удовлетворительное соответствие экспериментальным данным в рамках выбранной метрики.

Список литературы

[1] Uskov, S.I.; Potemkin, D.I.; Shigarov, A.B.; Snytnikov, P.V.; Kirillov, V.A.; Sobyanin, V.A. Chemical Engineering Journal. 368 (2019), 533-540.

[2] Zyryanova, M.M.; Snytnikov, P.V.; Shigarov, A.B.; Belyaev, V.D.; Kirillov, V.A.; Sobyanin, V.A. Fuel. 135 (2014), 76-82.

[3] Зенков А.В. Численные методы: учеб. пособие. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2016. 124 с.

[4] Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс. М.: Радио и связь, 1988. 128 с.

[5] Спивак С.И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В. Обратные задачи химической кинетики: Учебное пособие. – Уфа: РИО БашГУ, 2003. – 110 с.

Благодарность

Работа была выполнена при поддержки Государственного задания «Компьютерное моделирование химических и химико-технологических процессов: разработка и тестирование новых алгоритмов и программ (FMRS-2025-0031)».

УД-IV-7

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ОДНОСТАДИЙНОГО СИНТЕЗА ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ИЗ CO_2

Закиров К.Е., Старожицкая А.В., Магомедова М.В., Дементьева О.С.

Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия, director@ips.ac.ru, klimzak@ips.ac.ru

В последнее время активно развивается направление прямого получения жидких углеводородов по методу Фишера-Троша, в котором в качестве сырья используется смесь углекислого газа и водорода. При этом CO образуется непосредственно в реакторе по обратной реакции водяного газа ($CO_2+H_2 \Leftrightarrow CO+H_2O$). Разработанные к настоящему времени кинетические модели для реакции синтеза Фишера-Тропша из CO и водорода, не позволяют при использовании CO_2 в качестве сырья правильно описать распределение продуктов в соответствии с существующими представлениями о механизме реакции. [1, 2]

В настоящей работе разработано математическое описание одностадийного синтеза жидких углеводородов из CO_2 и H_2 для изотермических условий осуществления реакции в реакторе с неподвижным слоем катализатора на основе представлений об элементарных стадиях. Осуществлен поиск оптимальных значений параметров для достижения максимального выхода жидких углеводородов.

При разработке математического описания моделирования рассмотрено несколько новых механистических моделей, которые предполагают наличие одного активного центра, на котором осуществляются последовательные стадии обратной реакции водяного газа с образованием CO и рост углеводородной цепи в реакции гидрирования CO по модифицированному алкильному механизму. Для описания адсорбции реагентов принята модель Ленгмюра-Хишельвуда.

Значения констант скорости и адсорбции рассчитывались в ходе решения обратной задачи химической кинетики путем минимизации суммы квадратов абсолютных отклонений расчетных значений мольных потоков от экспериментальных значений с помощью генетического алгоритма и метода Левенберга-Марквардта, реализованных на языке программирования Python.

Предложенная модель с найденными кинетическими параметрами позволила описать массив данных с ошибкой менее 20 % отн. и распределение продуктов в соответствии с экспериментом (Рис. 1).

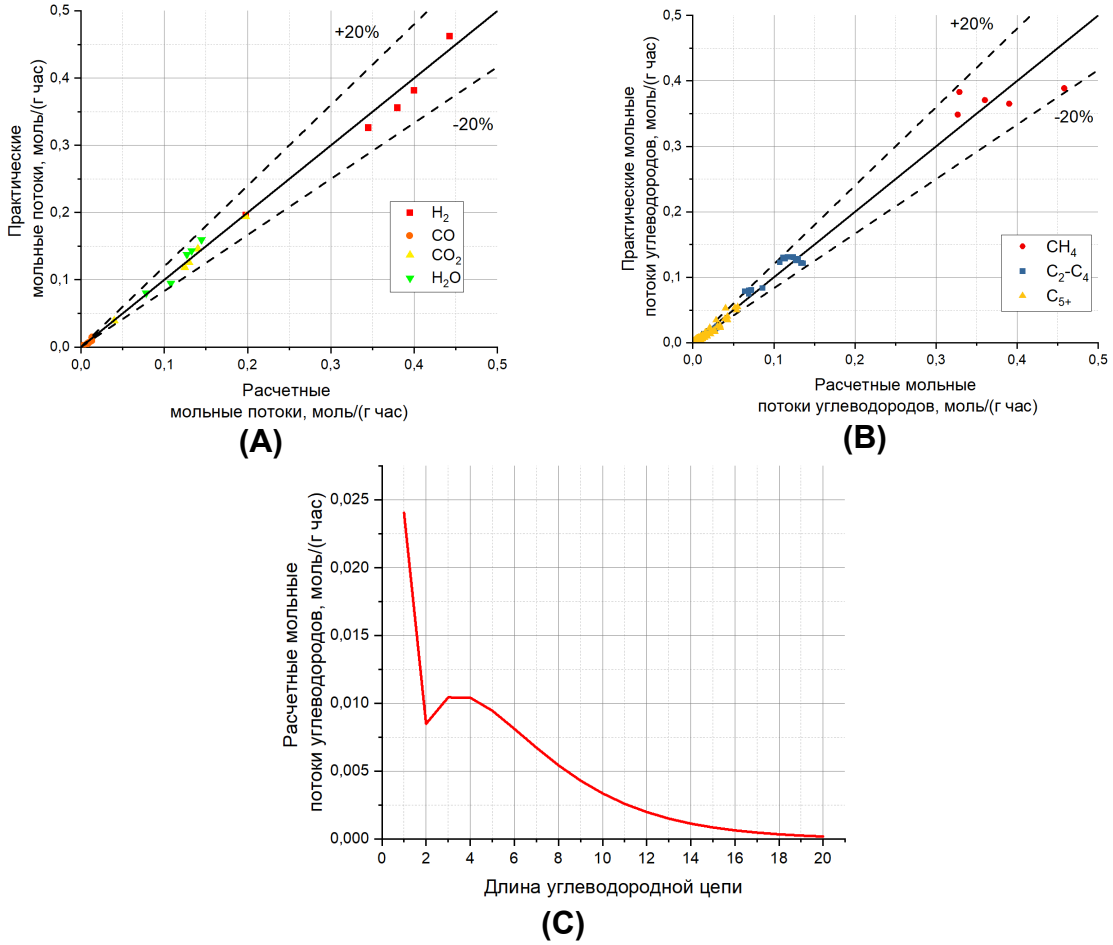


Рис. 1. Корреляция экспериментальных и расчетных значений **(A)** мольных потоков для H_2, CO, CO_2, H_2O; **(B)** мольных потоков углеводородов; **(C)** Зависимость мольных потоков углеводородов от длины цепи

Список литературы

[1] M. Ojeda, R. Nabar, A. U. Nilekar, A. Ishikawa, M. Mavrikakis, и E. Iglesia, «CO activation pathways and the mechanism of Fischer–Tropsch synthesis», *Journal of Catalysis*, т. 272, вып. 2, сс. 287–297, июн. 2010, doi: 10.1016/j.jcat.2010.04.012.

[2] R. A. Van Santen, A. J. Markvoort, I. A. W. Filot, M. M. Ghouri, и E. J. M. Hensen, «Mechanism and microkinetics of the Fischer–Tropsch reaction», *Phys. Chem. Chem. Phys.*, т. 15, вып. 40, с. 17038, 2013, doi: 10.1039/c3cp52506f.

УД-IV-8

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СЛОЖНЫХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ МНОГОМЕРНЫМИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯМИ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ СЛОЖНЫХ СОСТАВОВ

Глазов Н.А.[1,2]

[1]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,*
[2]*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*
glazov@catalysis.ru

Моделирование химических процессов в тяжёлых нефтяных фракциях осложнено их невероятно сложным составом, в связи с чем были разработаны разные стратегии представления составов по неполным данным. Несмотря на распространённость дискретных псевдокомпонентов, определённый интерес вызывают непрерывные псевдокомпоненты поскольку они позволяют описывать достаточно сложные процессы небольшим количеством параметров.

Используя простую модель гидрокрекинга на основе всего 3 непрерывных псевдокомпонентов [1], удалось получить более точное описание по наблюдаемым свойствам, чем с использованием кинетики единичных событий, требующей гораздо большего объёма вычислений.

Описание состава как в [1] является либо достаточно сложной экспериментальной задачей или полагается на использование дорогого оборудования, в связи с чем, определённый интерес вызывает использование методов молекулярной реконструкции [2], позволяющих органично включать любую экспериментальную информацию о исследуемом образце и представлять результат в качестве детального молекулярного состава.

В данной работе показано, как переход от дискретного реконструированного состава к непрерывным распределениям может осуществляться с использованием ядерных оценок плотности (т.е. на месте каждого из компонентов устанавливается гауссиана, или иная функция, называемая ядром, которые впоследствии суммируются, давая гладкое распределение, характеризующее весь состав). Концентрации в этом случае будут выступать весами, с которыми компоненты входят в сумму.

Важно заметить, что возможно использовать и многомерные функции в качестве ядер, как это продемонстрировано на рисунке 1 на примере образца вакуумного газойля, из-за чего результирующий непрерывный компонент будет

включать в себя больше сведений о изучаемом составе которые потенциально могут улучшить качество описания кинетики.

Стоит также отметить, что задача о нахождении ядерной оценки плотности сводима к свёртке, и как следствие может эффективно решаться с использованием быстрого преобразования Фурье.

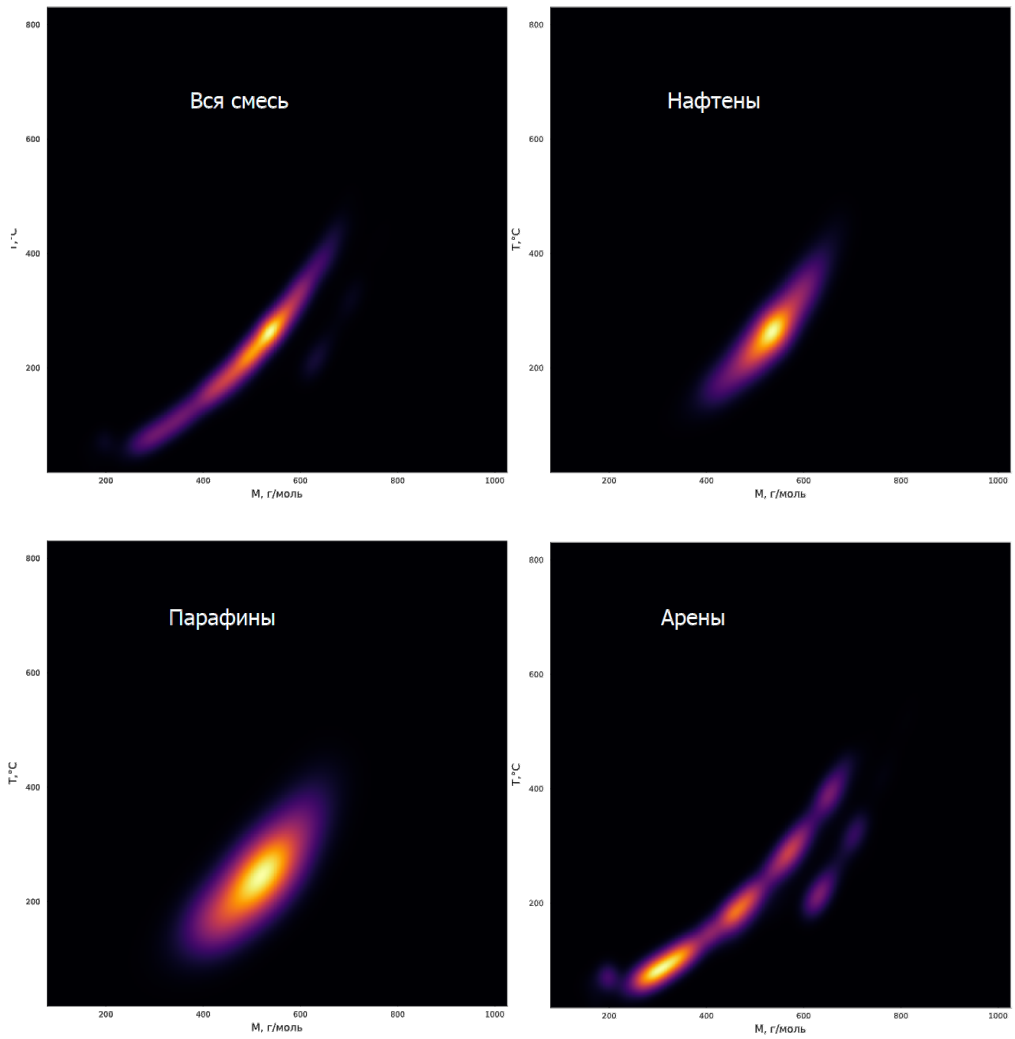


Рис. 1. Описание образца вакуумного газойля двумерным распределением по температуре кипения и молекулярной массе

Список литературы

[1] P.J. Becker, N. Serrand, B. Celse, D. Guillaume, H. Dulot. Comparing hydrocracking models: Continuous lumping vs. single events, Fuel, 165, 2016, 306-315

[2] Yu Ren, Zuwei Liao, Jingyuan Sun. Molecular reconstruction: Recent progress toward composition modeling of petroleum fractions. Chemical Engineering Journal, N 357, 2019. C. 761-775.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 22-73-10015) и в рамках государственного задания ИК СО РАН (FWUR-2024-0037).

УД-IV-9

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРОЦЕССА ГИДРОКРЕКИНГА НА ОСНОВАНИИ ПИЛОТНЫХ ИСПЫТАНИЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Казаков М.О., Петров Р.В., Дик П.П., Носков А.С.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
kazakov@catalysis.ru

Процесс гидрокрекинга вакуумного газойля является одним из основных углубляющих процессов нефтепереработки и направлен на производство высококачественных топливных компонентов и базовых масел. Материальный баланс процесса и качество продуктов зависят от состава сырья, технологических параметров и используемых катализаторов, в качестве которых в большинстве случаев выступают бифункциональные системы на основе цеолитов и сульфидов переходных металлов. В ходе процесса на поверхности катализатора образуются коксовые отложения [1], блокирующие активные центры, на которых протекают целевые реакции. С увеличением концентрации коксовых отложений увеличивается доля заблокированных активных центров, что приводит к необходимости замены катализатора.

Целью работы является расчет режимов процесса гидрокрекинга с целевым показателем максимальных выход средних дистиллятов с учетом дезактивации катализатора коксовыми отложениями.

Активность катализатора (a) зависит как от температуры (константа скорости дезактивации k_d описывается уравнением Аррениуса), так и от времени проведения процесса и описывается уравнением, схожим с [1]:

$$\frac{da}{dt} = -k_{\text{d}}\left(T\left(t\right)\right)$$

В ходе пробега для достижения высокого выхода средних дистиллятов увеличивают температуру проведения процесса с целью компенсации потери активности катализатора вследствие дезактивации. Чем выше начальная температура, тем короче срок службы катализатора. Так, для рассматриваемого примера увеличение начальной температуры процесса с 370 °C до 390 °C сокращает срок службы катализатора более чем в 3 раза. Температура проведения процесса гидрокрекинга влияет на выходы продуктов. Выход средних дистиллятов в области низких температур достаточно мал, поскольку мала скорость реакций гидрокрекинга (рис. 1А). С увеличением температуры до

387 °C скорость реакций гидрокрекинга увеличивается и возрастает выход средних дистиллятов. С дальнейшим увеличением температуры выход средних дистиллятов снижается, поскольку увеличивается скорость вторичного гидрокрекинга средних дистиллятов в бензиновую фракцию и легкие газы.

Расчетное количество средних дистиллятов в относительных единицах, полученное за весь период эксплуатации катализатора приведено на рисунке 1В. В области низких температур скорость дезактивации мала, срок службы катализатора достаточно длителен, но и скорость реакции мала. Увеличение температуры приводит к росту количества средних дистиллятов, поскольку увеличивается их выход. Максимум достигается при 377 °C. С дальнейшим увеличением температуры время пробега катализатора снижается, что приводит к уменьшению общего производства средних дистиллятов за период.

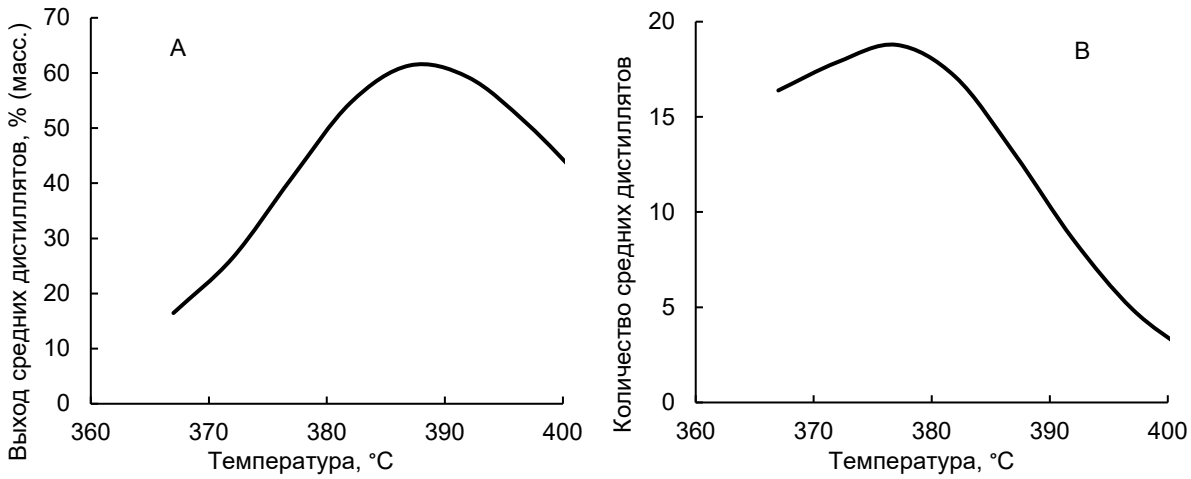


Рис. 1. Зависимость выхода (A) и количества (B) средних дистиллятов от температуры

Приведенные расчеты показывают, что в области реальных температур процесса гидрокрекинга за счет выбора оптимальных условий возможно увеличить производство целевого продукта (средних дистиллятов) на 8-10 %.

Список литературы

[1] Rodriguez E., Felix G., Ancheyta J., Trejo F. Modeling of hydrotreating catalyst deactivation for heavy oil hydrocarbons // Fuel. 2018. V. 225. P. 118–133.

УД-IV-10

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ НАФТЕНОВОГО ЖИДКОГО ОРГАНИЧЕСКОГО НОСИТЕЛЯ ВОДОРОДА В ПРИСУТСТВИИ Pt/C КАТАЛИЗАТОРА

Султанова М.У.[1], Самойлов В.О.[1], Рамазанов Д.Н.[1], Максимов А.Л.[1,2]

[1]Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия
[2]Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
Sultanova@ips.ac.ru

Для обеспечения крупномасштабного применения водорода как высокоэффективного и экологичного энергоносителя на сегодняшний день весьма актуальны исследования по разработке эффективных и безопасных систем его хранения и транспорта, в частности технологии жидких органических носителей водорода (ЖОНВ) на основе смесей различных ароматических углеводородов, полученных из доступных и дешевых сырьевых источников [1]. Ранее нами был получен потенциальный многокомпонентный углеводородный носитель водорода из лёгкого газойля каталитического крекинга (ЖОНВ/ЛГКК) с использованием процессов гидрогенизации и фракционной дистилляции, а также глубоко были изучены его химический состав и эксплуатационные свойства [2]. Целью настоящей работы является дальнейшее исследование основных закономерностей процесса дегидрирования нафтенового ЖОНВ/ЛГКК в реакторе непрерывного действия в присутствии 0,5 % масс. Pt/C катализатора.

Нами было проведено дегидрирование ЖОНВ/ЛГКК с использованием лабораторной проточной установки дегидрирования в присутствии 0,5 % масс. Pt/C в токе газа-носителя (водород) при варьировании условий процесса (T = 340-360℃, $p(H_2)$ = 0,1-1,5 МПа, v = 0,3-0,6 $ч^{-1}$). Для полученных жидких продуктов дегидрирования ЖОНВ/ЛГКК были определены основные свойства: плотность по ГОСТ Р 57037 и массовая доля аренов по группам (метод высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) с детектированием по коэффициенту рефракции по ГОСТ EN 12916).

В результате проведенной экспериментальной работы были установлены зависимости практического выхода водорода, степени дегидрирования и основных свойств жидких продуктов дегидрирования от параметров процесса (температура, давление, объёмная скорость подачи сырья, кратность

циркуляции) при проточном дегидрировании ЖОНВ/ЛГКК в присутствии 0,5 % масс. Pt/C в течение 50-100 ч. Установлено влияние давления водорода на дегидрирование ЖОНВ/ЛГКК: повышение давления до 1,0 МПа приводит к максимальной производительности проточного реактора при сохранении временной стабильности работы. Показано влияние конфигурации проточного реактора и гранулометрического состава катализатора на процесс дегидрирования ЖОНВ/ЛГКК. Выявлены предполагаемые причины дезактивации 0,5 % масс. Pt/C в процессе дегидрирования ЖОНВ/ЛГКК при выбранных условиях с помощью физико-химических методов анализа (инфракрасная спектроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния света (Раман), просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) и другие).

Список литературы

[1] Sultanova M.U., Samoilov V.O., Borisov R.S., Ramazanov D.N., Maximov A.L. Hydrogen storage with a naphthenic liquid organic hydrogen carrier (LOHC) obtained from coal tar// International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – Т. 68. – С. 1251-1260. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.04.109.

[2] Samoilov V.O., Sultanova M.U., Borisov R.S., Kozhevnikov A.A., Lavrentyev V.A., Utepbergenova A.Sh., Maximov A.L. The production and the properties of the liquid organic hydrogen carrier (LOHC) obtained from the light cycle oil (LCO) // Fuel Processing Technology. – 2023. – Т. 240. – С. 107576. https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2022.107576.

Благодарность

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИНХС РАН.

УД-IV-11

ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ПРОЦЕССА ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ В ТРУБЧАТОМ РЕАКТОРЕ СИНТЕЗА ФИШЕРА-ТРОПША ЗА СЧЁТ УПРАВЛЕНИЯ ЦИРКУЛЯЦИЕЙ СИНТЕЗ-ГАЗА

Яковенко Р.Е., Нарочный Г.Б., Савостьянов А.П.

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова, Новочеркасск Ростовской обл., Россия
jakovenko39@gmail.com

Процесс Фишера-Тропша (FT), заключающийся в каталитическом синтезе углеводородов из оксида углерода и водорода ($CO + H_2$), представляет собой ключевую технологию преобразования угля, природного газа, биомассы и других углеродсодержащих ресурсов в жидкие топлива, альтернативные нефтепродуктам. Крупные промышленные установки, такие как Pearl GTL в Катаре, демонстрируют производительность до 5 млн. тонн в год, используя высокоактивные кобальтовые катализаторы.

Одной из основных проблем синтеза ФТ является его высокая экзотермичность (~165 кДж/моль конвертированного CO), приводящая к локальному перегреву каталитического слоя. Это вызывает снижение селективности к целевым длинноцепочечным углеводородам (C_{5+}) и ускоряет дезактивацию катализатора. Эффективный отвод тепла становится критическим фактором, ограничивающим производительность процесса, особенно при использовании высокоинтенсивных режимов (1000–5000 $ч^{-1}$).

Современные подходы к интенсификации теплообмена включают разработку микрореакторов с увеличенной поверхностью теплоотдачи, способных работать при скоростях газа до 20 000 $ч^{-1}$, а также применение псевдоожиженных слоев и оптимизацию гидродинамики. Однако промышленное внедрение микрореакторов сталкивается с трудностями масштабирования и эксплуатации, тогда как традиционные трубчатые реакторы, несмотря на простоту конструкции, обладают недостаточной эффективностью теплообмена для высокопроизводительных процессов.

В данной работе исследовано влияние циркуляции синтез-газа на процесс теплообмена в трубчатом реакторе синтеза ФТ и основные показатели процесса. Исследования выполнены на пилотном трубчатом реакторе с высотой слоя катализатора 1,5 м (см. рисунок). В докладе будет представлен детальный анализ результатов исследования, включающий данные о составе продуктов

синтеза с акцентом на распределение углеводородов по фракциям. Рассматривается динамика ключевых параметров процесса, таких как конверсия CO, селективность по целевым продуктам и производительность, в зависимости от времени работы реакторов. Особое внимание уделено температурным профилям, их влиянию на стабильность катализатора и эффективность синтеза.

Рисунок. Пилотная установка синтеза Фишера-Тропша

Исследованы параметры, необходимые для поддержания стабильного температурного профиля, и представлена стратегия оптимизации конструкции реактора, позволяющая повысить производительность синтеза ФТ без ущерба для селективности. Результаты работы открывают новые перспективы для создания энергоэффективных промышленных установок высокопроизводительного синтеза ФТ.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, государственное задание FENN-2024-0002.

УД-IV-12

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ГЕНЕРАТОРЫ «ТОПАЗ»: ОТ РАЗРАБОТКИ ДО СЕРИЙНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Снытников П.В.[1], **Рогожников В.Н., Потемкин Д.И.**[1], **Немудрый А.П.**[2], **Сивак А.В.**[3]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
[3]ООО «Научно-исследовательский центр «ТОПАЗ», Москва, Россия
pvsnyt@catalysis.ru

Электрохимические генераторы «Топаз» на основе микротрубчатых твердооксидных топливных элементов (МТ ТОТЭ) – новый продукт, выходящий на рынок компактных устройств автономного электропитания, работающих на газообразном углеводородном топливе. ЭХГ состоит из нескольких основных блоков: батареи топливных элементов, топливного процессора, содержащего каталитический риформер исходного топлива, пускового устройства, каталитического дожигателя отходящих (анодных) газов, теплообменного оборудования, а также вспомогательных подсистем, обеспечивающих запуск и функционирование энергоустановки. В докладе суммированы результаты проведенных многолетних работ, направленных на разработку МТ ТОТЭ, а также структурированных катализаторов, их методов синтеза, рассматриваются примеры конструкций реакторов на их основе для получения синтез газа из различного углеводородного сырья: природного газа, сжиженного углеводородного газа (пропан-бутановых смесей), спиртов и эфиров для питания топливных элементов. Обсуждаются подходы по применению платформенных решений, направленных на унификацию базовых стадий изготовления катализаторов и МТ ТОТЭ для улучшения технологичности процесса и снижения его себестоимости при организации мелкосерийного производства.

Компактные ЭХГ «Топаз» (Рис. 1) предназначены для использования в качестве автономного источника электропитания для дополнения встроенной аккумуляторной батареи современной мобильной электронной аппаратуры (индивидуального электротранспорта, робототехники, ноутбуков), а также для использования в качестве основного или временного источника электропитания стационарных систем различного назначения малой мощности потребления: станций фото-видеофиксации, датчиков мониторинга, сигнальных осветительных устройств и других применений.

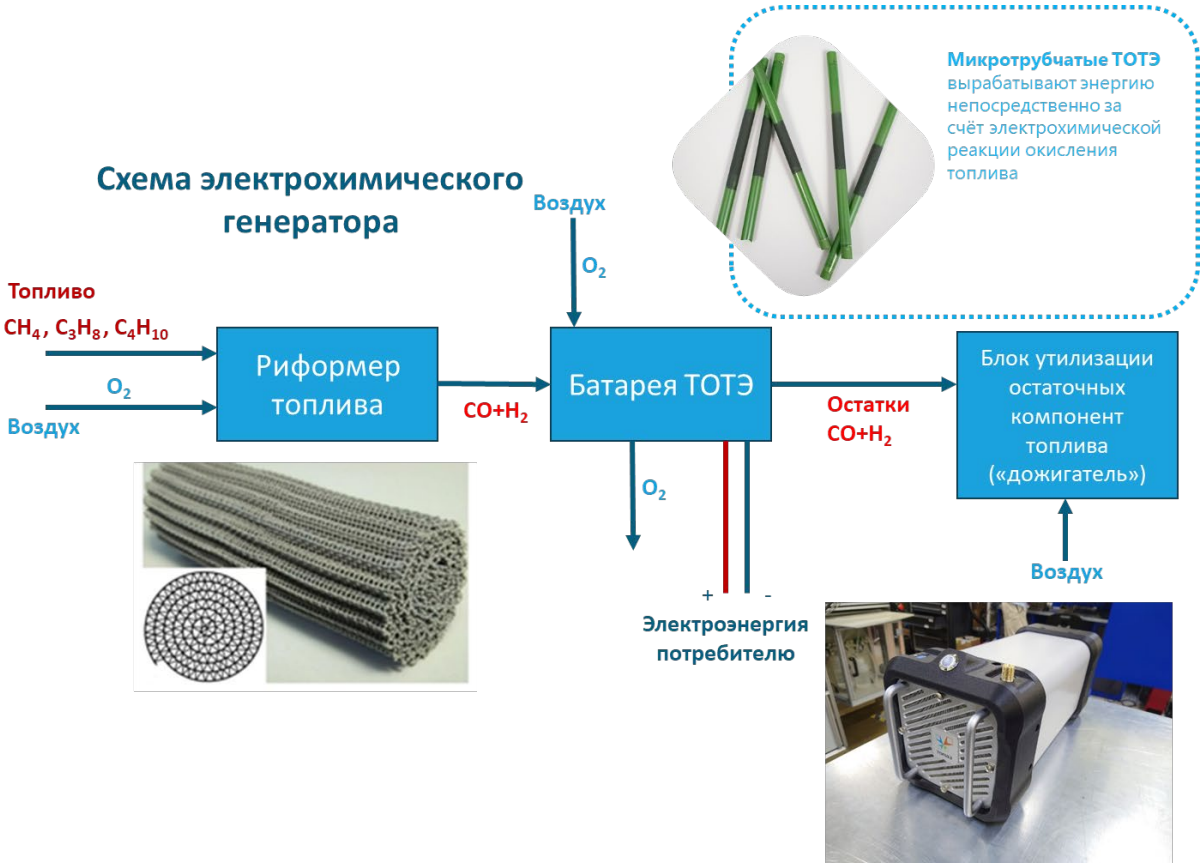


Рисунок 1. Принципиальная схема работы и внешний вид ЭХГ «Топаз» и основных его компонентов: структурированного катализатора и МТ ТОТЭ

Благодарность

Разработка и освоение производства ЭХГ «Топаз» ведется ООО «Научно-исследовательский центр «ТОПАЗ» при финансовой поддержке ООО «Инэнерджи» и Фонда поддержки проектов НТИ.

УД-IV-13

ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ УГЛЕКИСЛОТНАЯ КОНВЕРСИЯ МЕТАНА В УСЛОВИЯХ МАТРИЧНОГО РИФОРМИНГА

Никитин А.В.[1,2], **Зимин Я.С.**[2], **Отнельченко В.В.**[1], **Фокин И.Г.**[1], **Седов И.В.**[1], **Арутюнов В.С.**[1,2]

[1]Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка, Московская обл.
[2]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия
ni_kit_in@rambler.ru

Увеличение объемов использования природного газа в качестве газохимического сырья и повышение внимания к экологическим проблемам, особенно ужесточение требований по выбросам CO_2, делают востребованной разработку высокоэффективных газохимических процессов с минимальной эмиссией CO_2 в окружающую среду [1].

Сочетание экзотермического процесса матричной конверсии природного газа и его эндотермической некаталитической углекислотной конверсии в одном совмещенном процессе может стать эффективным экологическим способом получения синтез-газа [2].

В данном исследовании были установлены кинетические закономерностей газофазных процессов, протекающих в условиях матричной конверсии смеси метана, кислорода и CO_2. Показана практическая возможность матричной конверсии метана при оптимальных коэффициентах избытка окислителя α <0,55 в смесях с концентрацией CO_2 до 50 $\%_{масс}$ относительно метана, что позволяет в матричном конверторе превращать в синтез-газ реальный биогаз. Показано, что введение CO_2 в реакционную смесь приводит также к снижению в синтез-газе концентрации ацетилена, который может являться предшественником образования сажи и каталитическим ядом на дальнейших технологических стадиях получения химических продуктов.

На базе углекислотной матричной конверсии метана и полученных данных была предложена концептуальная схема получения метанола с возможностью утилизации до 25 $\%_{масс}$ CO_2 к исходному метану. Показано, что CO_2 расходуется в конверсии метана, что позволяет подбирать такие условия процесса, при которых практически весь CO_2 превращается в метанол, то есть весь процесс проходит в автотермическом режиме практически без эмиссии CO_2.

Список литературы

[1] IPCC Special report on carbon dioxide capture and storage. Metz B., Davidson O., de Coninck H., Loos M., Meyer L. (Eds.). Cambridge University Press, UK, 2005. 431 p. Available at: https://www.ipcc.ch/report/carbon-dioxide-capture-and-storage/ (accessed on 14.05.2025).

[2] Savchenko, V.I.; Zimin, Ya.S.; Nikitin, A.V.; Sedov, I.V.; Arutyunov, V.S. Utilization of CO2 in non-catalytic dry reforming of C1–C4 hydrocarbons. Journal of CO2 Utilization. 2021, 47, 101490. https://doi.org/10.1016/j.jcou.2021.101490.

УД-IV-14

СОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКАЯ ПАРОВАЯ КОНВЕРСИЯ CO В ПРИСУТСТВИИ МОДИФИЦИРОВАННОГО MgO ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЧИСТОГО ВОДОРОДА

Никулина И.Е.[1], **Горлова А.М.**[1], **Петров И.Ю.**[1], **Потемкин Д.И.**[1,2]

[1]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
bic@catalysis.ru
[2]*Новосибирский государственный университет, НГУ, Новосибирск, Россия*
ikar@catalysis.ru

Подход сорбционно-каталитической паровой конверсии CO (СК-ПК CO) был предложен как способ сократить количество стадий производства водорода из природного газа за счет объединения в одном реакторе процесс ПК CO и улавливание образующегося CO_2, что также должно способствовать увеличению выхода водорода [1]. Подходящим материалом для улавливания CO_2 в СК-ПК CO является MgO с точки зрения рабочего температурного диапазона (250-400 °C), и за счет свой высокой сорбционной емкости до 24 ммоль $CO_2/г_{сорб}$. Для регулирования сорбционной емкости MgO модифицируют нитратами щелочных металлов [2,3]. В настоящей работе исследовано влияние MgO, модифицированного 10 мольн. % $NaNO_3$, (10NaMg далее) на выход и чистоту получаемого водорода в реакции СК-ПК CO при температурах 200-300 °C и атмосферном и повышенном давлении.

Улавливание CO_2 из газовых потоков, содержащих $CO_2/CO/H_2/H_2O_{пар}$, в концентрациях, близким к газовым смесям ПК CO, показало, что при атмосферном давлении (рис. 1а) уже при 220 °C значение сорбционной емкости (СЕ) 10NaMg составляет 1 ммоль $CO_2/г_{сорб}$ при использовании влажной смеси. Повышение давления до 10 атм (рис. 1б) позволяет улавливать до 5,5 ммоль $CO_2/г_{сорб}$ при 200-220 °C при использовании смеси того же состава.

В результате СК-ПК CO в присутствии катализатора ПК CO 5 вес.% $Pt/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ и сорбента 10NaMg при атмосферном давлении (рис. 2а) показано снижение концентрации CO_2 с 20 для реакции без сорбента до 15 об. % и CO с 8 до 4 об. % в первом цикле, однако далее активность сорбента снижается. Повышение давления до 10 атм (рис. 2б) при таких же условиях позволяет получать водород, содержащий на выходе не более 0.2 об. % CO и CO_2 в течение 8 минут в ходе всех 4 циклов. Стоит отметить, что равновесная концентрация CO в данных условиях без сорбента составляла 0.8 об. %.

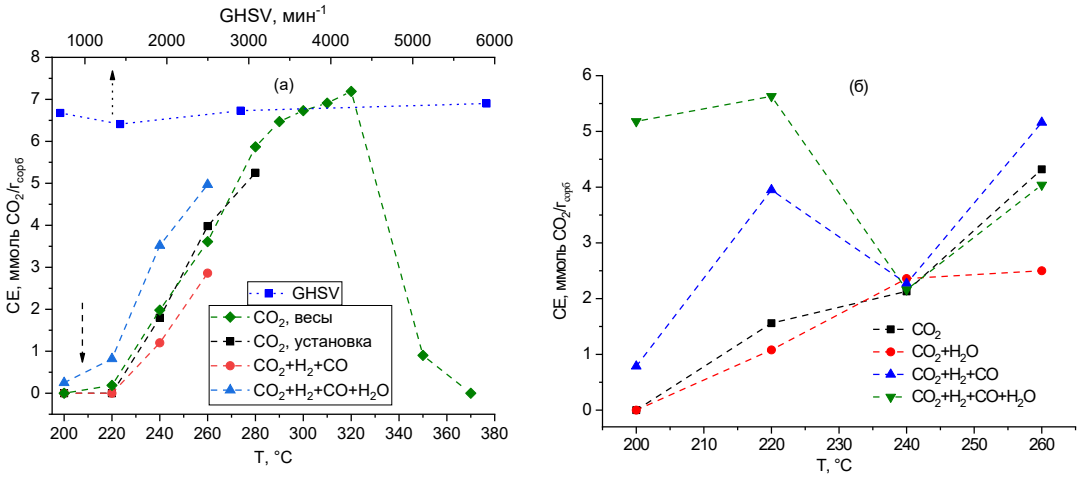


Рисунок 1. Зависимость СЕ от температуры и скорости потока при давлении (а) 1 и (б) 10 атм в результате улавливания CO_2 из газовых потоков ПК CO. Состав сухого газа (об.%) 22 CO_2, 7 CO, 55 H_2 16 N_2. 30 об.% $H_2O_{пар}$. Загрузка сорбента 1 г, фракция 1,0-1,25 мм, 2 часа сорбции

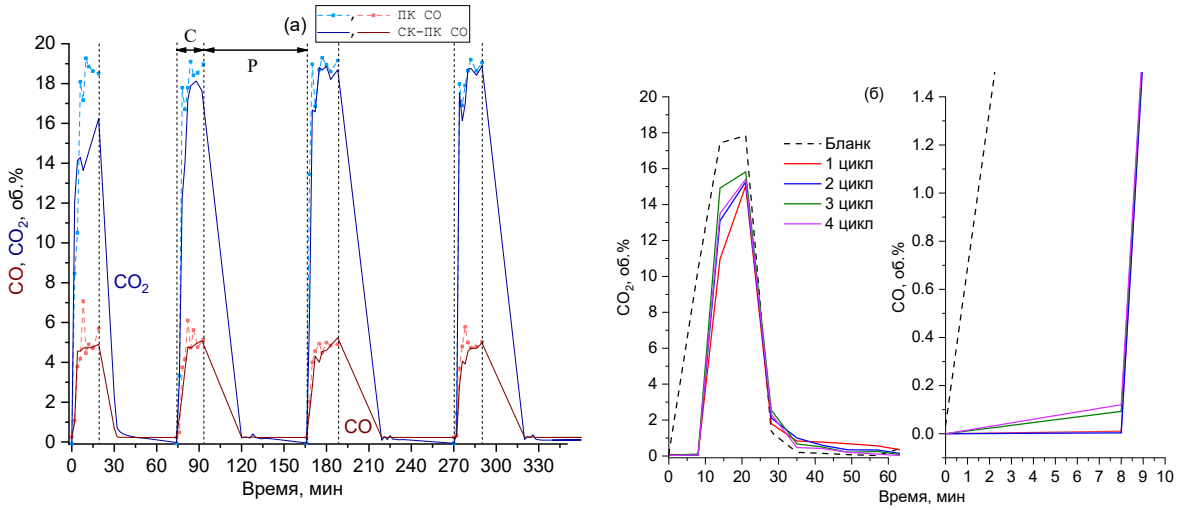


Рисунок 2. Изменение концентрации CO и CO_2 в сухом газе в ходе СК-ПК CO при давлении (а) 1 и (б) 10 атм. Состав влажного газа (об.%): 10 CO_2, 8 CO, 52 H_2, 30 H_2O. Регенерация в 30 об. % $H_2O_{пар}/N_2$. $T_{сорб}$ = 260 °C, $T_{реген}$ = 280 °C. Соотношение сорбент : катализатор = 2:1. Линия «бланк» – изменение концентрации компонентов в отсутствии реакции

Список литературы

[1] Wang Y., Memon M.Z., Seelro M.A. et al. Int J.Hydron. Energy. 2021. V.46. P.23358-23379.

[2] Harada T., Simeon F., Hamad E. et al. Chemistry of Materials. DOI: 10.1021/cm503295g.

[3] Nikulina I.E., Derevshchikov V.S., Pakharukova V.P. et al. Catalysis in Industry. 2024. V.16.N.2.P.111-122.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-73-10134.

УД-IV-15

ОСОБЕННОСТИ РАЗРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГАЗОХИМИИ

Никулина И.Е., Горлова А.М., Урлуков А.С., Шигаров А.Б., Потемкин Д.И.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
bic@catalysis.ru, potema@catalysis.ru

Ежегодно в Российской Федерации добывается более 600 млрд.м^3 природного газа. При этом химической переработке в аммиак, метанол и другие продукты подвергается менее 5 % добываемого природного газа (около 26 млрд.м^3). Развитие газохимии в России является одной из ключевых задач химической промышленности с учетом имеющейся ресурсной базы. Поэтому разработка и развитие отечественных газохимических технологий является актуальной задачей в ближайшие годы. Водород и олефины, в частности этилен и пропилен, являются одними из наиболее маржинальных полупродуктов, получаемых из природного и попутного нефтяного газов. В технологических цепочках их получения одними их ключевых стадий являются процессы паровой конверсии метана, монооксида углерода и дегидрирования этана и пропана, соответственно. Максимальный выход продуктов этих реакций ограничен термодинамикой, что существенно снижает эффективность и усложняет их технологическую реализацию. Разработка решений, позволяющих преодолеть термодинамические ограничения, позволит увеличить эффективность процессов и является важной научной проблемой. Одним из подходов преодоления термодинамических ограничений является проведение процессов паровой конверсии CH_4 и CO и окислительного дегидрирования этана и пропана в сорбционно-каталитическом режиме в присутствии гетерогенных катализаторов и адсорбентов (поглотителей), химически поглощающих побочные продукты реакций (CO_2 и H_2, соответственно).

В работе представлены принципы разработки сорбционных материалов для указанных процессов с учетом их специфики на примере сорбционно-каталитической паровой конверсии CO на механической смеси $Pt/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ катализатора и сорбента $NaNO_3/MgO$ и поглотителей водорода $CuO@SiO_2$.

В работе была предложена макрокинетическая модель сорбции CO_2 первого порядка на 10 мол. % $NaNO_3/MgO$ сорбенте и определена его максимальная

сорбционная емкость, которая 13,4 ммоль CO_2/$г_{сорб}$. Рассчитанная величина константы сорбции k_{ads} при температурах 280-320 °C и парциальном давлении CO_2 0,50-0,75 атм составляет 0,017 $мин^{-1}атм^{-1}$. На основе полученной кинетики было сделано моделирование адиабатического (Рис. 1) и изотермического (Рис. 2) адсорбера CO_2 в рамках технологической схемы получения водорода 10 кг/ч из природного газа при рабочем давлении 12 атм. В ходе расчетов было показано, что для эффективного функционирования адсорбера необходим интенсивный отвод выделяющейся в процессе сорбции теплоты. Это позволяет проводить сорбцию CO_2 в течение 30 минут при температуре 300 °C и объемной скорости потока GHSV = 1170 $ч^{-1}$, при этом концентрация CO_2 на выходе в сухом газе не превышает 1,5 мол. %.

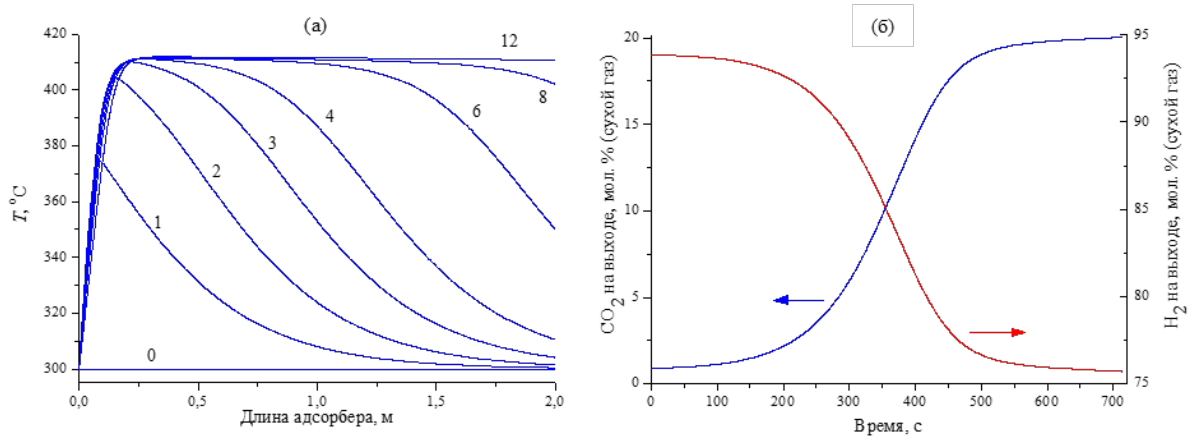


Рисунок 1. (а) Динамика изменения по длине адиабатического адсорбера профиля температур; (г) концентрации (% мол.) на сухую смесь CO_2 и H_2 на выходе в зависимости от времени

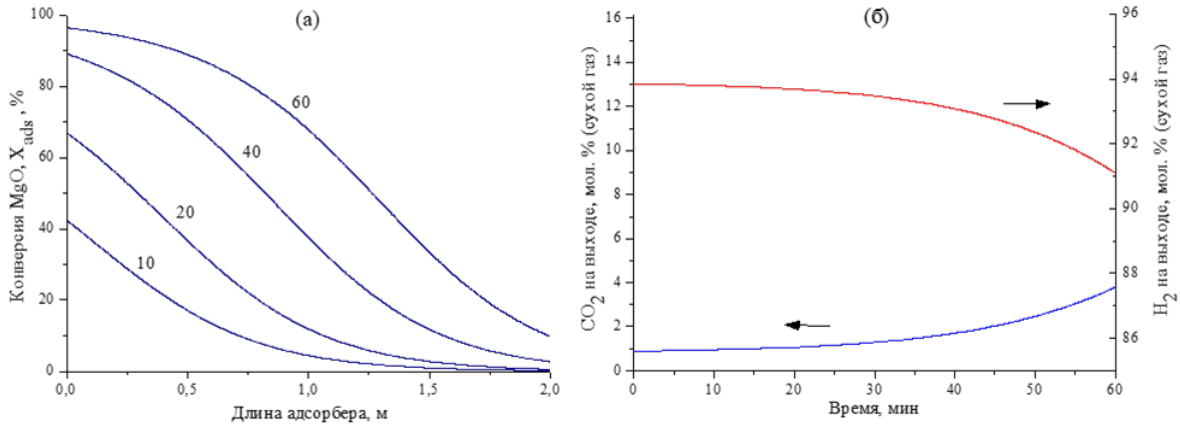


Рисунок 2. Динамика изменения (а) конверсии MgO по длине «идеального» изотермического адсорбера при 300 °C в различные моменты времени, числа около кривых означают время в минутах от момента запуска; (б) концентрации (на сухую смесь) CO_2 и H_2 на выходе в зависимости от времени

УД-IV-16

СТРУКТУРИРОВАННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ПАРЦИАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ ПРИРОДНОГО ГАЗА ДЛЯ СИНТЕЗА МЕТАНОЛА

Рогожников В.Н., Потемкин Д.И., Снытников П.В., Шефер К.И., Шигаров А.Б., Шилов В.А., Бурматова М.А., Кузнецова А.Д., Печенкин А.А., Урлуков А.С.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
rvn@cayalysis.ru

Метанол является одним из важнейших крупнотоннажных продуктов органического синтеза, который получают путем переработки синтез-газа при повышенных температурах (200-450 °C) и давлении (до 300 атмосфер) в присутствии катализаторов. Метанол широко применяется в промышленности и используется в производстве различных товаров. Одно из применений метанола – ингибитора гидратообразования в газовой промышленности. Ключевым источником сырья для производства метанола является природный газ (ПГ), из которого синтез-газ можно получать рядом химических процессов: паровая и углекислотная конверсии, парциальное окисление, автотермический риформинг, которые проводят в специальных устройствах – риформерах в присутствие катализаторов. Паровая и углекислотная конверсии являются эндотермическими, и поэтому для поддержания процесса необходимо подводить тепло в реактор. Практический интерес представляет экзотермический процесс парциального окисления и термонейтральный процесс автотермической конверсии ПГ в синтез-газ с последующим его превращением в ценные химические продукты – метанол или водород. Преимуществом парциального окисления является отсутствие необходимости подводить, испарять и перегревать воду, и нет необходимости подводить тепло в реактор. Однако в следствие интенсивного выделения тепла во фронтальном слое и снижения температуры по ходу реактора, возникает необходимость перераспределения тепла по длине слоя катализатора. Аналогичные процессы в лобовом слое катализатора протекают и в случае автотермического риформинга. Таким образом возникает проблема, связанная с тем, что для каждой реакции необходимо контролировать тепло- и массоперенос. Для этого хорошо подходят теплопроводящие подложки – материалы на основе металлических сплавов, таких как фехраль, нихром, нифехраль и т.д. Такая концепция получения метанола хорошо подходит для удаленных месторождений

природного газа, где нет возможности подвозить метанол, а есть необходимость обеспечить потребность месторождения в метаноле в качестве ингибитора образования газовых гидратов.

В данной работе проведено исследование структурированных катализаторов Rh, Ru, Pt, Pd, Ni, – содержащих, нанесенных на структурированную подложку из фехралевой сетки с $Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_{2-x}/Al_2O_3$/FeCrAl в диапазоне давлений 1-50 атмосфер в процессе парциального окисления метана в синтез-газ. В результате экспериментальных работ показано, что синтез-газ, получаемый путем парциального окисления метана под давлением, может быть использован для синтеза метанола. Выполнено математическое моделирование, которое показывает, что предложенная схема каскада реакторов парциального окисления метана и синтеза метанола позволяет обеспечить отдельно взятое месторождение природного газа метанолом в необходимом количестве.

Благодарность

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 24-79-10268.

УД-IV-17

РЕФОРМЕР ВОЗДУШНОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНОЛА В ВОДОРОДСОДЕРЖАЩИЙ ГАЗ ДЛЯ ПИТАНИЯ ТОТЭ

Бадмаев С.Д., Кузнецова А.Д., Собянин В.А., Снытников П.В.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
sukhe@catalysis.ru

Твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) считаются одними из наиболее перспективных среди известных электрохимических генераторов благодаря высокому КПД, отсутствию благородных металлов в их конструкции, а также минимальным требованиям к составу водородсодержащего газа. Для обеспечения работы ТОТЭ может быть использован водородсодержащий газ, получаемый каталитической конверсией метанола непосредственно на месте работы энергоустановки. Масштабы производства метанола, развитая инфраструктура, его низкая стоимость в РФ, относительно мягкие условия конверсии по сравнению с углеводородным сырьем, а также отсутствие примесей соединений серы, которые являются ядом для катализаторов, делают метанол конкурентным источником водорода/синтез-газа для применения в энергоустановках на базе топливных элементов [1].

В докладе представлены результаты создания автономного реформера воздушной конверсии метанола в водородсодержащий газ для питания ТОТЭ мощностью 100-300 Вт. Продемонстрирована возможность «автозапуска» реформера (без использования внешнего тепла) за счет адиабатического разогрева Pt-содержащего катализатора при взаимодействии с реакционной смесью. При достижении стационарного режима работы (~400 °C) обеспечивалось полное превращение метанола в газовую смесь с высоким содержанием H_2 и CO (суммарно >50 об. %) и достигалась весьма высокая эффективность реформера. Сформулированы рекомендации по созданию автономной энергоустановки на базе ТОТЭ [2].

Список литературы

[1] Бадмаев С.Д., Беляев В.Д., Потемкин Д.И., Снытников П.В., Собянин В.А., Хартон В.В. // Катализ в промышленности. 2023. Т.23. №2. С. 26. DOI: 10.18412/1816-0387-2023-2-26-33.

[2] Бадмаев С.Д., Кузнецова А.Д., Беляев В.Д., Собянин В.А., Снытников П.В. Устройство получения энергии. Патент РФ 225231U1 от 15.04.2024. Бюл. № 11.

Благодарность

Авторы (Бадмаев С.Д., Кузнецова А.Д.) благодарят Российский научный фонд (№ 25-23-20157) за финансовую поддержку.

УД-IV-18

КОМПАКТНЫЙ РЕАКТОР ЧАСТИЧНОГО ОКИСЛЕНИЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬЮ ПО ЭНДОГАЗУ ДО 10 м^3/ч ДЛЯ СОЗДАНИЯ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЙ АТМОСФЕРЫ

Калинин В.И., Шабуня С.И., Мартыненко В.В., Минкина В.Г.

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова, Минск, Беларусь
vokal@dnp.itmo.by

В настоящее время для создания защитной атмосферы для термохимической обработки стали используются аппараты импортного производства. Разработка собственных устройств является актуальной задачей для промышленности Республики Беларусь.

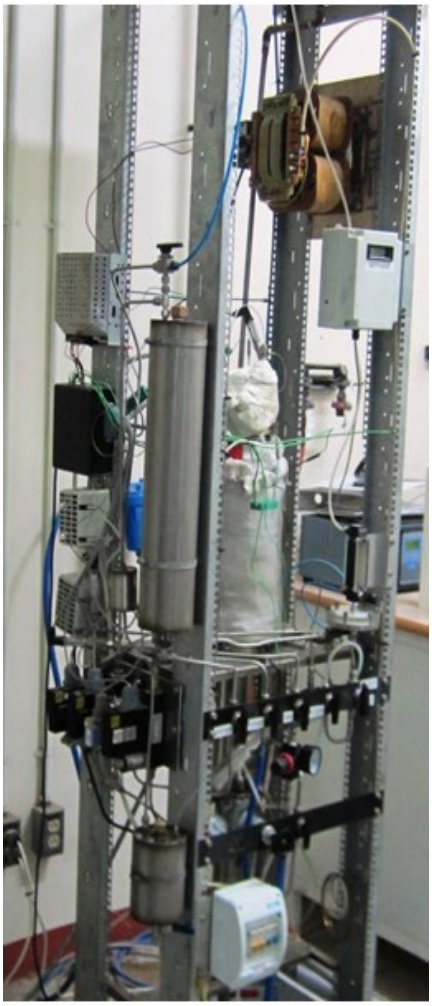


Рис. 1. Генератор эндогаза

Для компенсации допущенных конструктивных ошибок теплообменного характера в используемых на производстве генераторах защитной атмосферы разработчики используют более эффективные катализаторы или увеличивают объем засыпки, что приводит к дополнительным, как финансовым, так и энергетическим затратам.

Генераторы, используемые на предприятиях, имеют производительность по эндогазу (смесь из H_2, N_2, CO, CO_2 и CH_4) от 2.5 до 500 м^3/ч.

Представляемый доклад содержит описание компактного генератора, вырабатывающего до 10 м^3/ч эндогаза, сопоставимого по производительности с используемыми промышленными установками. Такие объемы производимого эндогаза достаточны для нужд термообработки металлоизделий в масштабе цеха (до трех печей) небольшого предприятия.

В результате проведенных исследований нами установлено, что решающее влияние на компонентный состав продуктов конверсии при частичном окислении углеводородов оказывают процессы теплообмена.

Подвод тепла играет определяющую роль. Мы решили эту проблему двумя способами: подогревом входной смеси и нагревом внешнего корпуса реактора, что позволило эффективно контролировать процессы теплообмена в реакторе. Реализованный способ нагрева корпуса реактора нацелен на адресную компенсацию тепловых потерь, где это необходимо, а требуемая начальная температура реакции достигается предварительным нагревом входной смеси.

Разработанная система теплового контроля позволила существенно уменьшить габариты реактора, сэкономить катализатор, снизить тепловые потери, а также кратно сократить время запуска установки и установления рабочего режима. Оптимизация теплообменных процессов дала возможность сократить объем реактора и количество катализатора примерно в 20 раз. В реакторе используется каталитический блок объемом 0.5 л, а в промышленных генераторах аналогичной производительности содержится несколько десятков литров катализатора. Эффективность катализатора практически не влияет на состав получаемого эндогаза, поэтому в каталитическом блоке могут применяться промышленные катализаторы никеля и платины на носителе из оксида алюминия. Созданный генератор эндогаза способен работать как на газообразных, так и жидких углеводородах.

УД-IV-19

ДИЗАЙН АРХИТЕКТУРЫ МИКРОТРУБЧАТЫХ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ АДДИТИВНОГО ФОРМИРОВАНИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Попов М.П.[1,2], **Власов С.А.**[1,2], **Гонгола М.И.**[1], **Фуад М.Г.Г.**[1], **Гуськов Р.Д.**[1], **Ковалев И.В.**[1], **Чижик С.А.**[1], **Немудрый А.П.**[1]

[1]ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Новосибирский государственный университет, НГУ, Новосибирск, Россия
popov@solid.nsc.ru

Выделение побочных продуктов сгорания в атмосферу как при добыче, так и при обработке нефти и газа ведет к ухудшению экологической ситуации в мире. Повышение уровня CO_2 в атмосфере и, как следствие, парниковый эффект стали по настоящему важной мировой проблемой за последние 10 лет. Поэтому, переход на альтернативные источники энергии является глобальной задачей на сегодняшний день. Развитие водородной энергетики — это вклад в будущее не только России, но и всего мира. Одним из таких источников энергии являются топливные элементы (ТЭ), благодаря которым, возможно преобразование химической энергии в электрическую с высоким КПД [1-3]. Применение микротрубчатых твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) предпочтительно в области мобильных устройств, для которых важным параметром является скорость запуска ТОТЭ, устойчивость к термоциклированию и электрической нагрузке. Оптимизация микроструктуры за счет контроля пористости и, следовательно, эффективности подвода рабочего газа к электроду увеличит скорость реакции и мощность трубчатого ТОТЭ (с развитой макроструктурой анодного пространства). В настоящей работе приведено применение технологии контроля макро- и микроструктуры анодных подложек с применением аддитивных методов, что дает возможность стать альтернативой уже имеющимся методам получения микротрубчатых ТОТЭ.

Список литературы

[1] J. Yoo, C.-Y. Yoo, J.-H. Yu, A.J. Jacobson, J. Am. Ceram. Soc. 100 (2017) 2690-2699.
[2] B. Bulfin, J. Vieten, S. Richter, J.M. Naik, G.R. Patzke, M. Roeb, C. Sattler, A. Steinfeld, Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 2466-2474.
[3] H. Ikeda, S. Nikata, E. Hirakawa, A. Tsuchida, N. Miura, Chem. Eng. Sci. 147 (2016) 166-172.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-10268, https://rscf.ru/project/25-73-10268/.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ с УСТНОЙ ФЛЭШ-ПРЕЗЕНТАЦИЕЙ (СД-1 – СД-3)

СД-1

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ В МОЛОЧНОЙ СЫВОРОТКЕ ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ УФ-ИСТОЧНИКАМИ В ФОТОРЕАКТОРЕ

Бочарникова Е.Н.[1,2], **Чайковская О.Н.**[1,2]

[1]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия, bocharnikova.2010@mail.ru*
[2]*Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия, tchon@phys.tsu.ru*

Изучение взаимодействия лекарственных соединений с биологическими средами является ключевой задачей современной фармацевтической науки. Особый интерес представляет исследование влияния внешних факторов, таких как ультрафиолетовое (УФ) излучение, на стабильность и оптические свойства этих соединений в сложных матрицах. В данной работе рассматриваются изменения оптических свойств лекарственных соединений, растворенных в молочной сыворотке, после воздействия УФ-облучения.

Молочная сыворотка, как сложная биологическая среда, содержит значительное количество органических молекул, включая белки, лактозу, витамины и минералы. Эти компоненты могут взаимодействовать с лекарственными соединениями, изменяя их абсорбционные и флуоресцентные характеристики. УФ-облучение способно инициировать различные фотохимические процессы в молочной сыворотке, такие как окисление белков, деградация лактозы и образование свободных радикалов. Эти процессы, в свою очередь, могут влиять на состояние лекарственных соединений, приводя к их разложению, изменению конформации или образованию новых продуктов.

Целью данного исследования является изучение влияния УФ-облучения на оптические свойства (абсорбцию и флуоресценцию) лекарственных соединений в молочной сыворотке.

В работе использовали стационарный фотореактор. В качестве УФ-источников были выбраны: 1) эксиплексные лампы на рабочих молекулах KrCl ($\lambda_{изл}$~ 222 нм), XeBr ($\lambda_{изл}$~ 283 нм) и XeCl ($\lambda_{изл}$~ 308 нм); 2) эксимерная лампа на рабочих молекулах Xe_2 ($\lambda_{изл}$~ 172 нм). В качестве объект были исследованы антибиотики группы сульфаниламида.

Предварительные результаты показали, что УФ-облучение оказывает значительное влияние на оптические свойства исследуемых лекарственных

соединений в молочной сыворотке. Наблюдается изменение спектров поглощения и флуоресценции, свидетельствующее о деградации исходных соединений и образовании новых продуктов. Степень изменений зависит от УФ-источника, интенсивности и продолжительности облучения, а также от химической структуры лекарственного соединения.

Полученные результаты могут иметь важное значение для оценки стабильности лекарственных препаратов в условиях воздействия солнечного света и для разработки новых стратегий защиты лекарственных соединений от фотохимического разложения. Дальнейшие исследования будут направлены на идентификацию продуктов фотохимического разложения и изучение их биологической активности.

СД-2

ВЛИЯНИЕ СПОСОБА ПЕРЕМЕШИВАНИЯ И ПРИРОДЫ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ПОВЕДЕНИЕ ПАЛЛАДИЙ СОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ ГИДРИРОВАНИЯ АЛКИНОЛОВ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ ВОДОРОДА

Кунарева А.А., Бахвалова Е.С., Сидоров А.И., Быков А.В., Никошвили Л.Ж.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
nlinda@science.tver.ru

Селективное каталитическое гидрирование алкинолов используется в производстве душистых веществ и биологически активных добавок, а также в синтезе лекарственных препаратов и жирорастворимых витаминов. В качестве металла-катализатора данной реакции наибольшее распространение нашел палладий. При этом достижение высокой селективности наряду с высокой активностью все еще является актуальным [1, 2]. Чтобы повысить селективность по алкену часто используются модификаторы [3-5]. Однако даже с применением неорганических или органических модификаторов селективность в реакции гидрирования терминальных алкинов редко превышает 95-97 % при 100 % конверсии [6]. Нами было показано [7, 8], что применение в качестве носителя коммерческого сверхсшитого полистирола позволяет синтезировать катализаторы, содержащие наночастицы Pd диаметром порядка 3-4 нм, сформированные *in situ*, которые в реакции гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола (МБИ) позволяют достичь селективности по отношению к 2-метил-3-бутен-2-олу (МБЕ) до 97 % при 100 % конверсии МБИ.

В рамках данной работы была синтезирована серия палладиевых катализаторов (содержание Pd 1 масс. %), нанесенных на аморфные пористые ароматические полимеры, полученные одностадийной сшивкой различных мономеров (нафталина, 1-нафтола, фенантрена, индола, карбазола и т.п.) по реакции Фриделя-Крафтса с применением метилаля в качестве внешнего сшивающего агента и безводного $FeCl_3$ в качестве катализатора сшивания. Полученные катализаторы были протестированы в реакции селективного гидрирования МБИ до МБЕ при атмосферном давлении водорода. В ходе экспериментов варьировались следующие условия: тип реактора (реактор качания или реактор перемешивания), природа растворителя (изопропанол, толуол, н-бутанол, декалин) и температура (от 40 °C до 90 °C). Было установлено, что применение палладиевых катализаторов, нанесенных на

аморфные пористые ароматические полимеры, позволяет достичь 95-96 % селективности по МБЕ при практически полной конверсии МБИ в отсутствии дополнительных модификаторов и независимо от природы растворителя, что делает данные катализаторы перспективными для дальнейшего исследования. Однако при этом было обнаружено, что способ перемешивания в комбинации с природой растворителя играют главную роль с точки зрения обеспечения высокой активности в случае гидрирования при атмосферном давлении молекулярного водорода. Влияние растворителя складывается из нескольких факторов. С одной стороны, при определенной температуре пары растворителя способны вытеснять водород из реакционного объема, препятствуя его диффузии в жидкую фазу. Другим фактором, обуславливающим влияние природы растворителя, может быть различная растворимость водорода: слишком низкая растворимость водорода может приводить к лимитации суммарной скорости процесса скоростью подвода водорода к катализатору. Еще одном влияющим параметром может быть диэлектрическая постоянная растворителя, и ранее нами уже наблюдались определенные зависимости скорости гидрирования МБИ от диэлектрической постоянной [9]. Но наиболее вероятным объяснением наблюдаемых различий в скоростях гидрирования при использовании различных растворителей следует считать адсорбционную способность растворителя на наночастицах металла-катализатора.

Список литературы

[1] Li X.-T., et al. // Chin. J. Catal. 2022. V. 43. P. 1991.
[2] Alaqarbeh M., Adil S.F., Ghrear T., et al. // Catalysts. 2023. V. 13. P. 1343.
[3] Cherkasov N., et al. // Appl. Catal. A: Gen. 2015. V. 497. P. 22.
[4] Huang L., et al. // Mol. Catal. 2020. V. 488. P. 110923.
[5] Bogdan V.I., et al. // Mendeleev Commun. 2020. V. 30. P. 462.
[6] Ren Z., et al. // J. Colloid Interface Sci. 2024. V. 653, Part A. P. 39.
[7] Nikoshvili L.Zh., et al. // Ind. Eng. Chem. Res. 2017. V. **56. P.** 13219.
[8] Nemygina N.A., et al. // Top. Catal. 2016. V. **59. P.** 1185.
[9] Nikoshvili L., et al. // Catal. Today. 2015. V. 241, Part B. P. 179.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 25-73-20071).

СД-3

БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ РАСТИТЕЛЬНОЙ БИОМАССЫ В ПЕРИОДИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ

Матвеева В.Г.[1], **Никошвили Л.Ж.**[1], **Лисичкин Д.Р.**[1], **Григорьев М.Е.**[1], **Манаенков О.В.**[1], **Тямина И.Ю.**[1], **Каичев В.В.**[2]

[1]Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской Академии Наук, Новосибирск, Россия
matveeva@science.tver.ru

Каталитическая переработка растительной биомассы с целью получения полупродуктов тонкого органического синтеза и компонентов жидких топлив на протяжении десятилетий и до настоящего времени является актуальной областью исследований [1-3]. К известным «соединениям-платформам», получаемым переработкой возобновляемого растительного сырья, относятся левулиновая кислота (ЛК), фурфурол (ФФ) и 5-гидроксиметилфурфурол, которые могут быть получены в одну стадию из растительных полисахаридов. Также, ценным платформенным соединением, получаемым на основе ЛК, является гамма-валеролактон (ГВЛ) – основа «валериановых» топлив.

Процессы трансформации растительных полисахаридов, а также получения ГВЛ и фурановых соединений идут в присутствии гетерогенных металлосодержащих катализаторов, которые для обеспечения высокой эффективности должны содержать активные центры различной природы. Внимание исследователей сосредоточено на изучении влияния кислотных/основных центров различной природы в составе каталитических систем. Например, варьирование льюисовской/бренстедовской кислотности оксидного носителя или внедрение кислотных функциональных групп (в частности, сульфогрупп) в состав углеродного носителя [4].

Одним из направлений является добавление второго металла-модификатора [5]. Таким образом, данная работа посвящена синтезу биметаллических каталитических систем, содержащих различные металлы (Ru, Pd, Ni, Co, Cu), а также их оксиды, нанесенные на цеолиты и полимерные носители (коммерческий сверхсшитый полистирол), и изучению их поведения в реакциях селективного гидрирования ЛК и ФФ.

Так, в реакции селективного гидрирования ФФ до фурфурилового спирта (ФС) было показано, что биметаллические каталитические системы на основе наночастиц палладия и меди, стабилизированных в порах сверхсшитого полистирола, проявили улучшенные характеристики по сравнению с монометаллическими аналогами. Частицы Pd-Cu со структурой сплава, наряду с высокой активностью, обеспечили 100 % конверсию ФФ и селективность по целевому продукту не менее 95 %. В реакции гидрирования ЛК до ГВЛ было установлено, что наиболее перспективными являются каталитические системы на основе наночастиц RuO_2, повысить активность которых возможно путем внедрения второго металла. В частности, было показано, что Co оказывает положительное влияние на распределение рутений содержащей активной фазы в порах сверхсшитого полистирола.

В случае алюмосиликатных носителей было установлено, что в реакции селективного гидрирования ФФ биметаллические системы (в частности, Ru-Co, Pd-Cu, Pd-Co) проявляют синергизм по сравнению с монометаллическими. Среди монометаллических систем наибольшей активностью и селективностью (выход ФС достигал 90 % за 120 мин реакции) характеризовались рутениевые катализаторы. При этом активность и селективность Ru-содержащих образцов зависела от кислотности цеолита. В ряду биметаллических систем наибольшая активность наблюдалась в случае кобальт содержащих образцов. В отличие от гидрирования ФФ, в случае реакции селективного гидрирования ЛК лучшими оказались монометаллическе рутениевые катализаторы, которые позволили синтезировать ГВЛ с выходом 100 % в мягких условиях (биметаллические образцы, нанесенные на цеолиты, не проявили синергизма). При этом важным фактором являлся способ предварительной обработки цеолита, который оказывал влияние на процесс осаждения рутений содержащей фазы.

Список литературы

[1] Yan W., Guan Q., Jin F. // iScience. 2023. V. 26. P. 107933.
[2] Li T. et al. // Fuel. 2020. V. 272. P. 117717.
[3] Cai J. et al. // Catalysts. 2024. V. 14. P. 499.
[4] Petcuta O.A. et al. // Catalysts. 2025. V. 15. P. 80.
[5] Kosydar R. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2024. V. 60. P. 293.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-79-00009).

СД-4

EQUILIBRIUM AND KINETIC PARAMETERS OF OXYGEN EXCHANGE IN MIXED IONIC ELECTRONIC CONDUCTING PEROVSKITE-RELATED OXIDE $La_2NiO_{4+\delta}$

Mario Fouad[1,2], Evgeniy Tropin[2], Rostislav Guskov[2], Ivan Kovalev[2], Marko Gongola[2], Mikhail Popov[2], Alexander Nemudry[2]

[1]Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia
[2]Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS, Novosibirsk, Russia
e-mail: m.gamil@g.nsu.ru

Introduction

Mixed ionic electronic conductors (MIEC) are increasingly recognized as essential materials for electrodes in solid oxide cell (SOC) applications, primarily due to their advantageous properties, which include high electronic conductivity, significant oxygen diffusivity, and favorable surface exchange coefficients. Among these materials, the oxygen-excess lanthanum nickelate $La_2NiO_{4+\delta}$ (LNO) has emerged as a particularly promising candidate for cathode applications in solid oxide fuel cells (SOFCs) [1, 2]. $La_2NiO_{4+\delta}$, an oxide with mixed conductivity, was chosen as the focus of this study. For the first time, a novel oxygen partial pressure relaxation (OPPR) [3] and quasi-equilibrium oxygen release (QEOR) [4] experimental setup (developed in our institute) was used to evaluate the equilibrium and kinetic parameters of the LNO-perovskite system concerning temperature and oxygen concentration.

Experiments

The powders of $La_2NiO_{4+\delta}$ was synthesized through citrate-nitrate technique. The characteristics and microstructural were studied by XRD and SEM respectively. Equilibrium properties and kinetic properties of $La_2NiO_{4+\delta}$ were studied by oxygen partial pressure relaxation and a quasi-equilibrium oxygen release.

Results and Discussion

Equilibrium isothermal diagram "lg pO_2-(4+δ)-T" of LNO was constructed. The equilibrium exchange rate (R_0) and chemical diffusion coefficient in oxide (D_{chem}) were determined. It was shown that the linear free-energy relationship is of the Brønsted–Evans–Polanyi type.

References

[1] L. Minervini, R.W. Grimes, J.A. Kilner, K.E. Sickafus, Oxygen migration in $La_2NiO_{4+\delta}$, J. Mater. Chem. 10 (10) (**2000**) 2349–2354.

[2] J.M. Bassat, P. Odier, A. Villesuzanne, C. Marin, M. Pouchard, Anisotropic ionic transport properties in $La_2NiO_{4+\delta}$ single crystals, Solid State Ionics 167 (3–4) (**2004**) 341–347.

[3] S.F. Bychkov, I.I. Gainutdinov, S.A. Chizhik, A.P. Nemudry, Novel oxygen partial pressure relaxation technique for study of oxygen exchange in nonstoichiometric oxides. The model of relaxation kinetics, Solid State Ionics 320 (**2018**) 297–304.

[4] I. Starkov, S. Bychkov, A. Matvienko, A. Nemudry, Oxygen release technique as a method for the determination of "δ–pO_2–T" diagrams for MIEC oxides, Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (12) (**2014**) 5527–5535.

Acknowledgement

The study was supported by the Russian Science Foundation Grant No. 21-79-30051-П.

СД-5

ПЛАТИНОСОДЕРЖАЩИЕ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ВОДОРОДО-ВОЗДУШНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Алексеенко А.А.[1], Беленов С.В.[1,2], Павлец А.С.[1,2], Алексеенко Д.В.[1,2], Астравух Я.В.[1], Криводубский Д.П.[1], Баян Ю.А.[1], Гутерман В.Е.[1]

[1]Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
[2]ООО «ПРОМЕТЕЙ РД», Ростов-на-Дону, Россия
an-an-alekseenko@yandex.ru

Одним из основных компонентов топливных элементов с твердополимерной мембраной, который обеспечивает высокоэффективное протекание токообразующих реакций в анодном и катодном пространствах, является электрокатализатор катализатор, представляющий собой наночастицы платины или ее сплавов, распределённые по поверхности углеродного носителя. Наряду с высокой активностью в токообразующих реакциях, катализатор должен характеризоваться и повышенной стабильностью в процессе эксплуатации. Разработка новых и оптимизация существующих методов получения высокоэффективных платиносодержащих катализаторов является актуальной задачей в области альтернативной энергетики и нанотехнологий. Выделяют несколько подходов к повышению активности и стабильности электрокатализаторов, связанных с управлением их структурно-морфологических характеристик в процессе синтеза. Для каждого из способов синтеза используется специализированное оборудование, в том числе различные химические реакторы и поточные системы синтеза. На базе лабораторий «Наноструктурные материалы для электрохимической энергетики» и «Технологии синтеза каталитически активных материалов» Южного федерального университета ведутся следующие работы по созданию электрокатализаторов для топливных элементов:

1. Для получения платиноуглеродных и биметаллических электрокатализаторов нами применяются стеклянные химические реакторы объемом от 100 до 2 000 мл. Большинство реакций протекает в водно-органической среде при температуре выше 70 °С в присутствии восстановителя – формальдегида, этиленгликоля [1-2]. При масштабировании технологии производства Pt/C катализаторов на базе ООО «ПРОМЕТЕЙ РД» нами применяются термостатируемые стеклянные химические реакторы объемом от 20 литров.

2. Получение платиноуглеродных катализаторов с использованием микрофлюидного реактора с газовой транспортной фазой является одним из новых направлений, реализуемых на базе нашей лаборатории. Преимущество реализации процесса заключается в точном контроле гидродинамических условий и параметров массопереноса на микроуровне, что обеспечивает высокую воспроизводимость процессов нуклеации и роста наночастиц. В применяемых микрофлюидных системах реагенты смешиваются в строго заданных пропорциях с минимальным временем диффузии, а однородность температурного профиля и ламинарный режим течения исключают локальные перепады концентраций.

3. Еще одним направлением исследований является реализация синтеза платиносодержащих наночастиц с контролем кинетики процесса посредством обработки изменения интенсивности цветового профиля раствора и потенциала индикаторного электрода [3]. В процессе работы планируется создать универсальный датчик in situ контроля кинетики восстановления ионов платины в проточных реакторах с возможностью автоматической коррекции параметров синтеза (pH, скорость подачи реагентов, температура).

При разработке новых или оптимизации существующих способов получения наноструктурных материалов мы также учитываем возможность масштабирования установки и технологического внедрения.

Список литературы

[1] Pavlets A., Pankov I., Moguchikh E., Suprun E., Gerasimov E., Guterman V., Alekseenko A. Deciphering nanostructural evolution of PtCu/C–N electrocatalyst via identical location transmission electron microscopy imaging: Gram-scale synthesis and superior activity in oxygen reduction reaction, Journal of Power Sources, 2024, 613, C. 234898.

[2] Danilenko M.V., Guterman V.E., Paperzh K.O., Alekseenko A.A., Pankov I.V. CO Effect on the Dynamics of Platinum Nucleation/Growth Under the Liquid-Phase Synthesis of Pt/C Electrocatalysts, Journal of the Electrochemical Society, 2022, 169, C. 92501.

[3] Guterman V., Paperzh K., Novomlinskaya I., Kantsypa I., Khudoley A., Astravukh Y., Pankov I., Nikulin A. Advances in Liquid-Phase Synthesis: Monitoring of Kinetics for Platinum Nanoparticles Formation, and Pt/C Electrocatalysts with Monodispersive Nanoparticles for Oxygen Reduction, Catalysts, 2024, 14, C. 728.

Благодарность

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности №FENW-2023-0016.

СД-6

ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НОВОГО АППАРАТА НА ОСНОВЕ ВИХРЕВЫХ КОНТАКТНЫХ УСТРОЙСТВ

Артамонов А.А., Абиев Р.Ш.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия
giperbol123@gmail.com

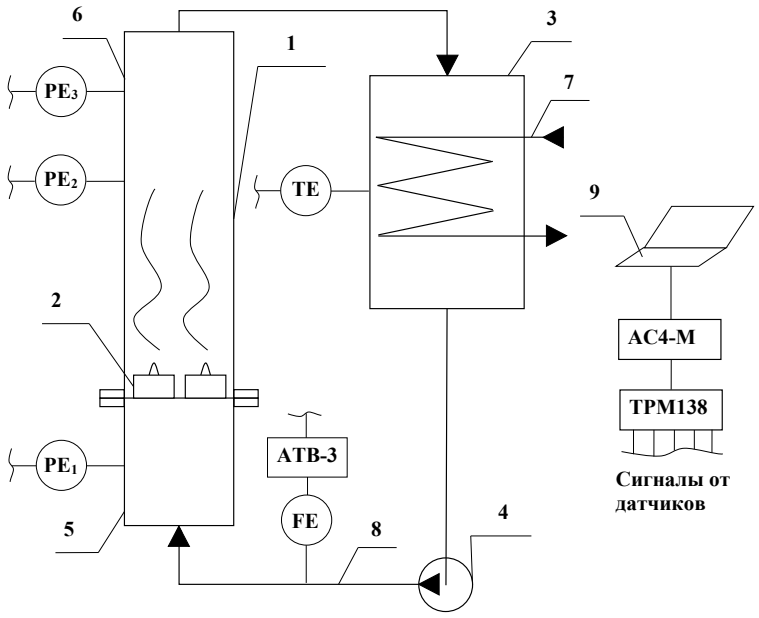
На сегодняшний день существует множество различных типов аппаратов для проведения газожидкостных процессов. Наиболее распространенными и хорошо изученными из них являются барботажные, газлифтные, пленочные и аппараты с механическим диспергированием газа [1]. Традиционное оборудование химических производств зачастую характеризуется неоптимальными условиями проведения процессов, что приводит к повышенным затратам энергии.

В последнее время интерес исследователей в области химической технологии и смежных областей привлекают новые типы оборудования на основе интенсивно закрученных потоков, ввиду их способности к интенсификации массо- и теплообменных процессов. Несмотря на интенсивное изучение и практическое внедрение оборудования с закрученными потоками, в настоящий момент не установлены надежные параметры масштабирования оборудования и процессов на их основе из-за недостаточного количества экспериментальных данных и, как следствие, отсутствия теоретической базы [2].

Целью данной работы является проведение гидродинамических исследований нового аппарата на основе вихревых контактных устройств (далее – ВКУ), описанного в [3], в т.ч. экспериментальное определение средней удельной скорости диссипации энергии ε_{av} для однородной жидкостной среды.

ВКУ представляет собой тарелку с закрепленными на ней аксиальными статическими завихрителями. В представленной работе исследованы несколько конфигураций ВКУ, различающиеся между собой количеством и/или взаимным расположением завихрителей.

Схема экспериментальной установки представлена на рисунке 1.



1 – колонна; 2 – ВКУ;
3 – бак-накопитель;
4 – насос;
5 – царга длиной 210 мм;
6 – царга длиной 585 мм;
7 – змеевик;
8 – трубопровод;
9 – ноутбук;
PE1-3 – датчики давления;
FE – расходомер жидкости; TE – термопара

Рисунок 1. Схема экспериментальной установки

В ходе работы выполнены исследования гидродинамики газожидкостного реактора нового типа с ВКУ, на данном этапе определены потери энергии при подаче сплошной жидкой фазы (воды) в диапазоне расходов $Q_ж$ = 4,38 – 24,9 м^3/ч. Экспериментально определены значения гидравлических потерь Δp, рассчитаны коэффициенты гидравлического сопротивления ζ и средние по объему удельные скорости диссипации энергии ε_{av} для исследованных конфигураций ВКУ. Средний коэффициент гидравлического сопротивления ζ_{av} для всех случаев находится в интервале от 0,9 до 1,3.

Значения средней по объему удельной скорости диссипации энергии ε_{av} для всех конфигураций ВКУ лежали в интервале от 0,21 до 88 Вт/кг. Максимальное значение ε_{av} максимальное значение ε_{av} оказалось до 27,5 и 35,2 раз больше, чем в аппаратах с мешалками и барботажных реакторах, соответственно. Полученные данные позволяют прогнозировать повышенную эффективность диспергирования газа и высокий коэффициент массоотдачи в системе жидкость-газ.

Список литературы

[1] Соколов В.Н., Доманский И.В. Газожидкостные реакторы. – Л.: Машиностроение (Ленинградское отделение), 1976. – 216 с.

[2] Kuzmin A.O. Confined multiphase swirled flows in chemical engineering //Reviews in Chemical Engineering. – 2021. – Т. 37. – №. 1. – С. 31-68.

[3] Абиев Р.Ш. Аппарат для непрерывного осуществления биохимических процессов в газожидкостных потоках. Патент на изобретение RU 2832056 C1, 18.12.2024. Заявка № 2024106856/35 от 15.03.2024.

СД-7

СРАВНЕНИЕ КОНВЕРСИЙ ТОЛУОЛА НА СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ С ПЛАТИНОЙ И ПАЛЛАДИЕМ В КАЧЕСТВЕ АКТИВНЫХ КОМПОНЕНТОВ

Баранов Д.В.[1,2], **Лопатин С.А.**[1,2]

[1]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2]*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*
E-mail: dmitriy.bdv@gmail.com

Целью данной работы является анализ способности стекловолокнистого катализатора к окислению толуола, для процессов экологически чистого сжигания углеводородных топлив.

2 образца СВК (рис. 1) были изготовлены с палладием в качестве активного металла, в качестве предшественника были выбраны динитро-диамминпалладий и тетрааммиакат-хлорид палладия; 2 образца изготовлены с платиной в качестве активного металла и предшественниками тетрааммиакат-хлорид и нитрат платины; 2 образца изготовлены путем смешения исходных растворов предшественников в пропорции 1:1, так, чтобы концентрация каждого метала была 1,25 г/л, затем стекловолокнистый носитель пропитывали и прокаливали в муфельной печи. Исследования проводились на лабораторном реакторе проточного типа. Расход реакционной смеси толуола и воздуха составлял 2,5 л/мин. на грамм катализатора. Проход по температуре был 100-450 °С, с подъемом и снижением температуры.

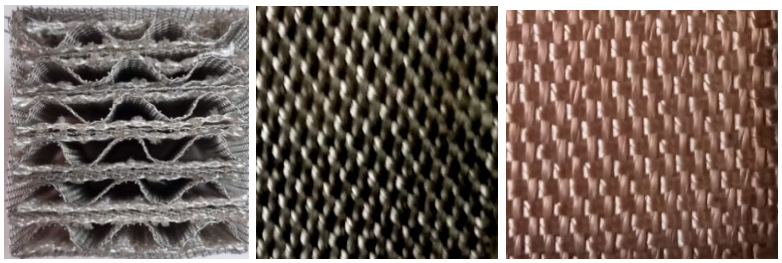


Рис. 1. Слева направо: структурированный каталитический картридж, внешний вид Pt/СВК, Pd/СВК

При сравнении конверсий комбинированных предшественников платины и палладия (Рис. 2, левый график), при смешении исходных растворов в пропорции 1:1 с содержанием по 1,25 г/л каждого из металлов, наиболее активен СВК синтезированный с использованием динитро-диаминпалладия и нитрата платины растворенных в этаноле, показавший 60 % конверсию при температуре 200 °С. Этот СВК проявляет активность практически сопоставимую с образцом,

синтезированным при использовании тетрааммиаката платины, который представлен на графике в качестве реперного. Образец с динитрадиамминпалладием и тетрааммиакатом растворенный в воде проявил наименьшую активность. Конверсия при 200 °С составляла 40 %. Такая низкая активность может быть объяснена низкой растворимостью динитродиамминпалладия в воде и образованию крупных частиц соли палладия в растворе при его остывании.

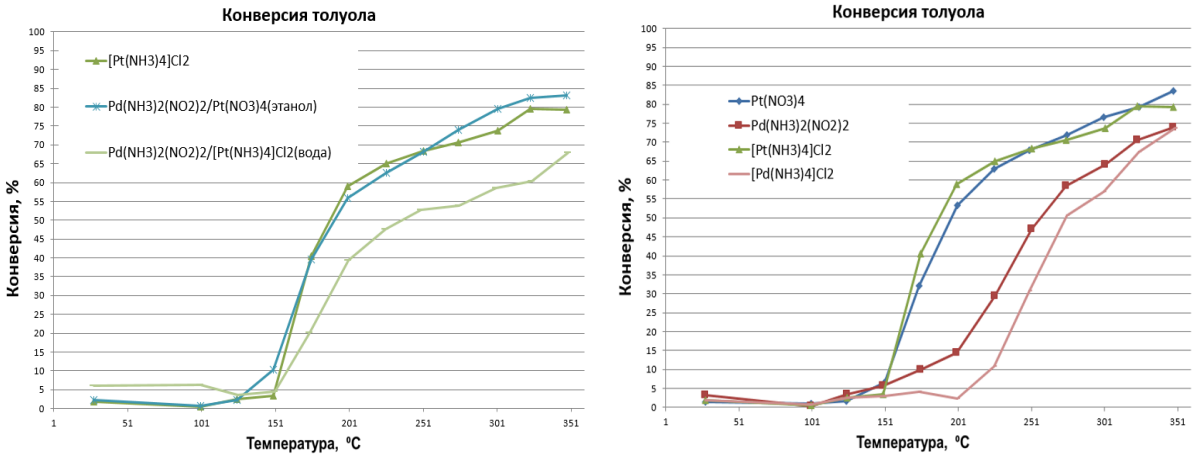


Рис. 2. Левый график – сравнение конверсий платинового катализатора и комбинации платина-палладий; правый график – сравнение конверсий СВК с различными предшественниками активных компонентов

При сравнении конверсий СВК с использованием различных предшественников платины и палладия (Рис. 2, правый график), наиболее выраженную активность проявляют образцы синтезированные с использованием платины в качестве активного металла, образец, синтезированный с использованием тетрааммиаката проявляет более выраженную активность в кинетической области протекания реакции по сравнению с нитратом платины. При дальнейшем росте температуры активность практически сопоставима. В обоих случаях при использовании палладия заметный рост активности наблюдается в диапазоне температур выше 200 °С. Из анализа полученных данных можно сделать вывод, что в реакции окисления толуола предпочтительным является платина в качестве активного металла.

Список литературы

[1] A.N. Zagoruiko, S.A. Lopatin. Structured Glass-Fiber Catalysts. Francis & Taylor group, CRC Press, 2019, 158 p., https://doi.org/10.1201/9780429317569.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 22-73-10015) и в рамках государственного задания ИК СО РАН (FWUR-2024-0037).

СД-8

КАТАЛИЗАТОРЫ УГЛЕКИСЛОТНОЙ КОНВЕРСИИ ЭТАНОЛА НА ОСНОВЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ОКСИДОВ

Беспалко Ю.Н.[1,2], Ханна С.А.[1], Еремеев Н.Ф.[1,2], Садыков В.А.[1,2]

[1]Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
bespalko@catalysis.ru

Конверсия углеводородов для получения водорода и синтез-газа является одним из важнейших процессов для промышленности и энергетики. Этанол является возобновляемым и нетоксичным сырьем, а его конверсия имеет меньшую энергоемкость по сравнению с метаном, кроме того, производство биоэтанола достигает промышленных масштабов [1]. Важным направлением декарбонизации является стратегия использования CO_2 в качестве окислителя для получения ценных химических продуктов. Сочетание этих двух важнейших экологических тенденций заключается в процессе углекислотной конверсии этанола (УКЭ), который является перспективным и отвечает последним требованиям «зеленых» технологий.

$$C_2H_5OH + CO_2 \leftrightarrows 3H_2 + 3CO, \qquad \Delta_r H^{\circ}_{298K} = 296.8 \text{ кДж/моль}$$

В зависимости от целей, процесс может осуществляться как в масштабных промышленных установках, так и в топливных элементах, и в мобильных установках, производящих чистый водород или синтез – газ [2]. Основной проблемой катализаторов УКЭ является их зауглероживание, что приводит к быстрой дезактивации. Увеличение активности и стабильности катализаторов может быть достигнуто при использовании оксидов с высокой кислородной подвижностью, например, высокоэнтропийных оксидов (ВЭО) со структурой перовскита и флюорита. Высокоэнтропийные оксиды содержат значительное количество компонентов, как правило, в эквимолярных концентрациях, причем, увеличение числа компонентов в системе сопровождается энтропийной стабилизацией химического и фазового состава [3]. В данной работе представлены 2 серии новых катализаторов УКЭ на основе ВЭО со структурой перовскита ($LaCr_{0.2}Mn_{0.2}Fe_{0.2}Co_{0.2}Ni_{0.2}O_3$, $LaTi_{0.2}Mn_{0.2}Fe_{0.2}Co_{0.2}Ni_{0.2}O_3$) и флюорита ($Ce_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Ti_{0.2}La_{0.2}O_2$, $Ce_{0.2}Zr_{0.2}Er_{0.2}Ti_{0.2}La_{0.2}O_2$, $Ce_{0.2}Zr_{0.2}Nb_{0.2}Ti_{0.2}La_{0.2}O_2$). По данным РФА все образцы оксидов, прокаленные при 700 °C, являются однофазными. Согласно данным ПЭМ, частицы исходных

перовскитов и флюоритов являются наноразмерными, а катионы равномерно распределены в оксидной структуре всех ВЭО. Углекислотную конверсию этанола проводили в проточном кварцевом реакторе при атмосферном давлении в диапазоне температур 600-750 °C. Для ВЭО образцов конверсия этанола при 700 °C составила 95-99 %. Конверсия углекислого газа не является полной даже при температуре 750 °C, данный факт можно объяснить влиянием побочных реакций между компонентами реакционной смеси в УКЭ, приводящих к образованию дополнительного количества углекислого газа. Максимальная стабильность (полное отсутствие дезактивации после 20 часов реакции) наблюдается для Ni катализатора на основе $LaCr_{0.2}Mn_{0.2}Fe_{0.2}Co_{0.2}Ni_{0.2}O_3$.

Список литературы

[1] Rubinsin NJ, Karim NA, Timmiati SN, Lim KL, Isahak WNRW, Pudukudy M. An overview of the enhanced biomass gasification for hydrogen production. Int J Hydrogen Energy 2024;49(A):1139-64.

[2] Shafiqah M-NN, Siang TJ, Kumar PS, Ahmad Z, Jalil AA, Bahari MB, et al. Advanced catalysts and effect of operating parameters in ethanol dry reforming for hydrogen generation. A review. Environ Chem Lett 2022;20(3):1695-718.

[3] Albedwawi SH, AlJaber A, Haidemenopoulos GN, Polychronopoulou K. High entropy oxides-exploring a paradigm of promising catalysts: A review. Materials & Design 2021; 202: 109534.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-23-20119.

СД-9

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТРЕНАЖЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Бурухина О.В.[1,2], Кривоносов А.А.[2], Ромаденкина С.Б.[1], Кузьмина Р.И.[1], Аврамов М.В.[3]

[1]ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия
[2]АО «ИНИУС», Саратов, Россия
[3]ООО «Газпром трансгаз Саратов», Саратов, Россия
burukhinaov@inius.ru

Предприятия химической и нефте- и газохимической промышленности относятся к объектам повышенной опасности с высокой вероятностью возникновения чрезвычайных ситуаций, аварий и несчастных случаев. Основными причинами возникновения аварийных ситуаций чаще всего являются: износ оборудования и производственных сооружений, низкий уровень квалификации персонала, нарушение техники безопасности. К специалистам, обслуживающим промышленную установку, должны предъявляться серьезные требования по освоению техники безопасности, норм технологического режима и отработке действий по ПЛАС. Для обучения операторов ведению технологического процесса, штатного останова и запуска установки, а также для отработки действий в случае возникновения аварийных ситуаций на производстве внедряются компьютерные тренажерные комплексы (КТК) и разработанные для них сценарии обучения. Ранее нами опубликованы работы, касающиеся разработки математической модели центробежного насоса [1] и моделирования аварийных ситуаций [2].

Созданная в АО «ИНИУС» система моделирования и разработки тренажеров «Универсальный тренажерный комплекс» (УТК) [3] состоит из программных модулей, предназначенных для разработки высокоточных математических моделей технологических процессов (ТП) и основанных на них КТК для оперативного и технологического персонала предприятий. Все модули интегрированы между собой и представляют единый программный комплекс, обеспечивающий разработку моделей ТП, эмуляции (или интеграцию с реальной) системы РСУ/ПАЗ, специализированной автоматизированной обучающей системы (АОС) для теоретической подготовки персонала, сценариев обучения, интерфейса (в т.ч. 3D и VR) полевых операторов. УТК включает в себя

все необходимые функции инструктора обучения, развитые системы автоматического оценивания, консультирования, протоколирования и другие атрибуты, обеспечивающие высокую эффективность подготовки персонала. С 1999 года АО «ИНИУС» разработано и внедрено на предприятия (ЛУКОЙЛ, СИБУР, Роснефть, Газпромнефть, НОВАТЭК, Невинномысский Азот, Нижнекамскнефтехим и др.) более 90 тренажерных комплексов.

В настоящее время на кафедре нефтехимической и техногенной безопасности Института химии СГУ внедрен КТК реакторного блока производства НАК ООО «Саратоворгсинтез» (ПАО «ЛУКОЙЛ»). КТК разработан АО «ИНИУС» (по заказу ООО «Саратоворгсинтез») и включает в себя полную эмуляцию установки (систем РСУ/ПАЗ, полевого оператора, включая VR). Тренажер полностью воспроизводит работу реального реактора на заводе, студенты могут детально изучить проходящие в нем реакции, изменение физико-химических параметров при изменении условий процесса, кинетику процесса, освоить управление технологическим процессом и научиться предотвращать чрезвычайные ситуации или действиям при их возникновении. Тренажер применяется при изучении следующих дисциплин программ бакалавриата и магистратуры (направление Химическая технология): технология нефтехимического и органического синтеза, общая химическая технология, процессы и аппараты химической технологии, системы управления химическими технологическими процессами и др.

Список литературы

[1] Разработка математической модели центробежного насоса для работы в составе компьютерного тренажерного комплекса**.** Грачева Ю.А., Кривоносов А.А., Никифоров И.А., Бурухина О.В. // Современные проблемы и пути их решения в науке, производстве и образовании. 2019. № 8. С. 48-51.

[2] Моделирование аварийных ситуаций на тренажерном комплексе производства ароматических углеводородов. Панкратов И.С., Кривоносов А.А., Бурухина О.В., Никифоров И.А. // Современные проблемы и пути их решения в науке, производстве и образовании. 2019. № 8. С. 134-138.

[3] Применение программных средств универсального тренажерного комплекса для повышения эффективности обучения персонала химических и нефтехимических производств /Кривоносов А.А., Агафонов С.А., Мучкаев В.Ю. и др. // Безопасность труда в промышленности. 2020. № 3. С. 86-92.

СД-10

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К СОРБЦИОННОМУ УЛАВЛИВАНИЮ CO_2 ИЗ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Веселовская Ж.В., Шешковас А.Ж., Селищев Д.С., Козлов Д.В.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия,
kdv@catalysis.ru

Задача сокращения выбросов парниковых газов актуальна для всего мира, в том числе для РФ. С целью снижения уровня CO_2 в атмосфере разрабатываются системы для его сорбции из различных газовых источников (дымовые газы, биогаз, атмосферный воздух). Эти источники характеризуются разным содержанием CO_2 и других компонентов, способных оказать негативное влияние на работу сорбента. Углекислый газ, извлечённый при помощи сорбента из газового источника, можно в дальнейшем захоронить или использовать в промышленности или сельском хозяйстве. Кроме того, в последнее время активно развиваются методы каталитической конверсии CO_2 в ценные химические продукты.

Сорбционные методы улавливания CO_2 можно разделить на два основных вида: адсорбционные и абсорбционные. Адсорбция – это процесс концентрирования молекул компонента газовой смеси на границе раздела фаз твердого материала с развитой внутренней поверхностью (адсорбента) и газа. Абсорбция – концентрирование молекул вещества из газовой смеси в объеме материала-поглотителя (абсорбента). Адсорбенты и абсорбенты по силе связывания CO_2 на поверхности делятся на физические (слабое связывание) и химические (сильное связывание). Наибольшее внимание исследователей сейчас привлекают твёрдые и жидкие химические абсорбенты (хемосорбенты) CO_2, так как эти материалы позволяют проводить процесс улавливания при низких парциальных давлениях CO_2, сорбируя его даже из воздуха [1].

Выбор материала для улавливания углекислого газа во многом зависит от температуры, при которой предполагается проводить процесс сорбции CO_2, а также от условий регенерации материала [1]. На данный момент наибольшее развитие получили низкотемпературные абсорбционные технологии улавливания CO_2 водно-аминовыми растворами. Их недостатками являются коррозионная активность аминов, их высокая летучесть и нестабильность в кислородсодержащей среде. Для решения проблемы с уносом летучего амина

при использовании традиционных водно-аминовых растворов предлагается использовать нелетучие аминосодержащие хемосорбенты, имеющие структуру полимера или расплава органической соли (ионной жидкости), для которых характерны низкие температуры регенерации после взаимодействия с CO_2 (около 100 °C). Однако большинство таких материалов имеют очень высокую вязкость [2], что может сильно снижать скорость сорбции CO_2, вследствие диффузионных затруднений. Для ускорения процесса сорбции CO_2 обычно предлагается либо растворять такие аминосодержащие соединения в менее вязких, но нелетучих растворителях [2], либо наносить их на пористые матрицы для диспергирования активного компонента [1].

Альтернативой аминосодержащим композитным материалам являются низкотемпературные сорбенты на основе карбоната калия, который является недорогим и широкодоступным химическим реактивом. Карбонат калия способен поглощать CO_2 в присутствии паров воды: $K_2CO_3 + CO_2 + H_2O = 2KHCO_3$. При использовании K_2CO_3 в чистом виде скорость поглощения CO_2 очень мала, поэтому его диспергируют в порах носителя. Карбонатная технология позволяет извлекать CO_2 из влажных газовых смесей с высоким содержанием кислорода, поскольку K_2CO_3 не подвержен окислению. Основной недостаток композитных сорбентов на основе K_2CO_3 – достаточно высокие энергозатраты на термическую регенерацию материала.

В целом, выбор сорбентов CO_2 для промышленного применения должен определяться оптимальным балансом между себестоимостью материала и его физико-химическими характеристиками, определяющими энергоэффективность процесса улавливания CO_2 и срок службы сорбента.

Список литературы

[1] Wang J., Huang L., Yang R., Zhang Z., Wu J., Gao Y., Wang Q., O'Hare D., Zhong Z. Recent advances in solid sorbents for CO_2 capture and new development trends // Energy Environ. Sci. – 2014. – V. 7. – N 11. – P. 3478-3518.

[2] Chen F.F., Huang K., Fan J.P., Tao D.J. Chemical solvent in chemical solvent: A class of hybrid materials for effective capture of CO_2 // AIChE Journal. – 2018. – V. 64. – N. 2. – P. 632-639.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0036).

СД-11

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ И ТЕРМОДИНАМИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА В КОБАЛЬТИТЕ ЛАНТАНА-СТРОНЦИЯ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА, ДОПИРОВАННОГО НИОБИЕМ

Власов С.А.[1,2], **Гонгола М.И.**[1], **Попов М.П.**[1], **Немудрый А.П.**[1]

[1]ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Новосибирский государственный университет, НГУ, Новосибирск, Россия
s.vlasov1@g.nsu.ru

Материалы на основе оксидов со смешанной ион-электронной проводимостью (СИЭП оксиды) представляют интерес в качестве материалов для окислительного катализа, кислородных мембран, а также в качестве электродных материалов для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Актуальной проблемой для ТОТЭ является поиск подходящих материалов, которые могут использоваться в качестве катодных. Важными характеристиками катодного материала для ТОТЭ, помимо электропроводности, является термодинамическая стабильность в рабочем диапазоне температур и парциальных давлений кислорода, высокая каталитическая активность в реакции восстановления кислорода, а также коэффициент диффузии кислорода в объеме катодного материала.

Перспективным материалом на основе СИЭП оксида, обладающим высокой электропроводностью и скоростью кислородного обмена, является $La_{0.6}Sr_{0.4}CoO_{3\delta}$ (LSC). Однако в рабочих условиях ТОТЭ LSC нестабилен, а также обладает слишком высоким коэффициент термического расширения, несовместимым с наиболее популярными материалами электролитов. Возможным решением данной задачи является легирование высоковалентными катионами (например Nb^{+5}, Mo^{+6}).

В рамках работы рассматривается СИЭП оксид состава $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{1-x}Nb_xO_{3-\delta}$ (x = 0-0.15). Кинетические характеристики изучались с помощью метода релаксации парциального давления кислорода (РПДК) [1], а термодинамические характеристики – с помощью метода квазиравновесного выделения кислорода (КРВК) [2].

Список литературы

[1] Bychkov S.F. et al. Novel oxygen partial pressure relaxation technique for study of oxygen exchange in nonstoichiometric oxides. The model of relaxation kinetics // Solid State Ion. Elsevier B.V., 2018. Vol. 320. P. 297–304.

[2] Starkov I. et al. Oxygen release technique as a method for the determination of «δ-pO2-T» diagrams for MIEC oxides // Physical Chemistry Chemical Physics. 2014. Vol. 16, № 12. P. 5527–5535.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-30051-П, https://rscf.ru/project/21-79-30051/.

СД-12

ВЫСОКОПРОЧНЫЕ НИКЕЛЕВЫЕ ЯЧЕИСТО-ПОРИСТЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ

Войтик О.Л., Делендик К.И., Коляго Н.В.

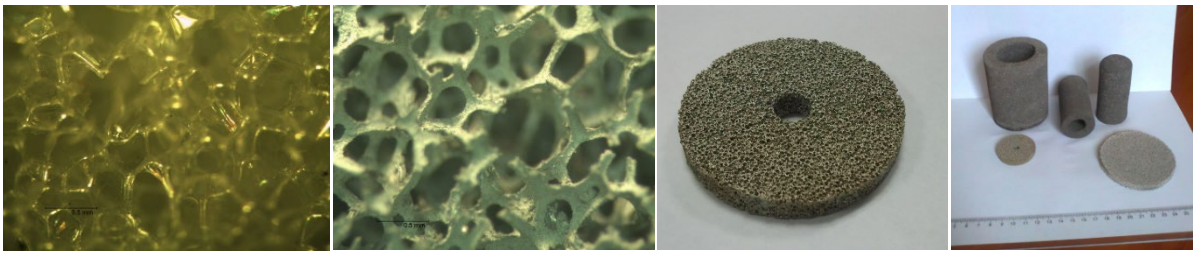
Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь
voitik@itmo.by

Промышленные катализаторы конверсии метана на основе никеля и его оксида практически всегда применяются в высокодисперсном виде: частицы катализаторов распределяются на высокопористых субстратах (силикагели, окись алюминия, окись титана и др.), что обеспечивает максимально возможную площадь их активной поверхности [1]. Хрупкость применяемых носителей (механическая прочность носителей марки АПК на истирание не превышает 0,6 % согласно ТУ 113–03–3006–91) является причиной их разрушения при проведении каталитических процессов в динамическом потоке жидкости или газа, что приводит к загрязнению продуктов реакции фрагментами катализаторов и к необходимости осуществления затратных операций их удаления. Кроме того, керамические носители катализаторов имеют низкую теплопроводность (0,0012 Вт/(м·К), для стали 52 Вт/(м·К)), что обуславливает неравномерность распределения тепла по сечению реактора и, соответственно, нарушает нормальное течение процесса.

В качестве альтернативы разработаны металлические ячеисто-пористые катализаторы конверсии метана, представляющие собой пластины никелевой губки, полученные химикогальваническим методом.

В качестве матрицы для получения металлических ячеисто-пористых катализаторов был использован вспененный полиуретан. Процесс состоял из химического активирования, нанесения электропроводного подслоя, нанесения химико-гальванического покрытия, удаления полиуретана с помощью отжига в атмосфере «дисс-аммиака» (N_2 + H_2) при температуре 800 °С в течение одного часа.

Удельная поверхность катализатора (рисунок 1), определенная по методу Брунауэра, Эммета, Теллера с помощью порозиметра Micromeritics ASAP 2020, может составлять 10-150 $м^2/г$ ($м^2/см^3$) в зависимости от условий нанесения металла.



а б в г

Рисунок 1. Фрагмент поверхности вспененного полиуретана до (а) и после (б) нанесения никеля; каталитические элементы после мехобработки (в, г)

Исследованы физические и механические характеристики ячеисто-пористых никелевых катализаторов, определены их плотность (1,5-1,8 г/см^3), пористость (общая пористость 75 % и открытая пористость 65 %), твердость по Бринеллю (30-35), пределы прочности при растяжении (12,6-16,8 МПа), сжатии (8,9-11,6 МПа), на изгиб (34-42 МПа). Изучен процесс деградации катализаторов в зависимости от условий эксплуатации (рабочие давления и температуры; резкая смена температуры; различные газовые среды). Установлено, что по активности (количество произведенного продукта, отнесенного на единицу объема катализатора), по прочностным характеристикам разработанные катализаторы выгодно отличаются от традиционно используемых, что позволяет применять их в виде легкосъемных картриджей с невысоким динамическим сопротивлением потоку реагентов/реактантов, а также создавать установки с минимальным градиентом температуры по сечению реактора ввиду значительной теплопроводности катализаторов.

Проведены исследования процессов воздушной и паровой конверсии метана с использованием данных катализаторов. Показано, что они превосходят традиционно используемые катализаторы по выходу водорода при меньших энергозатратах. Комплекс свойств разработанных катализаторов предполагает их применение в малогабаритных, в том числе, бортовых, реакторах конверсии метана.

Список литературы

[1] Дульнев А.В., Обысов А.В. Опыт промышленной эксплуатации и пути совершенствования нанесенных Ni-катализаторов риформинга природного газа // Катализ в промышленности. 2010. №4. С. 74–86.

СД-13

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{1-x}Mo_xO_{3-\delta}$

Гонгола М.И., Попов М.П., Немудрый А.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия, gongola@solid.nsc.ru

Твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) активно исследуются в течение последних 40 лет. Большой интерес к ним вызван высокой эффективностью прямого преобразования химической энергии топлива в электрическую энергию и возможностью использования различного вида топлива.

Характеризация скорости поверхностных реакций оксидов со смешанной кислород-электронной проводимостью (СКЭП – оксиды) с кислородом из газовой фазы является важным вопросом с точки зрения применения таких соединений в качестве катодных материалов для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Скорость реакции поверхностного обмена зависит от состава приповерхностного слоя, который определяется диффузией кислорода в твердом объеме. Поэтому для корректного описания поведения системы необходимо применять математическую модель, учитывающую вышеперечисленные процессы и учитывающую геометрию реактора и образца. Метод релаксации парциального давления кислорода (РПДК) позволяет определять кинетические характеристики кислородного обмена оксидов в смешанном режиме [1].

В рамках данной работы исследуются закономерности влияния концентрации молибдена на кинетические характеристики кислородного обмена в перовскитоподобном кобальтите лантана-стронция ($La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{1-x}Mo_xO_{3-\delta}$, x = 0.0 – 0.1), синтезированном твердофазным методом, с целью установления оптимальных параметров состава для применения в качестве катодного материала ТОТЭ.

Список литературы

[1] S.A. Chizhik, S.F. Bychkov, B.V. Voloshin, M.P. Popov, A.P. Nemudry Development of the Crank's diffusion model for the case of material-gas feedback regime in gas flow reactors. Advanced methodology of oxygen partial pressure relaxation for the kinetics of oxygen exchange in nonstoichiometric oxides // Chemical Engineering Journal, 2021. Vol. 420.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-30051-П https://rscf.ru/project/21-79-30051/

СД-14

БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ Pt-СОДЕРЖАЩИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ РЕАКЦИИ ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ CO

Горлова А.М.[1,2], Бушуев В.О.[1,2], Рогожников В.Н.[1], Потемкин Д.И.[1,2]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия, bic@catalysis.ru
[2]Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия, gorlova@catalysis.ru

На сегодняшний день наиболее доступным и экономически целесообразным способом получения водорода является паровая конверсия природного газа, которая, однако, помимо целевого продукта, приводит к образованию оксидов углерода – CO и CO_2. Для выделения чистого водорода необходимо проведение комплекса каталитических и сорбционных процессов. В частности, для удаления из водородсодержащего газа CO реализуется процесс его паровой конверсии (ПК CO), в результате чего происходит его окисление до CO_2, который возможно удалить сорбционными методами. Несмотря на наличие двустадийного промышленного процесса ПК CO, традиционно реализующегося на Fe-Cr и Cu-Zn катализаторах, проведение этой реакции в компактных и мобильных установках получения водорода всё еще требует разработки высокоэффективных катализаторов, поскольку промышленные системы обладают низкой толерантностью к примесям в подаваемом газе, требовательны к условиям активации и самого процесса и имеют узкие рабочие диапазоны температур.

Платиновые катализаторы, нанесенные на CeO_2 или смешанные оксиды на его основе, рассматриваются как одни из наиболее перспективных вариантов для использования в установках получения водорода малых масштабов [1]. В ходе работы было изучено влияние добавки второго нанесенного металла на активность и селективность Pt-M/$Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ (M = Fe, Cu, Re, Ni, Co) в ПК CO в смеси, имитирующей продукт паровой конверсии метана, в диапазоне температур 200-350 °C при атмосферном давлении. В частности, было показано, что при содержании Pt 1.9 масс. % и мольном соотношении Pt:M = 1:1 температура максимальной термодинамически возможной конверсии CO возрастала в ряду Re < Ni ≈ Co ≈ Fe ≈ без M, при этом в случае M = Cu равновесные значения конверсии CO не были достигнуты. В то же время, количество CH_4, образующегося в результате побочной реакции метанирования

оксидов углерода, увеличивалось в ряду Fe << Cu ≈ Co < без M < Re << Ni. Для систем с M = Fe и Re было изучено влияние порядка нанесения металлов и атмосферы термической обработки предшественников нанесенной фазы на состав и каталитические свойства в ПК CO [2]. С помощью метода *in situ* рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии было исследовано электронное состояние поверхности Pt-Fe катализатора в восстановительных условиях, моделирующих реакционную среду ПК CO. В частности, было зафиксировано восстановление Pt^{2+}/Pt^{4+} до Pt^0, Fe^{3+} – до состояния Fe^{2+}. Кроме того, наблюдали восстановление части поверхностных катионов Ce^{4+} до Ce^{3+}, что, по-видимому, связано с образованием кислородных вакансий на поверхности $Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$, которые являются частью активных центров для катализа реакции ПК CO.

Список литературы

[1] Pal D.B., Chand R., Upadhyay S.N., Mishra P.K. // Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2018. V. 93. P.549-565.

[2] Gorlova A.M., Rogozhnikov V.N., Pechenkin A.A., Nikulina I.E., Potemkin D.I. // Nanobiotechnology Reports. 2023. V.18. NS2. P.S279-S285.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 21-73-20075.

СД-15

ОКСИДЫ КОБАЛЬТИТА СТРОНЦИЯ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА: ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ ВЫСОКОВАЛЕНТНЫМИ КАТИОНАМИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА

Гуськов Р.Д., Попов М.П., Ковалев И.В., Гонгола М.И., Фуад М., Немудрый А.П.

Институт химии твердого тела и механохимии, Кутателадзе, 18, Новосибирск, Россия,
E-mail: rostislav.guskov@yandex.ru

Сложные оксиды со смешанной ион-электронной проводимостью, характеризующиеся структурой перовскита, привлекли значительное внимание научного сообщества благодаря своим необычным физическим и химическим свойствам, которые открывают множество возможностей для применения в различных отраслях промышленности и энергетики [1–2]. Эти соединения характеризуются многогранным набором свойств, включая выраженное магнитосопротивление, сегнетоэлектричество, высокотемпературную сверхпроводимость, а также исключительную каталитическую активность и кислородную проводимость. Такой обширный набор характеристик делает эти материалы перспективными для использования в различных областях химической промышленности и энергетики, в частности в качестве электродов в твердооксидных топливных элементах. Однако успешный выбор и интеграция этих оксидов в технологию топливных элементов требует глубокого понимания их внутренних свойств, в частности механизмов, регулирующих кислородный обмен между этими оксидами и газовой фазой. Для того чтобы эффективно регулировать функциональные характеристики катодной композиции, необходимо получить детальное представление о механизмах, лежащих в основе реакции кислородного обмена.

Для данного исследования в качестве объекта исследования был выбран перовскитоподобный оксид кобальта-стронция, модифицированный высоковалентными катионами Ta/Nb/Mo/W. Семейство кобальтитов обладает отличительными характеристиками, связанными с динамикой кислородного обмена с газовой фазой, которые, в частности, проявляются в виде как структурных изменений, так и изменений в механизмах, регулирующих внедрение и выделение кислорода в определенных условиях.

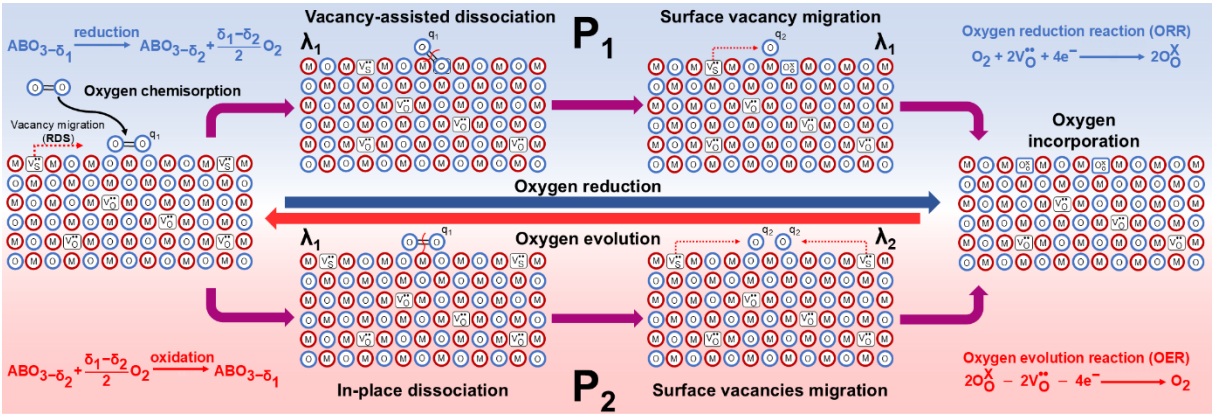


Рисунок 1. Иллюстрация предполагаемого изменения механизма кислородного обмена в перовскитах семейства кобальтитов структуры $ABO_{3-\delta}$

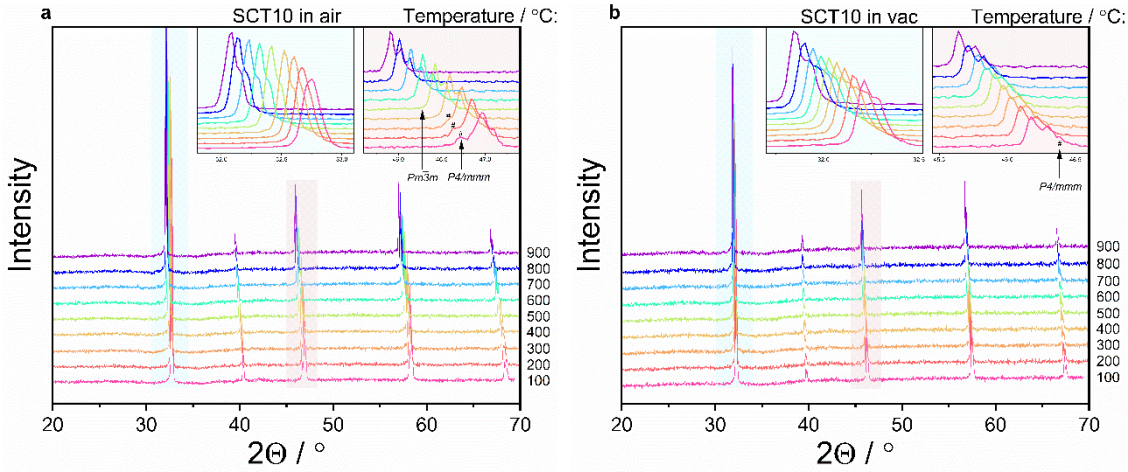


Рисунок 2. Высокотемпературные in situ дифрактограммы состава $SrCo_{0.9}Ta_{0.1}O_{3-\delta}$ на воздухе (a) и в вакууме (b).

Список литературы

[1] S.B. Adler, J.A. Lane, B.C.H. Steele, Electrode Kinetics of Porous Mixed-Conducting Oxygen Electrodes, J. Electrochem. Soc. 143 (1996) 3554–3564. https://doi.org/10.1149/1.1837252.

[2] Y. Teraoka, H.-M. Zhang, S. Furukawa, N. Yamazo, Oxygen permeation through perovskite-type oxides, Chem. Lett. 14 (1985) 1743–1746. https://doi.org/10.1246/cl.1985.1743.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-30051-П.

СД-16

ГЛУБОКОЕ ОКИСЛЕНИЕ ПРОПАНА И ОКСИДА УГЛЕРОДА, КАТАЛИЗИРУЕМОЕ НАНОКОМПОЗИТАМИ НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТ-МАРГАНЦА, НАНЕСЕННЫХ НА ПРИРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ: ОПОКУ И ДИАТОМИТ

Джусупкалиева Р.И.[1*], Пугачева Е.В.[2], Быстрова И.М.[2], Борщ В.Н.[2], Помогайло С.И.[2,4], Рухов А.В.[3]

[1]Западно-Казахстанский аграрно-технический университет им. Жангир хана, Республика Казахстан, Уральск, E-mail: rozaid2@mail.ru*
[2]Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова РАН, Россия, Черноголовка, 142432, Московская обл.
[3]Кафедры: «Химия и химические технологии» (1), «Технологии и оборудование пищевых и химических производств», ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет», Россия, Тамбов
[4]Всероссийский институт научной и технической информации РАН, 125190, Москва, Россия
e-mail: pom_lana@ism.ac.ru

Для получения нанокомпозитов нами использован метод низкотемпературного горения смесей нитратов кобальта и марганца с природными материалами (опокой и диатомитом месторождений Республики Казахстан) с добавлением мочевины как горючего и восстановителя. До синтеза образцы носителей подвергали предварительной обработке с целью активации: промывке (и обозначены как *Опока_1, Диатомит_1*), промывке и обжигу при 500 °С (*Опока_2, Диатомит_2*), обработке соляной кислотой, обработке соляной кислотой и обжигу при 500 °С (*Опока-3, Диатомит-3*). Приготовленные нанокомпозиты в качестве катализаторов исследованы в процессе глубокого окисления оксида углерода и пропана с использованием модельной смеси 0.2 об. % пропана, 0.5 об. % оксида углерода (II), 1.3 об. % кислорода (что соответствует коэффициенту избытка кислорода $\alpha \approx 1{,}0$), а оставшуюся часть составлял азот. Показано влияние различных видов обработки носителя на активность катализаторов [1]. Эксперименты проводили при различных объемных скоростях газовой смеси (2,0, 1,5, 1,0 и 0,5 л/мин) в температурном диапазоне 250–350 °С. На основе экспериментальных кинетических данных рассчитаны эффективные энергии активации при окислении CO, и глубоком окислении пропана.

Полученные на основе диатомита катализаторы демонстрировали достаточно высокую активность как в реакции окисления CO, так и в процессе

глубокого окисления пропана. Конверсия CO достигала высоких значений (98.4 % и 98.3 %) при 400 °C в присутствии катализаторов: *5Co-5Mn/Диатомит-2* и *5Co5Mn/Диатомит-4*, соответственно. При окислении пропана наблюдали подобную активность этих же катализаторов, при этом конверсия пропана достигала 91 % и 89 % при 400 °C.

Обнаружено, что катализаторы на основе диатомита более активны в окислении CO и пропана, чем подобные катализаторы на основе опоки. Выполнен расчет кинетических зависимостей реакций окисления на самом активном катализаторе *5Co-5Mn/Диатомит-3*. Таким образом, установлено, что диатомит является эффективным носителем для катализаторов глубокого окисления углеводородов и монооксида углерода.

Список литературы

[1] Jussupkaliyeva R.I., Bystrova I.M., Pomogailo S.I., Borshch V.N. Synthesis of Co–Mn catalysts for deep oxidation of CO and propane based on natural opoka by low-temperature combustion. *Powder Metallurgy and Functional Coatings.* 2024. Vol.18. No.6. P.17–27. https://doi.org/10.17073/1997-308X-2024-6-17-27.

Благодарность

Работа выполнена по теме Госзадания ИСМАН № 125021201985-8. Д.Р.И. благодарна за финансовую поддержку Министерство науки и высшего образования Республики Казахстан.

СД-17

БИОСТЕКЛО SiO_2-CaO С МОДИФИЦИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Домрачев И.В., Лыткина Д.Н., Курзина И.А.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия, larson42@yandex.ru

Современные исследования в области костной регенерации сосредоточены на создании пористых биоматериалов, которые моделируют параметры натуральной кости и обеспечивают ее успешную остеоинтеграцию с имплантатом. В этом контексте материалы на основе биостекла (БС), обладающие высокой биоактивностью, демонстрируют перспективные результаты для восстановления костных дефектов. Одним из ключевых направлений является функционализация БС биологически активными веществами с целью управления его взаимодействием с биологической средой. Однако проблема заключается в недостаточной изученности механизмов взаимодействия этих веществ с поверхностью материалов, что ограничивает возможности целенаправленной модификации. Целью работы являлся золь-гель синтез мезопористых частиц биостекла системы SiO_2-CaO, их модификация аминокислотами и кукурбитурилами и последующее комплексное исследование физико-химических и биологических свойств полученных композитов. В ходе синтеза, проводившегося с использованием ТЭОС, нитрата кальция и ЦТАБ в качестве ПАВ, были получены четыре серии образцов, отличающиеся временем созревания в реакционной среде (от 2 до 48 часов) для изучения влияния этого параметра на морфологию. Модификация поверхности готовых частиц проводилась методом пропитки по влагоемкости водными растворами глицина и кукурбитурилов. Комплексная характеристика материалов методами СЭМ, РФА и анализа изотерм адсорбции-десорбции азота подтвердила формирование сферических аморфных частиц с мезопористой структурой (тип IVa по IUPAC), причем было установлено, что увеличение времени синтеза приводит к росту размера частиц и изменению их морфологии. Наибольшая удельная поверхность была характерна для образца с преобладанием мезопор. Тесты на жизнеспособность макрофагов в присутствии образцов показали, что модифицирование биостекла хотя и снижает жизнеспособность клеток в присутствии материалов, но оставляет ее на достаточно высоком уровне (75-

80 %). На основании проведенного исследования установлено, что разработанная методика золь-гель синтеза позволяет получать мезопористые частицы биостекла системы SiO_2-CaO со сферической морфологией и контролируемыми текстурными характеристиками. Модификация поверхности глицином, несмотря на незначительное снижение жизнеспособности макрофагов до 75-80 %, подтверждает принципиальную биосовместимость материалов и их потенциал для применения в регенеративной медицине. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности дальнейших исследований по оптимизации концентрации биологически активных соединений и изучению остеогенной активности разработанных композитов.

Список литературы

[1] Лыткина, Д., Зубовская, А., Садыков, Р., Машайехан, Ш., Курзина, И.А. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2025. V. 22(3), P. 312–323.

[2] S.M. Barinov, V.S. Komlev -M.: Nauka, 2005. –189 p.

[3] Sevastyanov V.I. – M.: MIA, 2011. –544 p.

Благодарность

Исследование проведено при финансовой поддержке гранта РНФ № 24-43-20044.

СД-18

ПОЛУЧЕНИЕ ГЛЮКОНОВОЙ И ГЛЮКАРОВОЙ КИСЛОТ НА Ni-Co-Fe ЭЛЕКТРОДЕ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ

Домрачева Л.В., Щербакова-Санду М.П., Курзина И.А.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия, lvdomracheva42@gmail.com

Перспективные направления фармакологии, такие как создание биосовместимых полимеров и новых терапевтических агентов, обуславливают интерес к получению глюконовой и глюкаровой кислот из возобновляемой глюкозы. Эти кислоты являются ценными субстанциями: глюконовая − для систем доставки лекарств, а глюкаровая проявляет противоопухолевую активность. Электрохимическое окисление представляется экологичным и селективным методом для их синтеза, что делает данное исследование актуальным для медицинской химии и фармацевтики [1, 2]. Настоящая работа посвящена исследованию возможностей электрохимической переработки глюкозы в глюконовую и глюкаровую кислоты, представляющие интерес для медицины, пищевой промышленности и производства новых материалов.

Ранее процессы окисления глюкозы изучались преимущественно с использованием ферментов или гетерогенных катализаторов на основе наночастиц благородных металлов. В отличие от этих подходов, электрокаталитическое преобразование представляет собой альтернативную методику, осуществляемую под действием электрического тока в умеренных условиях. Данный метод является экономически выгодным и экологически безопасным, а также открывает возможности для интеграции с возобновляемыми источниками энергии, такими как солнечная, что соответствует принципам устойчивой химии. Ранее процессы окисления глюкозы изучались преимущественно с использованием ферментов или гетерогенных катализаторов на основе наночастиц благородных металлов. В отличие от этих подходов, электрокаталитическое преобразование представляет собой альтернативную методику, осуществляемую под действием электрического тока в умеренных условиях. Данный метод является экономически выгодным и экологически безопасным, а также открывает возможности для интеграции с

возобновляемыми источниками энергии, что соответствует принципам устойчивой химии.

Электрод из 4%-ного сплава Ni-Co-Fe продемонстрировал превосходные каталитические характеристики. Анализ EIS выявил значительно более низкое значение сопротивления переносу заряда (Rct) для Ni-Co-Fe электрода – 5.42 Ом в среде 1 М КОН + 100 мМ глюкозы по сравнению с 61.4 Ом для SS-304 в том же электролите. Пониженные значения Rct и малые значения последовательного сопротивления (Rs) свидетельствуют о высокой эффективности переноса электронов, благоприятной кинетике и превосходной электропроводности Ni-Co-Fe сплава, что подтверждает его перспективность для совмещенного получения ценных кислородсодержащих продуктов и водорода.

Список литературы

[1] S.W. Sharshir, A. Joseph, M.M. Elsayad [et.al.] // Int J Hydrogen Energy. 2024. V. 49. P. 458-488.
[2] Y. Li, S. Yang, H. Li [et.al.] // Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. Asp. 2016. V. 506. P. 694-702.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2023-468).

СД-19

РЕАЛИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ НИЗКОЗАСТЫВАЮЩЕГО ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЕПРЕССОРНЫХ ПРИСАДОК И УТЯЖЕЛЯЮЩИХ КОМПОНЕНТОВ

Ефанова А.О., **Киргина М.В.**

Томский политехнический университет, Томск, Россия,
tpu@tpu.ru, aoe4@tpu.ru

В условиях постоянного экономического развития и непрерывного роста технического сектора дизельное топливо (ДТ) является одним из основных видов топлива, способного обеспечить эффективную и бесперебойную работу транспорта и оборудования. Особое внимание уделяется низкотемпературным характеристикам ДТ, поскольку климатические условия на территории России переменчивы и зачастую, в местах эксплуатации топлива, преобладают низкие температуры. Так, производство низкозастывающего ДТ, соответствующего требованиям стандарта [1], принимает критически важное значение. Существуют различные способы получения данного типа ДТ, однако в данной работе рассмотрена технология получения низкозастывающего ДТ за счет повышения эффективности действия депрессорной присадки путем добавления утяжеляющих компонентов (УК) в малых концентрациях.

Путем детального исследования углеводородного состава исходных образцов прямогонного ДТ и УК методом хромато-мас-спектрометрии установлено, что чем выше содержание твердых н-парафиновых углеводородов относительно содержания жидких н-парафиновых углеводородов в составе УК, тем меньшая концентрация УК понадобится для повышения эффективности действия депрессорной присадки в отношении ПТФ. Однако, показано, что для ДТ, в составе которых изначально имеется оптимальное количество твердых н-парафиновых углеводородов для формирования начальных центров кристаллизации, отсутствует потенциал повышения эффективности действия депрессорной присадки в отношении ПТФ добавлением УК.

Верификация методики повышения эффективности действия депрессорной присадки путем добавления УК в ДТ показала, что необходимо акцентировать внимание не только на соотношении жидких и твердых н-парафиновых углеводородов, важно также учитывать соотношение легких (до C_{10}), средних (C_{10-20}) и тяжелых (после C_{20}) н-парафинов. Для активизации действия

депрессорной присадки в отношении основной массы н-парафинов (C_{10-20}) нужно иметь оптимальное соотношение средней части молекулярно-массового распределения н-парафинов к тяжелой. В противном случае, повысить эффективность действия депрессорной присадки не удастся.

Успешная реализация технологии получения низкозастывающего топлива за счет повышения эффективности депрессорной присадки с добавлением УК возможна с помощью оборудования, представленного на Рисунке.

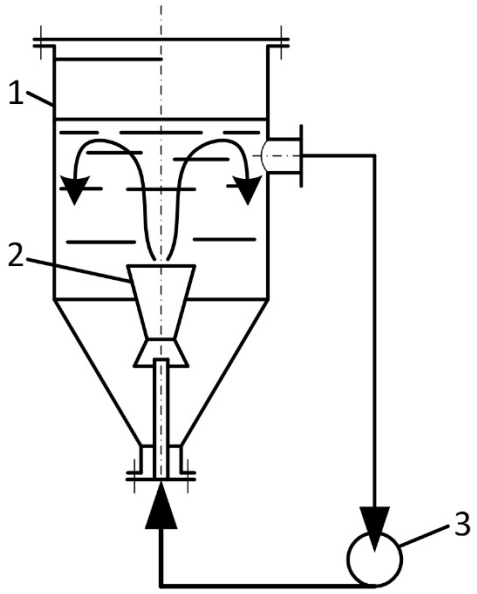


Рисунок. Циркуляционный смеситель: 1 – емкость, 2 – эжектор, 3 – циркуляционный насос

Приготовленное в смесительном резервуаре ДТ с депрессорной присадкой и УК забирается специальными насосами и многократно перекачивается по схеме «резервуар – насос – резервуар» до тех пор, пока в резервуаре не будет получена однородная по составу топливная смесь. В дальнейшем полученное ДТ будет использовано в местах необходимости, преимущественно на территориях Крайнего Севера и Арктики, поскольку на данных территориях господствуют суровые климатические условия и низкозастывающее ДТ будет всегда необходимо.

Список литературы

[1] ГОСТ 305-2013. Топливо дизельное. Технические условия. – М.: Стандартинформ, 2014. – 12 с.

Благодарность

Исследование выполнено при поддержке программы развития Томского политехнического университета «Приоритет 2030».

СД-20

ГОМОГЕННЫЕ ПРОЦЕССЫ НА ОСНОВЕ V-СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОПОЛИКИСЛОТ: ВОЗДУШНЫЙ РЕАКТОР ДЛЯ РЕГЕНЕРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРА

Жижина Е.Г., Родикова Ю.А.

ФГБУН ФИЦ Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия, bic@catalysis.ru, rodikova@catalysis.ru

Смешанные P-Mo-V гетерополикислоты 12 ряда (V-ГПК) – эффективные окислители, обладающие редокс-потенциалом ~ 1 В и способностью обратимо принимать электроны без разрушения структуры. Возможность регулирования их свойств путем изменения типа каркасных атомов и природы противоионов привела к нарастающему объему работ по применению V-ГПК в катализе, в том числе в гомогенных процессах окисления α-олефинов с различной длиной цепи и замещенных фенолов, обезвреживания CO, синтеза производных антрахинона и нафтохинона и др.

Процессы окисления подобных субстратов (Su) кислородом (III) в присутствии растворов V-ГПК обычно реализуются в две стадии:

$$^{m}/_{2}\,Su + {}^{m}/_{2}\,H_2O + \text{V-ГПК} \rightarrow {}^{m}/_{2}\,SuO + H_m(\text{V-ГПК}),\ (I)$$

$$H_m(\text{V-ГПК}) + {}^{m}/_{4}\,O_2 \rightarrow \text{V-ГПК} + {}^{m}/_{2}\,H_2O,\ (II)$$

$$Su + {}^{1}/_{2}\,O_2 \xrightarrow{\text{V-ГПК}} SuO.\ (III)$$

На первой из них (I) субстрат (Su) окисляется ГП-кислотой. Образовавшийся продукт реакции отделяется, а восстановленный раствор V-ГПК (H_mV-ГПК) поступает в отдельный реактор на регенерацию (стадия (II)), после чего на следующем цикле вновь взаимодействует с субстратом.

Стадия II регенерации восстановленной формы катализатора кислородом воздуха является общим этапом всех процессов окисления с участием растворов V-ГПК, реализуемых по двухстадийной технологии. Высокая эффективность данной стадии достигается при использовании воздушного реактора (ВР) (рис. 1), разработанного в ИК СО РАН. Он представляет собой аппарат барботажного типа с внутренней многократной циркуляцией восстановленной формы катализатора, создаваемой газовым потоком. В реакционной зоне (РЗ) катализатор контактирует с пузырьками сжатого воздуха, вместе с которым движется снизу вверх и частично окисляется, а затем возвращается вниз через

буферную зону (БЗ). Полное окисление катализатора достигается его многократным прохождением через РЗ за счет пузырьков воздуха диаметром 3 мм ($d_п$), скорость всплывания которых (W_0) составляет 8.42 см/сек при времени их контакта с катализатором ($t_п$) 16.9 сек:

$$d_n = \sqrt[3]{\frac{6 \cdot d_0 \cdot \sigma}{(\rho_ж - \rho_г) \cdot g}},\ W_0 = \sqrt[5]{\frac{\sigma^2 \cdot g.}{3\pi \cdot \mu \cdot \rho_ж}},\ t_п = h/(W_0 + W_{пс}),$$

где d_0 [0.1 см] – размер отверстия, через которое воздух выходит в жидкость, σ [72 дин/см] – поверхностное натяжение жидкого катализатора, $\rho_ж$ [1.663 г/см^3] и $\rho_г$ [$2.2 \cdot 10^{-2}$ г/см^3] – плотность катализатора и газа, g [980 см/сек^2] – ускорение свободного падения, μ [1 сП] – вязкость раствора катализатора в условиях работы воздушного реактора (190 °C), h [6.5 м] – высота РЗ, $W_{пс}$ [30 см/сек] – скорость движения пузырькового слоя.

Для предотвращения слияния пузырьков воздуха РЗ оснащается специальными насадками.

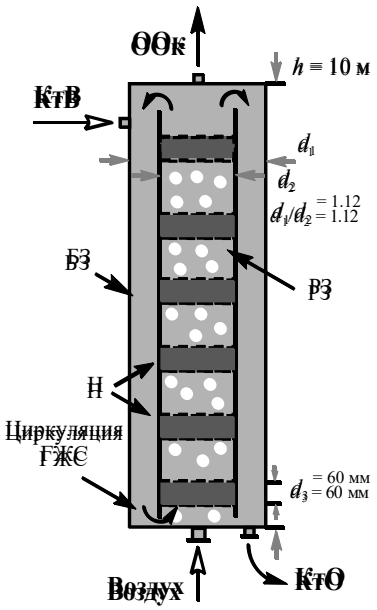


Рис. 1. Схема воздушного реактора: КтО – окисленный катализатор, КтВ – восстановленный катализатор, ООк – отработанный окислитель, РЗ – реакционная зона, ГЖС – газожидкостная смесь, Н – насадка из двух титановых сеток, БЗ – буферная зона

В ВР приведенной конструкции восстановленный раствор V-ГПК непрерывно подается с расходом υ = 6.7 л/мин и попадает в расширитель, где смешивается с основной массой катализатора, циркулирующего между БЗ и РЗ. После 73 циклов (n) циркуляции внутри реактора при продолжительности регенерации катализатора ($\tau_{ВР}$) 26.4 мин и длительности однократного прохождения пузырькового слоя через реактор ($\tau_{пс}$) 21.7 сек окисленный катализатор непрерывно выводится из ВР снизу с υ = 6.7 л/мин:

$$\tau_{ВР} = \tau_{РЗ} \cdot (1+\beta),\ \beta = V_{БЗ}/V_Р = (V_Р - V_{РЗ})/V_Р,\ \tau_{пс} = h/W_{пс},\ n = \tau_{ВР}/\tau_{пс},$$

где $\tau_{РЗ}$ [22 мин] – продолжительность реакции II в условиях эксплуатации реактора (190 °C, Р воздуха 30 ата), β [0.22] – доля времени нахождения катализатора в БЗ, $V_Р$ – объем реактора, $V_{РЗ}$ – объем РЗ.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0035).

СД-21

ПИРОЛИЗ ПОЛИЭТИЛЕНА В ПРИСУТСТВИИ ГЛИНИСТЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ CeO_2 и NiO

Зубенко П.А., Григорьев М.В., Тиссен Е.А., Русейкина А.В., Харитонцев В.Б., Елышев А.В.

ФГАОУ ВО «Тюменский государственный университет», Тюмень, Россия
E-mail: stud0000258263@study.utmn.ru

Данная работа посвящена исследованию влияния катализаторов на основе бентонитовой глины, используемой в качестве носителя для активных компонентов в виде NiO и CeO_2, на продукты каталитического пиролиза. Никель применяется во многих промышленных процессах и его применение было тщательно изучено. В последнее время внимание привлекают природные глины, преимущество которых заключается в экологичности, низкой стоимости, высокой селективности и простоте использования [1].

Методом пропитки глины, прошедшей кислотную активацию, были приготовлены катализаторы, содержащие 0,5 % CeO_2 и 5, 10 и 15 % NiO. При воздействии высоких температур оксид никеля на поверхности катализатора способствует его закоксовыванию, что приводит к дезактивации. Для предотвращения данного процесса на поверхность катализатора наносился оксид церия, который за счет лёгкости перехода из Ce^{3+} в Ce^{4+} и возможности хранения кислорода внутри кристаллической решетки может окислять адсорбированные на поверхности глинистого носителя формы углерода, препятствуя их накоплению и способствуя увеличению восстанавливаемости катализатора [2].

С помощью инфракрасной спектроскопии адсорбированного пиридина были оценены кислотные свойства.

Таблица 1. Кислотные свойства катализаторов

Катализатор	**Общая кислотность, (мкмоль/г)**	**[B], (мкмоль/г)**	**[L], (мкмоль/г)**
Бент (Ni-5%: Ce-0,5%)	0	0	0
Бент (Ni-10%: Ce-0,5%)	53.6	22.3	31.4
Бент (Ni-15%: Ce-0,5%)	25.2	0.0	25.2

Где [B] – Бренстедовская кислотность, [L] – Льюисовская кислотность.

Можно сделать вывод, что оптимальная концентрация оксида никеля на поверхности глинистого носителя – 10 %, так как наблюдается наибольшее количество кислотных центров.

Для оценки каталитической активности в процессе пиролиза полиэтилена (ПЭ) использовалась газовая хроматография с хроматомасс-спектрометром и пиролитической ячейкой.

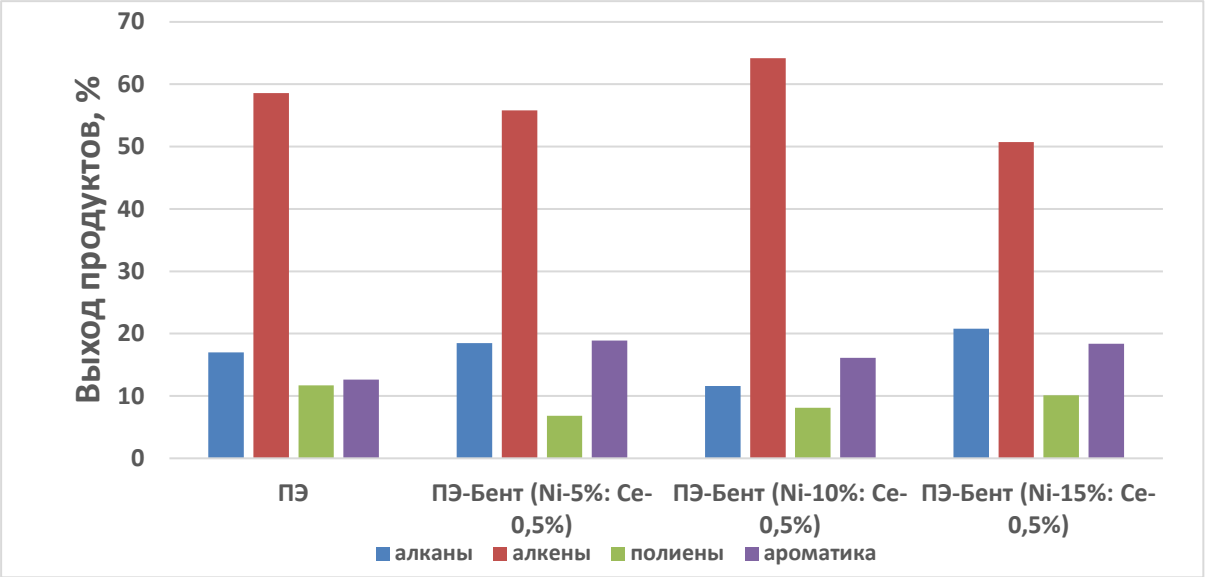


Рис. 1. Распределение продуктов пиролиза с использованием различных катализаторов

При использовании катализаторов во всех случаях увеличивается выход ароматических соединений за счет циклизации и ароматизации полиенов, выход которых уменьшается.

Наибольший выход алкенов (64,2 %) наблюдается при использовании катализатора, содержащего 10 % NiO, что объясняется наибольшим содержанием Льюисовских кислотных центров.

Таким образом, данные катализаторы могут быть эффективны в целях получения сырья на основе алкенов и ароматических соединений для дальнейшего производства топлив, полимеров или органических соединения.

Список литературы

[1] Rongbin Zhang, Guixin Guo, Ying Gao // Mater Lett. 2013. v. 113. p.146-148.

[2] Alexandra Tavasoli, Abdelaziz Gouda, Till Zähringer // Nat Commun. 2023. v. 14, p. 1435.

Благодарность

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта «Фундаментальные проблемы методики разработки и связанного с ней правового и этического регулирования в сфере применения систем и моделей искусственного интеллекта» (FEWZ-2024-0016).

СД-22

РЕАКТОРНЫЕ УСТРОЙСТВА ДЛЯ РЕАКЦИОННОГО ФОРМОВАНИЯ ЖИРНОАРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИАМИДОВ

Зуев И.А.[1], **Соловьёва В.С.**[2], **Лагусева Е.И.**[3]

[1]ООО «КСК Металлкомплект», Тверь, Россия
[2]ООО «Тверской лакокрасочный завод», Тверь, Россия
[3]Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
lagusseva@yandex.ru

Реализация совмещенного процесса, включающего синтез синтетических гетероцепных полимеров методом неравновесной поликонденсации на границе раздела жидкость-газ в пенном режиме и одновременное формование в условиях напряжений сдвига жирноароматических полиамидов (в т.ч. фибридов) с заданными свойствами, оказалась возможной благодаря созданию реакторных устройств – реакторов-фибридаторов [1].

Реактор-фибридатор отличается компактностью, высокой производительностью и состоит из камеры генерирования газовой фазы и расположенной над ней реакционной камеры. Реакционная камера, выполненная в различных вариантах базовых конструкций, обеспечивает контакт жидкой и газовой фаз, диффузию ацилируемых и ацилирующих мономеров из объёмов к поверхности раздела фаз (реакционной зоне), протекание химических процессов поликонденсации мономеров и нейтрализации низкомолекулярного продукта поликонденсации.

Найденны критериальные зависимости (Рейнольдса $Re_г$, и Фруда $Fr_г$), которые позволяют моделировать процессы газожидкостной поликонденсации при синтезе полимеров, протекающего в интенсивном пенном режиме, и по заданному диаметру аппарата с учетом его конструктивных особенностей определять оптимальную линейную скорость и производительность установки в целом.

Список литературы

[1] Никифоров, В.А. Газожидкостная поликонденсация // В.А. Никифоров, Е.А. Панкратов, Е.И. Лагусева, А.В. Берёзкин. – Тверь: ТГТУ, 2004. – 268 с.

СД-23

АДСОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ПАРОВОГО РИФОРМИНГА МЕТАНА ДЛЯ ОДНОСТАДИЙНОГО ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА

Кадыров Т.Р.[1], **Азарапин Н.О.**[1], **Елышев А.В.**[1], **Загоруйко А.Н.**[1,2]

[1]*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*
[2]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
t.r.kadyrov@utmn.ru

Водород как экологически чистый энергоноситель играет ключевую роль в переходе к низкоуглеродной экономике. Паровой риформинг метана (ПРМ) является основным методом его производства, однако сопровождается значительными выбросами CO_2 и требует многостадийной очистки, что увеличивает энергозатраты и стоимость процесса. Разработка адсорбционно-каталитической системы для одностадийного получения водорода позволяет интегрировать процессы риформинга и разделения продуктов в одном реакторе. Это достигается за счет использования катализаторов с высокой активностью и адсорбентов, избирательно удаляющих CO_2, что повышает выход водорода и снижает энергопотребление [1].

Актуальность исследования обусловлена необходимостью снижения выбросов CO_2, повышения энергоэффективности и упрощения технологических схем. Разработка таких систем способствует развитию водородной энергетики и созданию инновационных материалов, что делает производство водорода более экологически безопасным и экономически выгодным.

В ходе работе были получены и использованы сорбенты на основе оксида кальция (CaO) [2], ортосиликаты щелочных металлов ($(Li, Na, K)_4SiO_4$), гидроталькит ($Mg_6Al_2CO_3(OH)_{16}\cdot 4H_2O$) [3].

Загрузка реактора осуществлялась катализатором и сорбентом, и равным объемом стеклянных шариков. Предложены различные варианты структуры хемосорбционно-каталитических систем на основе комбинации катализаторов и хемосорбентов (Рис. 1).

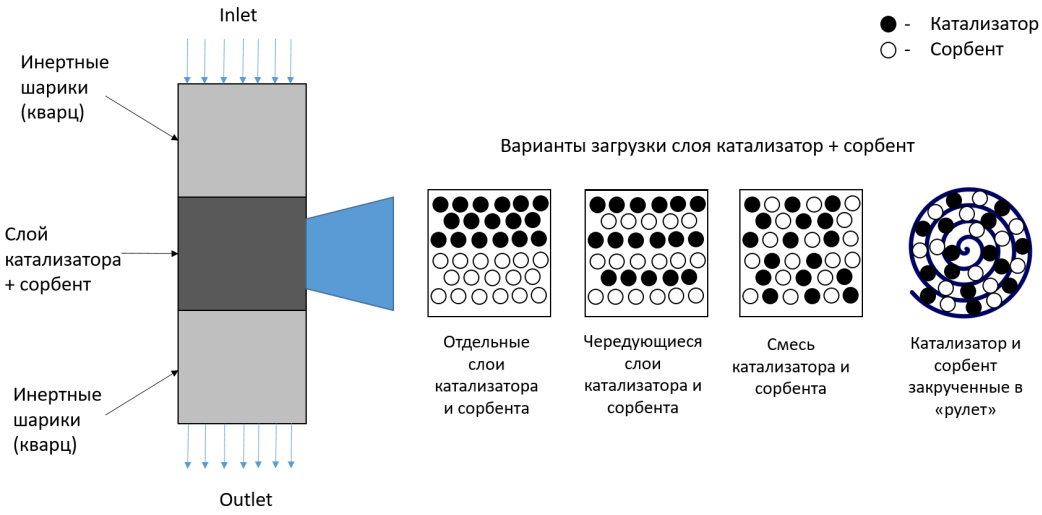


Рисунок 1. Схема загрузки катализатора и сорбента в реактор

На рисунке 1 изображена схема загрузки катализатора и сорбента в реактор парового риформинга метана. Основная цель такой загрузки — обеспечить эффективное протекание химических реакций и адсорбцию CO_2. Через вход (inlet) в реактор подаётся смесь метана и водяного пара. Инертные шарики используются для равномерного распределения потока газа и предотвращения уноса катализатора и сорбента. Располагаются как на входе, так и на выходе реактора. Варианты загрузки слоя катализатора и сорбента: 1) Отдельные слои катализатора и сорбента. 2) Чередующиеся слои катализатора и сорбента, 3) Смесь катализатора и сорбента, 4) Катализатор и сорбент, закрученные в «рулет».

Список литературы

[1] Chen Y.Z. et al., High-Purity Hydrogen Production by CO_2 Addition for Sorption-Enhanced Steam Methane Reforming at a Temperature Below 600 °C // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2024. – V. 63. – №. 14. – P. 6169-6181.

[2] A.L. García-Lario et al., Performance of a combined CaO-based sorbent and catalyst on H_2 production, via sorption enhanced methane steam reforming // Chem. Eng. J., 264 (2015), pp. 697-705.

[3] H. Th. J. Reijers et al., Hydrotalcite as CO_2 Sorbent for Sorption-Enhanced Steam Reforming of Methane // Ind. Eng. Chem. Res., 45 (2006), pp. 2522-2530.

Благодарность

Исследование в части «Структурированные микроволокнистые катализаторы новых геометрических форм и сорбционно-каталитические процессы одностадийного производства водорода на их основе» выполнено за счет гос. задания № FEWZ-2024-0015.

СД-24

МАСШТАБИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПАРОУГЛЕКИСЛОТНОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Лопатин С.А.[1,2], **Елышев А.В.**[2], **Загоруйко А.Н.**[1,2]

[1]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2]*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*
lsa@catalysis.ru

Целью данного исследования является разработка методики эффективного межмасштабного переноса информации по процессу парового и пароуглекислотного риформинга метана в трубчатом каталитическом реакторе с лабораторного уровня на промышленный.

Основой этого подхода является метод гидродинамического моделирования (CFD), реализуемый в настоящей работе с помощью ПО Ansys Fluent [1]. Процессы в лабораторном и промышленном реакторах моделируются с использованием трехмерной гетерогенной модели каталитической трубки реактора. Модель учитывает массовую и тепловую дисперсию в осевом и радиальном направлении, осевое и радиальное распределение давления, протекание каталитических реакций, а также межфазный и внутричастичный транспорт.

Расчеты основаны на экспериментальных данных, получаемых в лабораторном реакторе при температуре 830-850 °C и давлении 1.4 МПа. В ходе расчетов решается обратная кинетическая задача, в которой с помощью CFD моделирования учитывается температурная неоднородность реакционной зоны, а также отличия гидродинамического типа реактора от режима идеального вытеснения, которые могут возникать из-за высокого коэффициента диффузии водорода. Затем полученная кинетическая модель переносится на модель трубки промышленного реактора.

На рис. 1 изображены результаты моделирования лабораторного реактора с внутренним диаметром 17 мм и трубки промышленного реактора с внутренним диаметром 108 мм. Видно, что во входной части промышленной трубки за счет протекания эндотермических реакций риформинга формируется «холодное пятно» с заметными температурными и концентрационными градиентами не только по оси трубки, но и ее радиусу.

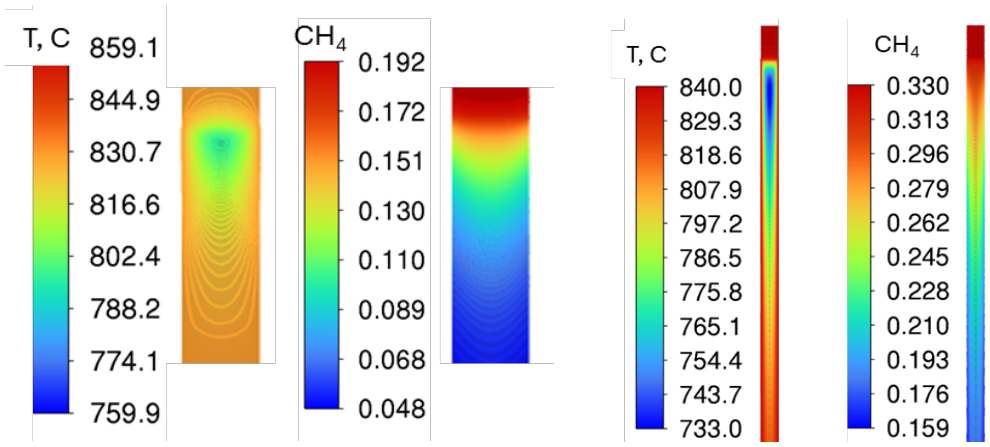


Рис. 1. Поля температуры и массовых долей метана, полученные в результате моделирования лабораторного реактора (слева) и трубки промышленного реактора (справа)

В лабораторном реакторе, по данным моделирования, также наблюдается некоторая, хоть и существенно меньшая, неоднородность распределения температуры по слою катализатора. Таким образом, созданная модель способна не только воспроизводить процессы в промышленных реакторах, но и получать более точные кинетические модели за счет более точного воспроизведения экспериментальных условий в лабораторном реакторе, по сравнению с применяемыми ныне упрощенными концепциями изотермического реактора идеального вытеснения.

Верификация модели включает лабораторные исследования известных катализаторов с последующим масштабным переносом полученных результатов с помощью модели на известный промышленный реактор и сопоставлением полученных прогнозных данных с фактическими рабочими характеристиками этого реактора. Для промежуточной верификации можно также использовать процедуру переноса между лабораторными реакторами разного диаметра.

Список литературы

[1] M. Halabi, M.H.J.M. de Croon, J. van der Schaaf, P. Cobdenb, J. Schouten, Modeling and analysis of autothermal reforming of methane to hydrogen in a fixed bed reformer, Chemical Engineering Journal 137 (2008) 568–578.

Благодарности

Данная работа проводилась при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственных заданий для Тюменского государственного (FEWZ-2024-0015) и для Института катализа им. Борескова (проект FWUR-2024-0037).

СД-25

ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ ОКСИДА ГАЛЛИЯ НА ЕГО КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА В ДЕГИДРИРОВАНИИ ПРОПАНА В ПРОПИЛЕН

Каичев В.В., Пахарукова В.П., Горбунова А.С., Шутилов А.А., Чернов А.Н., Колтунов К.Ю., Соболев В.И.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
vvk@catalysis.ru

Катализаторы на основе оксидов неблагородных металлов (VO_x, GaO_x, CoO_x, ZrO_x и т.п.) проявляют высокую активность в дегидрировании пропана в пропилен. Считается, что активность зависит от степени окисления металлов и атомного строения активных центров. В свою очередь это может зависеть от природы носителя, количества наносимого компонента и допирующих элементов, которые могут влиять на атомное и электронное строение. Данная работа посвящена изучению эффекта допирования массивного оксида галлия Ga_2O_3 на его каталитические свойства.

Ga_2O_3 получен осаждением из водного раствора нитрата галлия водным раствором NH_4OH (12.5 %) при постоянном pH = 4 и температуре 70 °C. Катализаторы 1 масс. % M/Ga_2O_3 (M = Co, Ni, Cu, La, Y, Ce, Mo, V, Sn, Fe, In) приготовили пропиткой Ga_2O_3 водными растворами солей заданных элементов (в основном использовали нитраты) с последующей сушкой при 110 °C в течение 6 ч и прокалкой при 650 °C в течение 4 ч. Испытания каталитических свойств оксидов проводились при атмосферном давлении с применением цилиндрического кварцевого реактора (внутренний диаметр 7.5 мм), загруженного катализатором (0.2 г., фракция 0.25-0.5 мм), смешанным с 1 мл частиц кварца (d = 0.45-1 мм). Газовая смесь (10 об.% пропана в азоте) подавалась в реактор с объемной скоростью (GHSV) = 7500 мл $ч^{-1}$ $г_{кат}^{-1}$, что соответствует массовой скорости подачи чистого пропана относительно массы катализатора (WHSV) = 1.4 $ч^{-1}$. Температура реакции, 600 °C, определялась внутри реактора с точностью ±0.5 °C. Реакционные смеси автоматически анализировались на газовом хроматографе Chromos GC-1000 оснащенном ПИД-детектором с использованием капиллярной колонки из кварца (длина 7 м, вн. диаметр 0.32 мм). Перед измерениями катализаторы прокаливались при 600 °C в токе N_2 в течение 1 часа.

Наиболее важным индикатором является начальная активность (конверсия пропана через 3 мин). Установлено, что повышению начальной активности в наибольшей степени способствует модификация оксида галлия такими элементами, как La, Y, Ni и в несколько меньшей – Ce, Mo и Cu, тогда как Sn, In и Fe оказывают отрицательный эффект.

Природа допирования изучалась на примере наиболее активного образца допированного лантаном. По данным рентгеновской дифракции образец Ga_2O_3 содержит термодинамически стабильную фазу β-Ga_2O_3. Модифицирование лантаном препятствует формированию этой фазы. Образец La_2O_3-Ga_2O_3 преимущественно содержит ультрадисперсную, плохо окристаллизованную метастабильную фазу γ-Ga_2O_3 со структурой дефектной нестехиометрической шпинели. Дефекты – катионные вакансии распределены по октаэдрическим и тетраэдрическим позициям. Фактически это аналог известной низкотемпературной формы γ-Al_2O_3. Возможно, что лантан находится на межблочных границах кристаллитов Ga_2O_3 и препятствует их агломерации с последующим переходом в стабильную фазу β-Ga_2O_3. Повышение дисперсности способствует образованию низко-координированных катионов Ga^{3+} на поверхности кристаллитов, определяющих активность в реакции дегидрирования пропана.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-13-00217.

СД-26

ИЗУЧЕНИЕ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ FDM 3D ПЕЧАТИ

Ковалев И.В., Попов М.П., Немудрый А.П.

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия, E-mail: kovalev.ivan.vyacheslavovich@gmail.com

Твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) привлекают особое внимание исследовательских групп по всему миру уже более двух десятилетий, о чем свидетельствует значительный ежегодный рост количества публикаций начиная с конца прошлого столетия. Такой интерес справедливо обоснован выдающимися свойствами данных устройств, позволяющих преобразовывать энергию химической реакции в электроэнергию, минуя промежуточные стадии. В отличие от прочих типов топливных элементов, ТОТЭ обладают топливной гибкостью, высокой плотностью тока и комбинированной теплоэнергетической эффективностью [1].

Одним из основных направлений модернизации ТОТЭ является оптимизация конфигурации ячейки. На данный момент не существует единого представления об ее оптимальном устройстве, но доступен ряд различных решений, обладающих как значительными преимуществами, так и недостатками, требующими доработок. Так ТОТЭ разделяют на две основных категории: планарные и трубчатые. Первые являются наиболее доступными для получения, но при этом слабо устойчивы к термоциклированию и являются сложно-герметизируемыми. Трубчатые ТОТЭ в свою очередь лишены этих недостатков, однако более сложны в изготовлении по сравнению с планарными [2]. По итогам последних лет в таблице лидеров по своим показателям находятся ТОТЭ на основе анод-несущих микротрубчатых подложек морфологии типа hollow fibers, представляющих собой высокопористые трубки небольшого диаметра с ассиметричной сложной внутренней структурой. Использование ТОТЭ такой морфологии позволяет увеличить удельную мощность на единицу веса и объема, устойчивость к термоциклированию и градиенту температур, помимо этого такие топливные элементы обладают возможностью работать в режиме комбинированного внешнего и внутреннего риформинга [3]. Особенную hollow fiber структуру получают применением метода фазовой инверсии, который заключается в удалении растворителя из пасты, содержащей исходный порошок

анода и полимер. Однако, как упоминалось ранее, ни одна из перечисленных конфигураций ТОТЭ не лишена существенных недостатков, в данном случае относительно низкая механическая прочность таких ячеек является серьезной проблемой, что приводит к практическим трудностям при работе с отдельными элементами и сборке батареи. Поэтому поиск «идеальной» конструкции, сочетающей в себе черты плоской и трубчатой ячейки, является актуальной задачей.

Ранее был опубликован ряд работ, свидетельствующих о значительном положительном влиянии количества каналов в трубчатом ТОТЭ на его функциональные свойства [4-6]. Поскольку, как было показано, рост числа каналов напрямую влияет не только на прочностные, но и на мощностные характеристики, то интересен к рассмотрению предельный случай, когда число каналов настолько велико, что составляет единую сеть мультиканалов.

Таким образом, целью данной работы является разработка и изучение трубчатых твердооксидных топливных элементов с оптимальной геометрией реакционной зоны. В настоящей работе предлагается использовать оригинальную методику фазовой инверсии, позволяющую добиваться сложной архитектуры реакционной зоны ТОТЭ, основанную на использовании замороженной полимерной пасты и порообразующих полимерных вставок заданной геометрии, полученных при помощи FDM 3D печати.

Список литературы

[1] Fan L., Tu Z. & Chan, S. H. Energy Reports 2021, 7, 8421-8446.
[2] Timurkutluk B et al. Renewable and Sustainable Energy Reviews 2016, 56, 1101-1121.
[3] Chen R. et al. Journal of Energy Chemistry 2024, 97, 79-109.
[4] Wang B. et al. Separation and Purification Technology 2023, 315, 123732.
[5] Ling Y. et al. Electrochemistry Communications 2024, 166, 107775.
[6] Wang B. et al. Ceramics International 2024, 50(20), 37833-37843.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 21-79-30051-П).

СД-27

ПЕРЕРАБОТКА ТЯЖЕЛОКИПЯЩИХ ОТХОДОВ ПРОИЗВОДСТВА КАПРОЛАКТАМА

Колобков В.В.[1], **Соловьёва В.С.**[2], **Лагусева Е.И.**[1]

[1]Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
[2]ООО «Тверской лакокрасочный завод», Тверь, Россия
kolobkov.volodya@list.ru

В настоящее время в России существует несколько предприятий по производству капролактама многостадийным способом. Производство капролактама по окислительной схеме выявило актуальную задачу – утилизацию отходов производства. Нереализуемыми или слабореализуемыми являются: водный слой, щелочной сток и масло ПОД (Х-масло). Полифункциональность масла ПОД позволяет предположить возможность его использования в качестве сырьевого компонента для получения полимерных смол. Масло ПОД – смесь высококипящих продуктов окисления циклогексана, дегидрирования циклогексанола и поликонденсации циклогексанона). В то же время полифункциональность масла ПОД позволяет предполагать возможность его использования в качестве компонента для получения полимерных смол.

Согласно фракционному составу, масло ПОД можно условно классифицировать на две категории: летучую и олигомерную. Летучая фракция в масле ПОД является доминирующей и может достигать 70 % от общей массы. Исследования летучей компоненты показали, что масло ПОД включает более 20 различных веществ. Главным компонентом масла является дианон – ненасыщенный димер циклогексанона, который представляет собой смесь двух изомеров: 2-циклогексиленциклогексанона и 2-циклогексилиденциклогексанона. В некоторых случаях его содержание может достигать 50 %

В рамках исследования был установлен состав исходного масла ПОД, получены смолы на основе тяжелокипящих отходов производства капролактама, отработаны технологические режимы синтеза, предложена технология переработки масла ПОД для коммерческой реализации полученных смол в полимерной и лакокрасочной промышленностях с целью экономии сырья.

СД-28

ПОДХОД К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ПРОФИЛЯ АЭРАЦИИ И ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В ПРОМЫШЛЕННОМ БИОРЕАКТОРЕ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО МАСШТАБИРОВАНИЯ ЛАБОРАТОРНОЙ ТЕХНОЛОГИИ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ РЕКОМБИНАНТНОЙ *E.coli*

Корнаков И.А.[1], Гречко Д.А.[1], Мухина Т.В.[1], Яровикова М.С.[1], Хасаншина З.Р.[1], Сальников С.М.[2], Сальникова А.М.[2], Шипачева М.М.[2]

[1]Закрытое акционерное общество «Фарм-Холдинг», ул. Связи, д. 34, лит. А, пос. Стрельна, Санкт-Петербург, 198515, Российская Федерация
[2]ООО «ГЕРОФАРМ», Ячевский проезд, д.4, стр.1, г. Пушкин, Санкт-Петербург, 196608, Российская Федерация
E-mail: Igor.Kornakov@gerophar m.com

Масштабирование лабораторной технологии культивирования рекомбинантных штаммов-продуцентов остается сложным процессом с высоким уровнем неопределенности [1]. Концентрация растворенного кислорода (pO2) в культуральной среде является критическим фактором для роста рекомбинантной *E.coli* и биосинтеза целевого белка [2]. Поэтому при масштабировании требуется адекватный контроль pO2 в промышленных биореакторах. Однако, конструктивные и геометрические различия между лабораторными и промышленными биореакторами оказывают влияние на интенсивность массобмена кислорода и, как следствие, на выход клеточной биомассы и титр продукта [3]. Один из подходов к минимизации данного влияния предполагает использование критериев масштабирования и их комбинаций. Постоянство значений критериев обеспечивает точность воспроизведения макрокинетических параметров в различных биореакторах, что в свою очередь влияет на кинетику протекания биохимических реакций в клетках микроорганизмов. Цель работы – определить профиль аэрации и перемешивания в промышленном биореакторе для эффективного масштабирования лабораторной технологии культивирования с использование различных критериев масштабирования. Лабораторную технологию культивирования разрабатывали в биореакторе с максимальным рабочим объемом 1,0 л, масштабирование проводили в пилотном биореакторе с максимальным рабочим объемом 200 л. Стартовый объем среды составлял 0,6 л и 100 л, для лабораторной и промышленной установки, соответственно. Использовали следующие критерии масштабирования: линейная скорость мешалки, м/с, объемная скорость подачи воздуха, л/л*мин, объемный

коэффициент массопередачи кислорода k_La, $ч^{-1}$. Коэффициент k_La определяли динамическим методом [2]. Основным критерием эффективности масштабирования считали выход влажной биомассы и объемную продуктивность. Начальные значения расхода воздуха ($Q_л$) и угловой скорости мешалки ($N_л$) для лабораторного ферментера составляли 0,6 л/мин и 400 rpm, соответственно. На основании тождественности линейной скорости вращения мешалки определили стартовую угловую скорость для пилотного биореактора ($N_п$), составившую 75 rpm. Используя принцип равенства объемной скорости подачи воздуха на старте процесса, определили начальное значение расхода для промышленной установки ($Q_п$) – 100 л/мин. Расчет максимальных значений параметров контроля pO2 в пилотной установке проводили на основании равенства (±5 %) k_La между биореакторами. Для лабораторного биореактора при максимальных значениях $Q_л$ и $N_л$ равных 2,0 л/мин и 1500 rpm, соответственно, экспериментальное значение k_La составило 332 $ч^{-1}$. Экспериментально определили, что при установке значений $Q_п$ = 358 л/мин и $N_п$ = 630 rpm, k_La промышленного сосуда составляет 342 $ч^{-1}$. Таким образом, значения $Q_п$ = 358 л/мин и $N_п$ = 630 rpm были приняты в качестве максимальных при масштабировании. Использование критериев масштабирования позволило получить профили для угловой скорости мешалки $N_п$ (уравнение 1) и расхода воздуха $Q_п$ (уравнение 2) для промышленного биореактора в зависимости от времени t.

$$N\text{п} = 92{,}5 * t + 75 \quad (1)$$

$$Q\text{п} = 43 * t + 100 \quad (2)$$

Уравнения использовались при масштабировании. Выход биомассы и титр целевого белка в 200 л биореакторе находились в пределах 95 % доверительных интервалов, рассчитанных для лабораторного процесса, что свидетельствует об успешном воспроизведении результатов в пилотном масштабе.

Список литературы

[1] Seidel, S.; Mozaffari, F.; Maschke, R.W.; Kraume, M.; Eibl-Schindler, R.; Eibl, D. Automated Shape and Process Parameter Optimization for Scaling Up Geometrically Non-Similar Bioreactors. Processes 2023, 11, 2703. https://doi.org/10.3390/pr11092703.

[2] Garcia-Ochoa F., Gomez E. Bioreactor scale-up and oxygen transfer rate in microbial processes: an overview. Biotechnol Adv. 2009 Mar-Apr;27(2):153-76. doi: 10.1016/j.biotechadv.2008.10.006.

[3] Слинько М.Г. Моделирование химических реакторов. — Новосибирск: Наука, 1968. — 96 с.

СД-29

СИНТЕЗ КАТАЛИЗАТОРОВ МЕТОДОМ ГОРЕНИЯ РАСТВОРОВ И ЕГО МАСШТАБИРОВАНИЕ

Курмашов П.Б., Баннов А.Г.

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия, kurmaschov@gmail.com

На сегодняшний день, каталитическому пиролизу углеводородных газов отводится важная роль для многих нефтедобывающих компаний. Во-первых, рациональное использование ресурсов, позволит снизить себестоимость добычи нефти, за счет образования вторичных продуктов реакции из углеводородов ряда C_1-C_4 (водорода и углеродного наноматериала), и, во-вторых, решит экологическую проблему за счет отсутствия в продуктах реакции оксидов углерода (CO_x-free процесс) [1,2].

Каталитический пиролиз легких углеводородов в присутствии наноразмерных катализаторов, в состав которых входят металлы VIII группы 4-го периода таблицы Менделеева, проходит по следующей реакции

$$C_nH_m \rightarrow nC + 0{,}5mH_2 \text{ (для } CH_4\ \Delta H_0 = 75{,}6 \text{ кДж/моль).}$$

Эффективность процесса определяется конструктивной особенностью каталитического реактора, взаимодействие активных частиц катализатора с исходным углеводородным газом. Производительность по водороду и углеродному материалу, определяется температурой каталитической реакции (500-1000 °C), а также составом и методом приготовления катализатора.

Получаемый таким образом водород можно использовать в химической промышленности, а углеродные наноматериалы в композитных материалах, для создания суперконденсаторов и газовых сенсоров и т.д.

Рост числа публикаций, посвященных катализаторам синтезированным методом горения растворов (solution combustion synthesis), указывает на их перспективность [1,2]. Достоинством данного метода синтеза является его простота, одностадийность, что в свою очередь позволяет снизить затраты на его производство.

Синтез основан на взаимодействии нитратов металлов с органическим топливом (например, уротропин, глицин и т.д.), в результате протекания окислительно-восстановительной реакции, которая может быть инициирована

локально (при помощи нити накаливания) или объемно, в случае реализации технологии в муфельной печи или при воздействии СВЧ-излучения.

Эффективность катализатора, определяется адиабатической температурой горения раствора, которая в свою очередь зависит от состава и коэффициента избытка топлива.

В данной работе рассмотрены вопросы масштабирования катализатора при локальном способе инициирования синтеза горением растворов. Определена каталитическая активность синтезированных образцов катализатора в реакции разложения углеводородного газа.

Список литературы

[1] Glycine-based solution combustion synthesis of Ni/Al_2O_3 catalyst: decomposition of methane / P.B. Kurmashov, V. Golovakhin, A V. Ukhina, A.G. Bannov [et al.]. – DOI 10.1016/j.cherd.2025.02.040. – Text : direct // Chemical Engineering Research and Design. – 2025. – Vol. 216. – P. 455–472.

[2] Statistical modeling of solution combustion synthesis for Ni/A_2O_3 catalyst in methane decomposition to hydrogen and carbon nanofibers / P.B. Kurmashov, V.S. Timofeev, A.G. Bannov [et al.]. – DOI 10.1016/j.ijhydene.2024.09.254. – Text : direct // International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – Vol. 89. – P. 1342–1353.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания Министерства науки и высшего образования (код FSUN-2023-0008).

СД-30

ОСОБЕННОСТЬ ПРОЦЕССОВ ЭМУЛЬГИРОВАНИЯ В РОТОРНО-ДИСКОВЫХ РЕАКТОРАХ

Лапонов С.В., Шулаев Н.С.

Институт химических технологий и инжиниринга
Уфимского государственного нефтяного технического университета
в г. Стерлитамак, Республика Башкортостан, Российская Федерация
Laponows92@mail.ru

При проведении химических реакций в системах жидкость-жидкость для обеспечения требуемой интенсивности массопередачи необходимо создание соответствующей площади поверхности контакта фаз. Удельная площадь поверхности контакта фаз ($м^2/м^3$) характеризуется осреднённым диаметром дисперсных частиц d [1], $S=6\varphi/d$, где φ – объёмная доля дисперсной фазы. Характерный размер частиц определяется свойствами реакционной смеси и диссипируемой энергией, зависящей от интенсивности воздействия на среду.

Одним из эффективных устройств для проведения химических превращений является роторно-дисковый реактор (РДР), способный создавать эмульсии с заданным размером дисперсных частиц [2, 3] обеспечивающих необходимую площадь контакта фаз. Основными конструктивными элементами РДР являются чередующиеся подвижные (вращающиеся) и неподвижные перфорированные диски, установленные в корпусе аппарата.

Химические реакции протекают с выделением или поглощением тепла, это приводит к необходимости исследовать влияние температуры на процесс эмульгирования.

В представленной работе приведены результаты экспериментальных исследований зависимости размеров дисперсных частиц в системе вода – дизельное топливо при различных соотношениях компонентов смеси в зависимости от её температуры.

В частности, на рисунке 1 приведены зависимости характерных размеров дисперсных частиц от температуры при различном соотношении компонентов смеси.

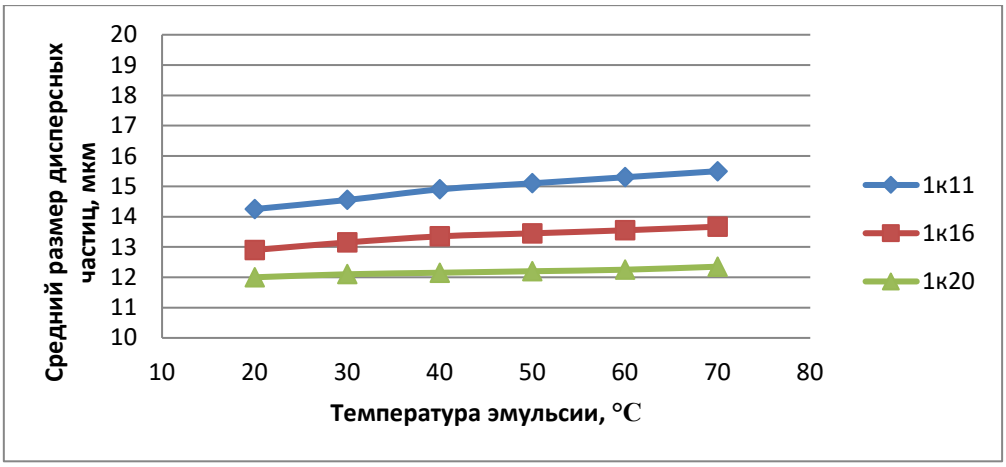


Рисунок 1. Зависимость осредненного размера дисперсных частиц в зависимости от температуры при отношениях компонентов дизельное топливо / вода 1/11, 1/16, 1/20

Из анализа экспериментальных и теоретических исследований следует, что в указанном интервале температур 20°<t<70° в роторно-дисковых реакторах характерный размер дисперсных частиц практически не изменяется. Это объясняется тем, что уменьшение межфазного натяжения с увеличением температуры, приводящее к уменьшению d, компенсируется уменьшением диссипируемой при перемешивании мощности, определяемой вязкостью реакционной смеси уменьшающейся с ростом температуры, что приводит к увеличению d.

Эту особенность процесса эмульгирования в роторно-дисковых реакторах, определяющего эффективность химического процесса, необходимо учитывать при аппаратурном оформлении технологических процессов с использованием РДР.

Список литературы

[1] Брагинский Л.Н., Бегачев В.И., Барабаш В.М. Перемешивание в жидких средах: Физические основы и инженерные методы расчета. - Л.: Химия, 1984.-336с.

[2] Шулаев Н.С. Энергопотребление процессов эмульгирования в малообъемных перемешивающих аппаратах / Н.С. Шулаев, Т.В. Шулаева, С.В. Лапонов // Бутлеровские сообщения. 2020. Т.61. №1. С. 86-90.

[3] Лапонов, С.В. Влияние конструктивных особенностей роторно-дисковых смесителей на дисперсный состав эмульсий / С.В. Лапонов, Н.С. Шулаев, С.П. Иванов, И.Г. Ибрагимов // Труды РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина. 2018. №1/290. С. 72-81.

СД-31

ГИДРОДИНАМИКА И КАЧЕСТВО МИКРОСМЕШЕНИЯ В МИКРОРЕАКТОРАХ: СРАВНЕНИЕ ИНТЕНСИВНО ЗАКРУЧЕННЫХ ПОТОКОВ И ЗАТОПЛЕННЫХ СТАЛКИВАЮЩИХСЯ СТРУЙ

Макушева И.В.[1], **Абиев Р.Ш.**[1,2]

[1]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), кафедра оптимизации химической и биотехнологической аппаратуры, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН (Филиал НИЦ «Курчатовский институт»-ПИЯФ-ИХС), Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: makusheva2012@yandex.ru

Смешение жидкостей используется в химической промышленности для проведения массообменных процессов растворения, эмульгирования, кристаллизации, экстракции, так и сопряженных с ними химических процессов (гомофазных и гетерофазных химических реакций, реактивной экстракции). Эффективность химических реакций по своей сути зависит от физического процесса смешения, поскольку для протекания реакции реагенты должны вступать в контакт друг с другом на молекулярном или ионном уровне [1].

При исследовании смешения в химических реакторах учитывают следующие уровни: макросмешение (гомогенизацию градиентов концентрации в масштабе размера оборудования), микросмешение (смешение на уровне ниже масштаба Колмогорова) и мезосмешение (промежуточный уровень) [1, 2].

В данной работе проведено сравнение качества микросмешения и удельной скорости диссипации энергии в двухступенчатом микрореакторе с интенсивно закрученными потоками жидкости (MRISF-2) и в идентичном по геометрической форме и объёму микрореакторе с затопленными сталкивающимися струями (MRSIJ-2).

Для сравнения исследованы способы подачи через два тангенциальных (TU+TU) и через два радиальных (RU+RU), тангенциальный и осевой (TU+C) и радиальный и осевой (RU+C). Кроме того, помимо обычно изучаемой подачи растворов через два патрубка особо исследован случай подачи растворов сразу в три патрубка – два тангенциальных и осевой (TU+TU+C), а также в два радиальных и осевой (RU+RU+C). Этот случай соответствует подаче трех растворов в первую камеру, который используется в некоторых видах синтеза наноразмерных частиц неорганических материалов.

Микросмешение в микрореакторах определялось по йодид-иодатной методике. Для точной оценки качества микросмешения используют индекс сегрегации X_S, значения которого находятся в интервале от 0 до 1 [3]: полная сегрегация имеет место при $X_S = 1$, идеальное микросмешение достигается при $X_S = 0$.

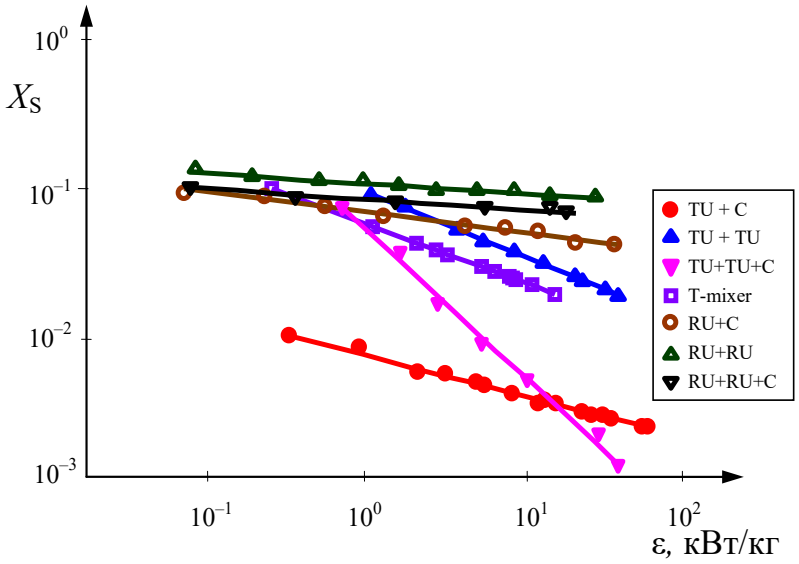


Рисунок. Зависимость индекса сегрегации X_S от удельной скорости диссипации энергии $\varepsilon_{neck.exp}$ (кВт/кг) в MRISF-2 и MRSIJ-2

На рисунке показана зависимость индекса сегрегации от удельной скорости диссипации энергии.

В результате данной работы было доказано, что использование закрутки обеспечивает лучшие значения индекса сегрегации (X_S для метода TU+C на 1-2 порядка ниже, чем для методов RU+C и RU+RU при сопоставимых затратах энергии).

Список литературы

[1] Абиев Р.Ш., Макушева И.В. Влияние макро- и микросмешения на процессы растворного синтеза частиц оксидных материалов в микроаппаратах с интенсивно закрученными потоками // Теор. основы хим. технол. 2022. Т. 56. № 2. С. 137.

[2] Mao, Z., Yang, C., 2017. Micro-mixing in chemical reactors: a perspective. Chin. J. Chem. Eng. 25 (4), 381–390.

[3] Guichardon, P., L., Falk. Characterisation of Micromixing Efficiency by the Iodide-Iodate Reaction System. Part I: Experimental Procedure. Chemical Engineering Science. 2000. 55. 4233.

Благодарность

Работа выполнена в рамках Госзадания ИХС РАН (номер госрегистрации темы 0081-2022-0007).

СД-32

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ НИЗКОЗАСТЫВАЮЩИХ ДИЗЕЛЬНЫХ ТОПЛИВ НА КАТАЛИЗАТОРАХ ТИПА SAPO-11

Малунов А.И.[1], Коледина К.Ф.[1], Серебренников Д.В.[1], Забиров А.Р.[1], Яковенко Р.Е.[2], Губайдуллин И.М.[1], Аглиуллин М.Р.[1]

[1]Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, пр. Октября 141, 450075 Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация
[2]Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, Новочеркасск, Россия
malunovv@mail.ru

Работа посвящена изучению процесса изодепарафинизации гидроочищенного дизельного топлива фракции на лабораторной каталитической установке с использованием катализаторов типа SAPO-11 различной структуры в условиях варьирования технологических параметров (температура 280-360 °С с шагом 20 °С, давление 3 МПа, объемная скорость подачи сырья 1-2 $ч^{-1}$) с использованием водородосодержащего газа. Определены состав и свойства сырья процесса и полученных продуктов. Показано, что оптимальными катализатором процесса переработки гидроочищенного дизельного топлива с точки зрения выхода и свойств получаемого продукта является SAPO-11 с преобладающим количеством умеренных кислотных центров по Бренстеду. Полученные закономерности влияния силокоалюмофосфатных катализаторов с различной кислотностью [1] позволят выявить оптимальные параметры реализации процесса переработки гидроочищенного дизельного топлива под давлением водорода, что сделает возможным получать продукты с высоким качеством и количеством.

Выявленные закономерности влияния технологических параметров процесса безводородной переработки прямогонной дизельной фракции на катализаторе типа SAPO-11 на состав, свойства и выход полученных продуктов позволят выбирать оптимальные параметры реализации процесса для сырья различного состава, что даст возможность получать продукты лучшего качества с минимальными экономическими и энергетическими затратами.

Список литературы

[1] Serebrennikov, D.V., Zabirov, A.R., Kuvatova, R.Z., Malunov A.I. et al. Template/Al_2O_3 Ratio in Reaction Gels as a Tool to Control the Crystal Morphology, Crystal Dispersion, and Catalytic Performance in Hydroisomerization of n-Hexadecane over SAPO-11 Molecular Sieves. Pet. Chem. 64, 1276–1285 (2024). https://doi.org/10.1134/S0965544124080188.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания ИНК УФИЦ РАН (тема № FMRS-2024-0012 «Молекулярно-ситовые бифункциональные каталитические системы получения низкозастывающих дизельных топлив»).

СД-33

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА СМЕСЕВОГО СЫРЬЯ ПРИ ВОВЛЕЧЕНИИ В ПЕРЕРАБОТКУ ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ ТЯЖЕЛОГО ГАЗОЙЛЯ КОКСОВАНИЯ И ОСТАТКА ГИДРОКРЕКИНГА

Мальцев В.В., Назарова Г.Ю., Ивашкина Е.Н.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия, E-mail: vvm63@tpu.ru

Оптимизация технико-экономических показателей нефтеперерабатывающих заводов и повышение глубины переработки нефти являются ключевыми задачами современной нефтеперерабатывающей промышленности. Одной из технологий, требующей непрерывной оптимизации является процесс каталитического крекинга, который позволяет перерабатывать тяжелые нефтяные потоки в ценные продукты, такие как высокооктановый бензин и олефинсодержащие газы. Для повышения эффективности процесса появляется интерес к переработке смесевого сырья процесса при вовлечении в переработку низкомаржинальных потоков.

Целью работы является экспериментальное исследование закономерностей процесса каталитического крекинга при вовлечении в переработку вакуумного газойля тяжелого газойля коксования и остатка гидрокрекинга на лабораторной установке МАК-10.

Таблица 1. Физико-химические свойства, вовлекаемых в процесс каталитического крекинга потоков

Свойство	Вакуумный дистиллят г/0	Тяжелый газойль ксования	Остаток гидрокрекинга
Плотность 20°С, кг/м3	900,8	916,7	836,7
Содержание серы, %	0,126	1,351	0,0019
Молекулярная масса, кг/кмоль	396	403	362,3

Исследование процесса каталитического крекинга выполнено с использованием лабораторной установки МАК-10 со стационарным слоем катализатора при температуре 502 °С, соотношение катализатор : сырье составило 3:1 (ASTM 3907), максимальное время дозирования 75 с. Образцы свежего катализатора подвергались гидротермальной обработке в среде 100%-ного пара при температуре 788 °С в течение 5 часов (ASTM D 4463). Анализ фракционного состава продуктов процесса каталитического крекинга проводился с использованием газо-жидкостной хроматографии (ASTM 2887). На

рисунках 1-2 приведены результаты исследования процесса каталитического крекинга на лабораторной установке со стационарным слоем катализатора.

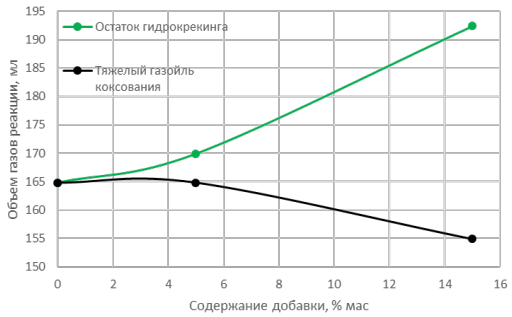


Рисунок 1. Объем получаемых газов в зависимости от количества добавки

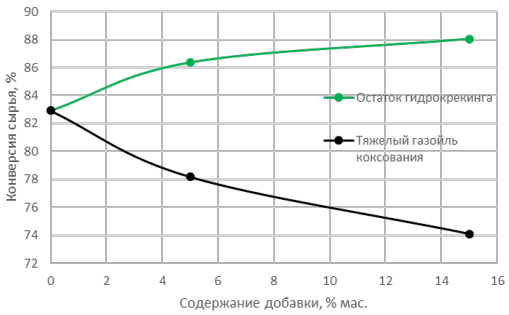


Рисунок 2. Конверсия сырья в зависимости от количества добавки

Экспериментальные исследования показали, что вовлечение остатка гидрокрекинга до 15 % мас. способствует увеличению объема, получаемых газов на 27,6 мл, конверсия сырья возросла на 5,1 % мас. по сравнению с переработкой вакуумного газойля. Добавление тяжелого газойля коксования до 15 % мас. снижает объем, образующихся газов на 4,9 мл, конверсия снижается на 8,8 % мас.

По результатам проведенных экспериментальных исследований определены константы скорости химических реакций образования целевых и побочных продуктов процесса. В таблице 2 представлены значения констант скоростей химической реакции для смесевого сырья с добавлением 15 % мас. остатка гидрокрекинга и 15 % мас. тяжелого газойля коксования.

Таблица 2. Результаты расчета констант скоростей химических реакций процесса каталитического крекинга

	Бензин	Жирный газ	Легкий газойл	Кокс	
	k2, с-1	k3, с-1	k1, с-1	k4, с-1	k5, с-1
15% Тяжелого газойля	0,0167	0,0055	0,0148	0,00127	0,00048
15% Ост. Гидрокреуинга	0,024	0,007	0,01801	0,00236	0,00051

Установленные закономерности позволяют оценить целесообразность вовлечения низкомаржинальных потоков в процесс каталитического крекинга. Полученные результаты будут использоваться при математическом моделировании процесса.

СД-34

СОВМЕСТНАЯ КОНВЕРСИЯ СЕРУ- И КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ СУБСТРАТОВ В ПРИСУТСТВИИ МАГНИТООТДЕЛЯЕМЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Маркова М.Е., Емельянова С.Д., Филатова А.Е., Степачёва А.А., Сульман М.Г.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия, mashulikmarkova@gmail.com

В долгосрочной перспективе интеграция возобновляемого сырья в процессы нефтепереработки может стать конкурентоспособным аспектом [1]. Внедрение возобновляемого сырья позволит улучшить качество продукции, которое в настоящее время производится на нефтеперерабатывающих заводах, благодаря снижению содержания серы, ароматических соединений и олефинов, одновременно улучшая теплоту сгорания и смазочные свойства [2]. Нефтеперерабатывающие заводы уже имеют хорошо развитую инфраструктуру для производства топлива и основных химических веществ и, следовательно, не потребуют дополнительных интенсивных инвестиций для переработки альтернативных видов сырья. С этой точки зрения, совместная переработка биомассы с нефтяными фракциями является привлекательным вариантом [3]. Существуют две основные технологии, которые могут быть использованы для совместной переработки биомассы с нефтяными фракциями: первая – каталитическая гидропереработка и вторая – жидкофазный каталитический крекинг [4, 5]. Обе технологии можно найти практически на любом нефтеперерабатывающем заводе. Процесс гидроочистки направлен на извлечение нежелательных гетероатомов, таких как сера, азот и кислород, а также металлов. Кроме того, в процессе гидроочистки возможно восстановление непредельных и ароматических соединений, гидроизомеризация и частичный гидрокрекинг. Последние несколько лет каталитическая гидропереработка вовлекается в процессы конверсии биомассы в жидкое топливо. Такие процессы, как гидродеоксигенация, гидрирование и гидрокрекинг используются для производства биодизельного топлива второго поколения [6, 7]. Эти процессы проводятся по аналогии с процессами гидроочистки нефтяных фракций и могут быть легко интегрированы в существующие нефтеперерабатывающие заводы. На данный момент количество исследований, посвященных совместной переработки нефтяных фракций и биомассы, ограничено. Основными

направлениями исследований являются гидроочистка растительных масел и дизельной нефтяной фракции, гидроочистка био-нефти и бензиновой фракции, и каталитический крекинг био-нефти и вакуумного газойля [8, 9]. Процессы гидроочистки, как правило проводятся в проточном режиме при температуре 280-420 °C, при высоких давлениях (50-90 атм) с высоким соотношением водород:сырье. В качестве катализаторов практически во всех исследованиях используются сульфидные или фосфидные CoMo и NiMo катализаторы, нанесенные на Al_2O_3 [10]. Несколько работ посвящено исследованию эффективности Pt- и Rh- катализаторов, нанесенных на оксид алюминия или уголь [11]. Анализ существующих подходов показал, что разработки, направленные на снижение температуры, потребления водорода и улучшения эффективности за счет использования стабильных и активных катализаторов являются перспективным направлением.

В данной работе изучен процесс совместной гидроочистки модельных серу- и кислородсодержащих соединений в присутствии магнитоотделяемого катализатора с использованием растворителя в сверхкритическом состоянии. Катализатор $Ru\text{-}Fe_3O_4\text{-}SiO_2$ готовили методом пропитки магнитоотделяемого носителя $Fe_3O_4\text{-}SiO_2$ раствором гидроксохлорида рутения. Магнитоотделяемый носитель был приготовлен полиольным методом. В качестве модельных соединений были протестированы тиофен-анизол, дибензотиофен-анизол, дибензотиофен-гваякол. В работе изучено влияние полярного (пропанол-2) и неполярного (гексан) растворителей и их смеси в сверхкритичеком состоянии.

Список литературы

[1] Liaqat S., et al. // Chemical Engineering Journal, 2024. V. 499. P. 155981.
[2] Pontes N.S., et al. // Fuel, 2021. V. 288. P. 119654.
[3] Vuppaladadiyam A.K., et al. // Adv. Hydrotreating Integrated Biofuel Production, 2024, P. 327.
[4] Jindal M., et al. // Biomass and Bioenergy, 2024. V. 183. P. 107119.
[5] Zhao Y., Guo X., Fang Y. // Fuel, 2014. V.365. P. 131234.
[6] Kalnes T., Marker T., Shonnard D.R. // Int J Chem Reactor Eng., 2007. V. 5. P. A48.
[7] Kumar V., et al. // Journal of the Energy Institute, 2025. V. 118. P. 101880.
[8] Bezergianni S., et al. // Progress in Energy and Combustion Science, 2018. V. 68. P. 29.
[9] Wang F., et al. // Fuel Processing Technology, 2016. V. 146. P. 62.
[10] Yatimi Y., et al. // Arabian Journal of Chemistry, 2024. V. 17 (3). P. 105610.
[11] Naik D.V., et al. // RSC Adv., 2015. V. 5. P. 398.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 25-73-10251).

СД-35

ВЛИЯНИЕ МЕТОДА НАНЕСЕНИЯ АКТИВНОГО МЕТАЛЛА НА СТРУКТУРУ И КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ СИСТЕМ НИКЕЛЬ-ШУНГИТ

Маркова М.Е., Емельянова С.Д., Крылов Д.О., Степачёва А.А., Матвеева В.Г., Сульман М.Г.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия,
mashulikmarkova@gmail.com

Непредельные алифатические и ароматические спирты, такие как аллиловый, олеиловый, бензиловый спирты, гераниол и т.д. являются важными реагентами для химической промышленности. Они используются в синтезе фармацевтических субстанций, душистых веществ, для производства полимеров, пестицидов и других продуктов. На сегодняшний день существуют различные методы получения ненасыщенных спиртов, основными из которых являются гидрирование карбонильных и карбоксильных соединений, а также реакция Принса. Первый метод признан наименее затратным, но имеет такие недостатки как контроль селективности процесса [1]. Поэтому разработка новых катализаторов, позволяющих увеличить селективность гидрирования к ненасыщенным спиртам, является актуальной задачей.

Катализаторы на основе углеродных носителей, таких как активированный уголь, углеродные нанотрубки и фуллерен, обеспечивают высокую селективность по целевому продукту и, благодаря их большой удельной поверхности, высокую скорость реакции [2]. Носители на основе углерода часто получают путем карбонизации различных углеродсодержащих материалов, таких как скорлупа кокосовых орехов, кукурузные початки или даже отработанные шины [3, 4]. Полученные материалы имеют хорошую тепло- и электропроводность, обладают высокой механической стойкостью и высокой удельной поверхностью. Что касается дизайна новых катализаторов, большинство из углеродных аллотропов были признаны пригодными для использования либо в качестве автономных катализаторов, либо в качестве носителей для синтеза (нано) композитных/гибридных катализаторов, в зависимости от предполагаемых свойств и области применения.

Природные углеродные материалы, такие как антрацит и шунгит обладают теми же свойствами, что и синтетические углеродные материалы (активированные угли, углеродные нанотрубки, фуллерены и т.д.), но в силу

натурального происхождения могут включать минеральные компоненты (в основном, оксиды металлов), которые придают этим материалам дополнительные свойства и могут оказывать влияние на активность полученных катализаторов.

Шунгит – это природный углеродсодержащий материал, обладающий высокой сорбционной способностью и высокими восстановительными свойствами. В последние годы шунгит используют для производства фильтрантов, сорбентов, углеродных молекулярных сит [5]. На сегодняшний день известно лишь небольшое количество работ, где шунгит применяется в качестве носителей для катализаторов [6, 7]. Основной проблемой использования шунгита в катализе является его низкая удельная площадь поверхности, которая снижается еще больше при формировании частиц активной фазы. Однако использование новых техник нанесения активной фазы и/или предобработки исходного шунгита может значительно увеличить площадь поверхности и каталитические свойства полученного композита.

В данной работе приводится сравнение морфологии и структуры систем никель-шунгит, полученных различными методами. В рамках работы изучено влияние предобработки шунгита кислотами и щелочами с целью увеличения пористости за счет вымывания минеральных компонентов. Кроме того, приводится сравнение морфологии, состава и структуры катализаторов на основе шунгита, синтезированных методами пропитки по влагоемкости, пропитки с использованием ультразвуковой обработки, а также осаждения в субкритической воде.

Список литературы

[1] Potapov V.A., et al. // Russian Journal of Organic Chemistry. 2016. V. 52 (12). P. 1733.
[2] Hashemi M., et al. // Synth. React. Inorg. Met.-Org. Nano-Met. Chem. 2016. V. 46. P. 959.
[3] Yang K., et al. // Bioresour. Technol. 2010. V. 101. P. 6163.
[4] Ariyadejwanich P., et al. // Carbon, 2003. V. 41. P. 157.
[5] Передерий М.А., Кураков Ю.И., Маликов И.Н. // Металлургиздат, 2013. 309 с.
[6] Токпаев Р.Р., и др. // Вестник КазНУ. Серия химическая. 2011. Т. 4 (64). С. 193.
[7] Ermagambet B.T., et al. // Solid Fuel Chemistry. 2017. V. 51 (2). P. 101.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 25-73-00359).

СД-36

РАЗРАБОТКА МЕТОДА РАСЧЁТА УДЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ И ПОРИСТОСТИ КАТАЛИЗАТОРОВ БЕЗ ВМЕШАТЕЛЬСТВА ОПЕРАТОРА НА ОСНОВЕ НЕЙРОСЕТЕВОГО ПОДХОДА

Мельгунова Е.А., Аюпов А.Б.

Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения РАН», Новосибирск, Россия
melena@catalysis.ru

В процессе математического моделирования промышленных реакторов и разработки катализаторов требуется информация о структурных характеристиках катализаторов. Для измерения удельной поверхности используется традиционный статический метод Брунауэра-Эммета-Теллера (БЭТ), несмотря на ряд существенных недостатков связанных, в частности, с неопределённостью при подборе интервала давлений, внутри которого адсорбционная модель удовлетворительно описывает эксперимент. Неопределенность заключается в том, что·изотерма БЭТ, перестроенная в виде $n_{БЭТ}(p/p°) \cdot (1 - p/p°)$, является гладкой функцией $p/p°$ при любом $C_{БЭТ} > 1$, на которой, как показывают типичные экспериментальные данные, существует, по крайней мере, один максимум. Рекомендации IUPAC, сформулированные в 2015 году на основе многолетних исследований, предписывают, что точки на изотерме адсорбции, соответствующие ниспадающей ветви кривой, не должны включаться в искомый диапазон. Таким образом, IUPAC определил правую границу $p/p°$ диапазона БЭТ. Критериев к выбору левой границы IUPAC не формулирует, за исключением требования неотрицательности коэффициента $C_{БЭТ}$. В данной работе предлагается инновационный подход определения удельной поверхности, основанный на модификации классического метода БЭТ, который решает данную проблему.

Так, в работе [1] была развита идея нормировки изотерм адсорбции – предложен следующий вид уравнения: $n(p/p°)\cdot(1- p/p°)^k$, где $k > 1$. При любом k, такие зависимости имеют максимум, положение которого можно достаточно точно определить непосредственно из эксперимента. Особый интерес представляет случай $k = 2$, когда, как легко показать аналитически, абсцисса точки максимума строго соответствует положению так называемой Точки Б [2] на изотерме адсорбции БЭТ, т.е. максимуму зависимости $n(p/p°)\cdot(1-p/p°)^2$

соответствует давление, при котором количество адсорбированного газа численно равно ёмкости адсорбированного монослоя в модели БЭТ.

Таким образом, предложенный метод автоматизирует расчёт удельной поверхности, снижает субъективность (неопределённость) и повышает точность. Данный подход позволяет автоматизировать расчёт a_S(БЭТ) из экспериментальных данных, что особенно важно, поскольку адсорбционная порометрия активно используется во всём мире, в том числе исследователями не специализирующимися в области адсорбционных явлений. В докладе рассмотрен ряд примеров, раскрывающих возможности предложенного способа определения параметров БЭТ. Особое внимание уделено случаям существенного перекрывания диапазонов полислойной адсорбции и капиллярной конденсации. Разобраны случаи адсорбции на стандартных образцах удельной поверхности, объёма и размера мезопор (например, ГСО 10586-2015), мезопористых металл-органических каркасных полимерах, и др. Рассчитываемые в соответствии с описанным подходом значения a_S(БЭТ) удовлетворительно согласуются с независимыми данными [3] по определению удельной поверхности пористых материалов.

Список литературы

[1] Mel'gunov M.S., Ayupov A.B. Direct method for evaluation of BET adsorbed monolayer capacity // Microporous Mesoporous Mater. 2017. Vol. 243. P. 147–153.

[2] M. Thommes, K. Kaneko, A.V. Neimark, J.P. Olivier, F. Rodriguez-Reinoso, J. Rouquerol, K.S.W. Sing // Pure Appl. Chem. 2015. Vol. 87. P. 1051-1069.

[3] Furukawa H. et al. Ultrahigh Porosity in Metal-Organic Frameworks // Science. 2010. Vol. 329, № 5990. P. 424–428.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0034).

СД-37

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РАЗЛИЧНЫХ ФОРМ УКЛАДКИ СТЕКЛОТКАННОГО КАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ ПРОЦЕССА МЕТАНИРОВАНИЯ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА

Михайлов Я.А.[1], **Матигоров А.В.**[1], **Лопатин С.А.**[1,2], **Загоруйко А.Н.**[1,2], **Елышев А.В.**[1]

[1]Тюменский государственный университет, 625003, Тюмень, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения РАН, Новосибирск, 630090, Россия
y.a.mikhajlov@utmn.ru

Метанирование углекислого газа (CO_2) представляет собой важный процесс в области химической промышленности и энергетики, направленный на преобразование CO_2 в метан (CH_4) с использованием водорода (H_2).

Эффективность процесса метанирования зависит от способа укладки катализатора в реакторе, поскольку правильное распределение газового потока улучшает контакт с катализатором, повышая его активность и селективность [1]. Перспективным типом каталитических структур с хорошими показателями тепло- и массопереноса может быть стекловолокно, также оно обладает высокой удельной площадью поверхности и термической стабильностью [2–4].

Помимо этого, ключевым аспектом является оптимальная загрузка активного компонента, обеспечивающая равномерное распределение высокодисперсных частиц и максимальное использование каталитически активных центров.

Данная работа посвящена оптимизации способа упаковки стекловолокнистого катализатора (СВК) в реакторе и определению оптимальной концентрации активного компонента. Для это было исследовано:

1. три формы укладки СВК в реактор: плотно уложенные пластины ткани (КП), пластины с сеткой между ними (КПС) и скрутка стеклоткани (С);
2. три различных концентрации активного компонента (Ni): 10 %, 5 % и 2 %.

На рисунке 1а,б представлены графики конверсии углекислого газ и селективности по метану в ходе реакции метанирования на различных формах упаковки и с различным содержанием Ni. Для корректного сравнения GHSV для всех катализаторов выдерживали одинаковым: 11765 h^{-1}.

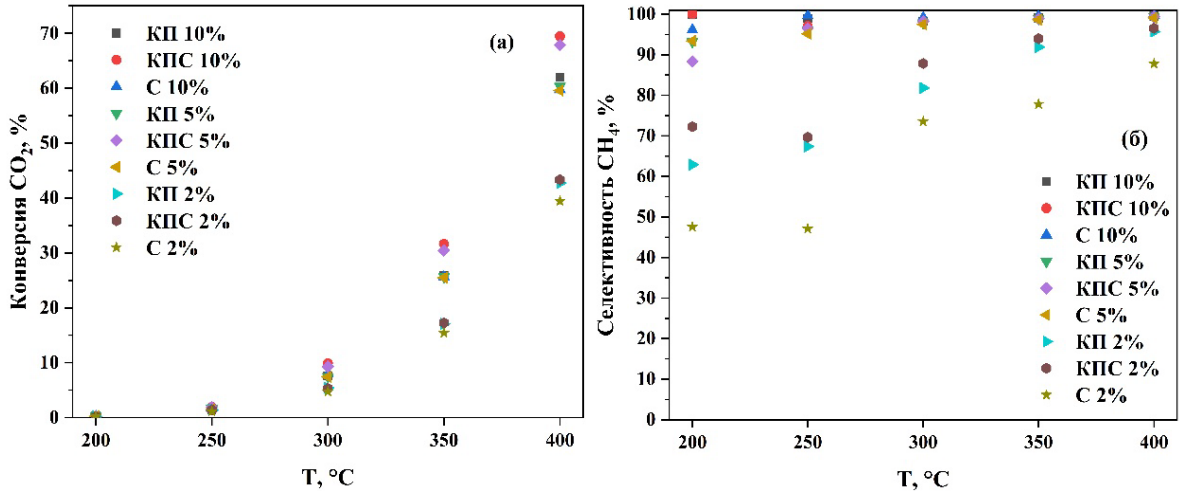


Рисунок 1. Кривые конверсии CO_2 (a) и селективности CH_4 (b) от температуры реакции для разных типов упаковок стеклоткани

Образцы типа «КПС» демонстрирует наивысшую конверсию благодаря наличию сетки между пластинами стеклоткани, которая усиливает турбулентность и обеспечивает равномерное распределение потока. Образцы типа «С» за счёт продольного расположения увеличивают длину контакта потока с каталитической поверхностью, но не достигают такого уровня турбулентности, как образцы пластин с сеткой. При этом интересно, что значения конверсии для образцов с 10 % и 5 % Ni почти одинаково для всех форм укладки. Это объясняется хорошей дисперсностью металла на поверхности стекловолокна для 5 %.

Таким образом, оптимальной можно считать загрузку никеля 5 %, что обеспечивает достаточное число высокодисперсных активных центров, а использование сетки между пластинами значительно улучшает конверсию за счёт повышения турбулентности и равномерности распределения потока.

Список литературы

[1] Structured catalysts and reactors–Perspectives for demanding applications / F. Kapteijn, J.A. Moulijn // Catalysis Today, 2022, V. 383, pp. 5-14.

[2] А.Н. Загоруйко, С.А. Лопатин. Структурированные каталитические системы на основе стекловолокнистых катализаторов. Новосибирск, издательство НГТУ, 2018, 204 с.

[3] Catalytic device on the base of glass-fiber catalyst for environmentally safe combustion of fuels and utilization of toxic wastes / S. Lopatin, P. Mikenin, A. Elyshev, S. Udovichenko, A. Zagoruiko // Chemical Engineering Journal, 2019, V. 373, pp. 406-412.

[4] K. Golyashova, P. Mikenin, A. Elyshev, A. Bobylev, A. Matigorov, E. Paukshtis, S. Lopatin, A. Zagoruiko Structured catalytic cartridges for SO2 oxidation in flue gases of coal-fired powerplants //Chemical Engineering Journal. – 2019. – V. 378. – pp. 122194.

Благодарность

Исследования выполнены при поддержке НИР ГЗ (FEWZ-2024-0015). «Структурированные микроволокнистые катализаторы новых геометрических форм и сорбционно-каталитические процессы одностадийного производства водорода на их основе».

СД-38

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПАРОВОГО РИФОРМИНГА МЕТАНА ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДА СЛУЧАЙНОГО ЛЕСА

Мотаев К.А.[1,2], Копытов В.В.[1], Петришена А.С.[1], Елышев А.В.[1]

[1]Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
v.v.kopytov@yandex.ru

Паровой риформинг метана является широко используемым процессом для производства водорода. Благодаря растущему спросу на водород [1] наблюдается всё большее использование парового риформинга метана в промышленных целях, в том числе с привлечением «зеленых» новаторств [2]. Данная работа направлена на упрощение поиска оптимального катализатора, способного достичь максимальной конверсии метана.

Учитывая растущую промышленную значимость парового риформинга метана, применение методов машинного обучения представляется перспективным подходом для разработки высокоэффективных катализаторов. Ключевым аспектом такой оптимизации является достижение максимальной конверсии метана, что напрямую определяет выход водорода. Проведенный анализ выявил устойчивые корреляции между экспериментальными данными и свойствами.

Машинное обучение может быть эффективно применено для анализа литературных данных с целью построения прогностической модели.

В нашей модели было выбрано 19 входных параметров и 1 выходной параметр. Такие параметры, как температура реакции (K), массовая потоковая скорость (Л/$г_{кат}$·ч), давление (МПа), соотношение CH_4/H_2O, диаметр реактора(мм), относились к условиям, в которых протекала реакция; такие параметры, как удельная площадь поверхности ($м^2$/г), температура восстановления (K), температура прокаливания (K), время восстановления (ч), время прокаливания (ч), относились к приготовлению самого катализатора и их свойствам, которые он получил до начала процесса парового риформинга метана. Параметр конверсия CH_4 относился к выходным параметрам. Было небольшое количество статей, в которых не было данных о диаметре реактора или массе катализатора, но благодаря малому весу (важности) параметра пропуски в данных были усреднены.

СД-38

На основе данных о 249 экспериментах из 22 статей была построена модель случайного леса с коэффициентом детерминации для тестовых данных $R^2 = 0.75$ и средней абсолютной ошибкой равной MAE = 8.9 в кросс валидации Рис. 1. *Теперь разработанную модель можно применять для прогнозирования эффективности других катализаторов, что значительно сократит временные затраты на экспериментальные исследования. Однако стоит понимать, что данная модель может предсказывать катализаторы лишь в той области, в которой она обучалась, тем самым мы получаем «черный ящик».*

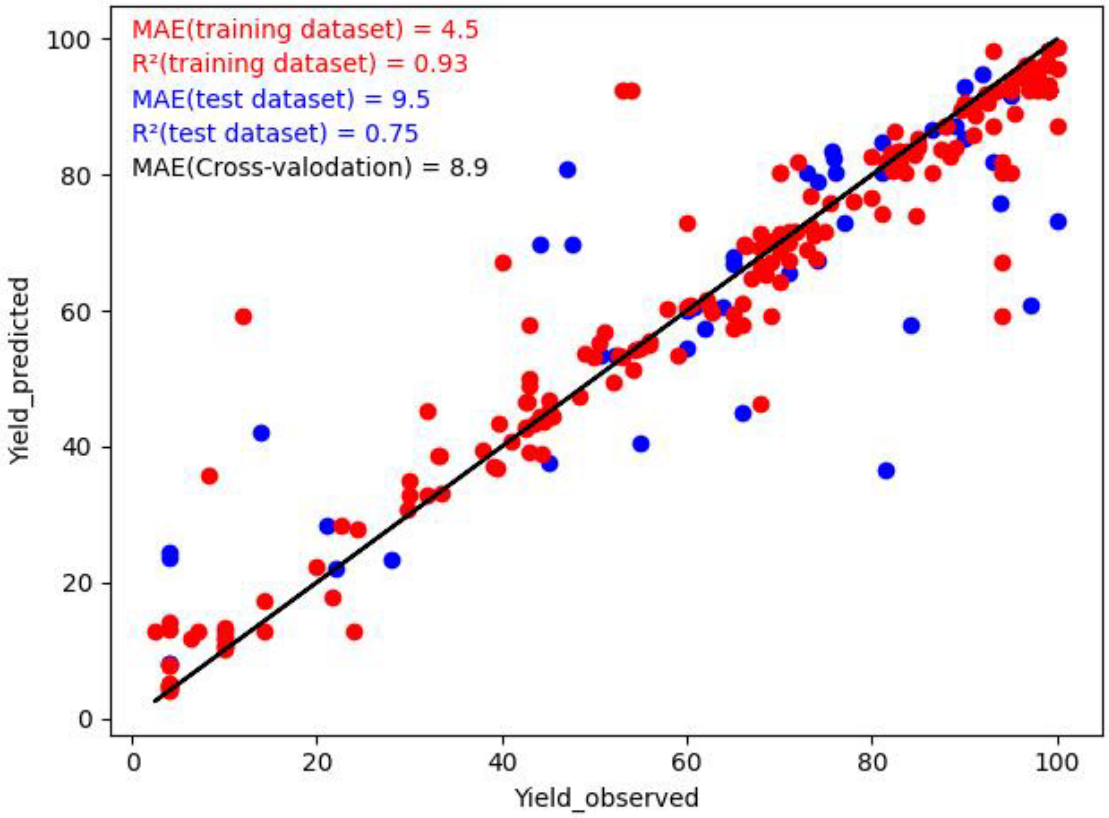


Рисунок 1. График предсказанных значений конверсии метана с помощью модели машинного обучения от наблюдаемых значений конверсии метана

Список литературы

[1] Guan D. et al. Hydrogen society: From present to future //Energy & Environmental Science. – 2023. – Т. 16. – №. 11. – С. 4926-4943.

[2] Afarideh M. et al. A review on solar methane reforming systems for hydrogen production // International Journal of Hydrogen Energy. – 2024.

Благодарности

Исследование выполнено при поддержке НИР ГЗ (FEWZ-2024-0015). «Структурированные микроволокнистые катализаторы новых геометрических форм и сорбционно-каталитические процессы одностадийного производства водорода на их основе».

СД-39

ПРИМЕНЕНИЕ МИКРОФЛЮИДНОЙ УСТАНОВКИ С ПОВЫШЕННЫМ ДАВЛЕНИЕМ ДЛЯ СИНТЕЗА ПЛАТИНОВЫХ НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ

Нечитайлова И.О.[1], Панкова Ю.А.[1], Загребаев А.Д.[1], Еид М.Э.А.[1,2], Молодцов Д.Ю.[1], Панков И.В.[1], Солдатов А.В.[1], Алексеенко А.А.[1], Гуда А.А.[1]

[1]Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
[2]Университет Танты, Танта, Египет
inec@sfedu.ru

Поиск и разработка высокоэффективных платиновых электрокатализаторов для протонно-обменных мембранных топливных элементов является важным направлением развития водородной энергетики[1]. Высокая стоимость платины требует оптимизации структурно-морфологических характеристик Pt-содержащих электрокатализаторов, поскольку они напрямую влияют на электрохимические свойства и определяют возможность масштабного внедрения таких топливных элементов.

В данной работе продемонстрирована возможность синтеза наночастиц платины в микрофлюидном реакторе с использованием аргона в качестве транспортной фазы. Микрофлюидные технологии приобретают все большую популярность в современных исследованиях благодаря их уникальным возможностям: они обеспечивают прецизионный контроль теплообмена, позволяют осуществлять *in situ* мониторинг реакционных процессов и проводить синтез в экстремальных условиях, включая высокие давления и температуры[2–4].

В рамках данного исследования была проведена оптимизация таких параметров, как способ нанесения наночастиц платины на углеродный носитель, скорости потоков газа и реакционной смеси, а также температура синтеза. Микрофлюидная система обеспечила возможность проведения синтеза наночастиц Pt при повышенных температурах и давлениях, что позволило существенно сократить время реакции. Благодаря оптимизированным условиям, одна проточная система обеспечивает получение воспроизводимых образцов материала с производительностью 1,7 г/сутки для катализаторов Pt/C.

Синтезированные Pt/C катализаторы имеют узкое распределение по размерам, со средним диаметром частиц от 3.1 до 3.7 нм, равномерное распределение на углеродном носителе, а также конкурентные с коммерческими

аналогами массовую активность и высокую стабильность в реакции восстановления кислорода.

Список литературы

[1] Alekseenko, A. et al. Activity of Platinum-Based Cathode Electrocatalysts in Oxygen Redaction for Proton-Exchange Membrane Fuel Cells: Influence of the Ionomer Content. Inorganics 12, (2024).

[2] Eid, M. E. A. et al. In Situ XAS Diagnostics of Reductive Hydroformylation Reaction in Segmented Flow Under Elevated Pressure and Temperature. Ind. Eng. Chem. Res. 63, 15397–15403 (2024).

[3] Song, Z.-F. et al. Synthesis of size-controlled Pt/C/PTFE hydrophobic catalyst pellets in a capillary-based microfluidic system. Int. J. Hydrog. Energy 39, 16944–16952 (2014).

[4] Egil, N. V. et al. High-throughput screening of gold nanoparticle synthesis parameters in droplet microfluidics. Mendeleev Commun. 34, 783–785 (2024).

Благодарность

Данное исследование выполнено в рамках программы стратегического академического лидерства Южного федерального университета («Приоритет 2030»).

СД-40

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ Н-БУТАНА В БУТАДИЕН-1,3 НА АЛЮМОХРОМОВОМ КАТАЛИЗАТОРЕ

Овчинникова Е.В. **Борисова Е.С., Петров Р.В., Чумаченко В.А., Носков А.С.**

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
evo@catalysis.ru

Одностадийное вакуумное дегидрирование н-бутана на алюмохромовом катализаторе (Catadiene®) – важная промышленная технология получения бутадиена-1,3, который является одним из основных мономеров промышленности синтетического каучука. Процесс реализуется в адиабатических реакторах со стационарным слоем катализатора и инертного материала, в цикле дегидрирование – регенерация катализатора – продувка. Полный рабочий цикл длится 20-22 мин. Дегидрирование осуществляется по регенеративному принципу, в диапазоне 565-620 °С при 0,01-0,02 МПа, регенерация катализатора для выжига кокса осуществляется воздухом при 600-650 °С. Математическое моделирование динамических процессов позволяет предсказать производительность реактора дегидрирования при вариации технологических условий и определить наилучшие условия реализации процесса.

Ранее нами была разработана кинетическая модель дегидрирования н-бутана в бутадиен на катализаторе K-CrO_x/γ-Al_2O_3, описывающая образование бутадиена через бутилен, образование побочных продуктов и вторичные превращения побочных продуктов, а также образование кокса и его влияние на активность катализатора [1]. Предложена кинетика выжига кокса на катализаторе K-CrO_x/γ-Al_2O_3 в процессе дегидрирования н-бутана [2]. Сформулирована математическая модель рассматриваемого динамического процесса в адиабатическом реакторе [3]. Модель учитывает протекание химических реакций, а также процессы тепломассопереноса по длине зернистого слоя, состоящего из смеси зерен катализатора и частиц инертного материала. Тепловой баланс в реакторе описывается 3-фазной моделью с теплообменом между фазами, которая включает нестационарные уравнения теплопроводности для катализатора и инерта, стационарное уравнение режима идеального вытеснения для газовой фазы. Материальный баланс включает уравнение массового расхода газа, уравнение скорости коксообразования и уравнения для

концентрации каждого компонента газовой смеси [3]. Верификация модели по данным промышленного процесса показала хорошее предсказание состава бутан-бутен-бутадиеновой фракции и удовлетворительное состава побочных продуктов. Расчеты были проведены для условий, при которых исходная реакционная смесь содержала только н-бутан (70 % мас.) и н-бутилен (30 % мас.). Однако в промышленном процессе на вход реактора подается смесь свежего н-бутана и газов рецикла, поэтому исходная реакционная смесь, кроме н-бутана и н-бутилена, может содержать и другие побочные продукты.

В настоящей работе приводятся результаты моделирования процесса дегидрирования для условий, приближенных к промышленному составу сырья, т.е. когда исходный реакционный газ содержит смесь свежего н-бутана и газов рецикла; приведены также результаты исследования влияния температуры дегидрирования на производительность реактора по бутадиену.

Литература

[1] Овчинникова Е.В., Петров Р.В., Чумаченко В.А., Носков А.С. // Катализ в промышленности. 2024. Т.24. №3. С.16-28. (DOI: 10.18412/1816-0387-2024-3-16-28).

[2] Петров Р.В., Овчинникова Е.В., Чумаченко В.А., Носков А.С. // Катализ в промышленности. 2024. Т.24. №5. С.40-45. (DOI: 10.18412/1816-0387-2024-5-40-45).

[3] Борисова Е.С., Ханаев В.М., Чумаченко В.А., Овчинникова Е.В., Носков А.С. // Катализ в промышленности. 2024. Т.24. №3. С.29-38. (DOI: 10.18412/1816-0387-2024-3-29-38).

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0037).

СД-41

ВЛИЯНИЕ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНОЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНУЮ ОРГАНИЗАЦИЮ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КАТАЛИЗАТОРОВ $Ni/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ ДЛЯ МЕТАНИРОВАНИЯ CO_2

Пахарукова В.П.[1], **Харченко Н.А.**[1,2], **Стонкус О.А.**[1], **Сараев А.А.**[1], **Горлова А.М.**[1], **Рогожников В.Н.**[1], **Петров И.Ю.**[1], **Потемкин Д.И.**[1]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Новосибирский Государственный Университет, Новосибирск, Россия
verapakh@catalysis.ru

Разработка катализаторов для реакции метанирования CO_2 привлекает большое внимание. Данный процесс рассматривается в качестве перспективной технологии утилизации углекислого газа, а также хранения получаемого водорода в виде метана на уже существующей инфраструктуре («power-to-gas technology») [1, 2]. Нанесенные никелевые катализаторы на основе смешанного оксида церия-циркония демонстрируют высокую активность и селективность в этом процессе и считаются перспективными системами [3, 4]. Высокая активность катализаторов $Ni/Ce_{1-x}Zr_xO_2$ обусловлена синергетическим действием металла и носителя, возможностью окислительно-восстановительных переходов на поверхности носителя $Ce_{1-x}Zr_xO_2$ с образованием и “залечиванием” кислородных вакансий [5]. Считается, что реакция протекает в области контактов металл/носитель, дисперсность наночастиц металла и развитость контактов металл/носитель влияют на каталитическую активность. В нашем предыдущем исследовании рутениевых катализаторов $Ru/Ce_{1-x}Zr_xO_2$ для метанирования CO_2 мы показали, что выбор газовой среды (окислительная, восстановительная) для термической обработки прекурсора катализатора влияет на структуру, дисперсность нанесенных частиц активного компонента и взаимодействие металл-носитель [6]

Данная работа посвящена исследованиям возможности регулирования дисперсности частиц активного компонента в никелевых катализаторах $Ni/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ путем варьирования газовой среды (восстановительной, инертной, окислительной) для проведения заключительной термообработки прекурсора катализатора. Катализаторы 9 масс. % $Ni/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ были приготовлены методом пропитки по влагоемкости и после сушки подвергнуты различным термическим обработкам в различных средах, а именно на воздухе,

в инертном газе (Ar, He) или восстановительной H_2-содержащей атмосфере. Для установления влияния условий обработки на состояние и структуру соединений никеля была проведена комплексная структурная диагностика методами порошковой рентгеновской дифракции, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, комбинационной спектроскопии, хемосорбции CO и рентгенографическим методом анализа распределения атомных пар. Перед использованием в реакции метанирования катализаторы активируются восстановлением в водородсодержащей атмосфере. Проведены исследования изменений состава и структуры катализаторов методом in situ порошковой дифракции, на дифрактометре, оснащенном камерой реактором XRK-900.

Список литературы

[1] S. Rönsch, J. Schneider et al. Fuel 166 (2016) 276.
[2] Bassano C., Deiana P. et al. Fuel 253 (2019) 1071–9.
[3] S. Tada, T. Shimizu, et al. Int. J. Hydrogen Energy 37 (2012) 5527.
[4] B. Nematollahi, M. Rezaei et al. Int. J. Hydrogen Energy 40 (2015) 8539.
[5] N. Martin, F. Hemmingsson et al. Catal. Sci. Technol.9 (2019) 1644.
[6] Pakharukova V.P., Kharchenko N.A. Colloids and Surfaces A 702 (2024) 134962:1-11.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-20075, https://rscf.ru/project/21-73-20075/.

СД-42

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ ПРОМЫШЛЕННОЙ УСТАНОВКИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО РИФОРМИНГА БЕНЗИНОВ ПРИ ВОВЛЕЧЕНИИ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ СЫРЬЕВЫХ ПОТОКОВ

Пчелинцева И.В., Ивашкина Е.Н., Чернякова Е.С., Родевич М.В.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия,
tpu@tpu.ru, yakupovaiv@tpu.ru

Ключевой промышленной технологией получения высокооктановых компонентов моторных топлив в России и за рубежом является процесс каталитического риформинга [1]. Вовлечение дополнительных сырьевых потоков гидропереработки и термодеструктивных процессов создает необходимость переработки бензиновых фракций этих процессов в высокооктановые компоненты бензинов.

В данной работе с использованием математической модели [2] выполнены расчеты основных показателей работы установки при переработке гидрогенизата, а также проведены прогнозные расчеты по вовлечению дополнительных сырьевых потоков на примере нафты гидрокрекинга и бензина с установки замедленного коксования (далее – бензин УЗК) с учетом балансовых возможностей по загрузке промышленной установки. В качестве объекта исследования выбрана промышленная установка каталитического риформинга со стационарным слоем катализатора производительностью 1 млн. т/год по сырью (P = 2,47 МПа, T = 473 °C, расход сырья = 149 $м^3$/ч). Балансовая загрузка установки первичной переработки нефти, в состав которой входит каталитический риформинг, изменяется в пределах 85-110 %, что соответствует 849,0-1100,2 тыс. т/год. Методом газовой хроматографии был исследован углеводородный состав сырья (Таблица 1). Как видно из Таблицы 1, содержание непредельных углеводородов в сырье после этапа подготовки достигает до 1,45 % масс. С использованием математической модели были выполнены расчёты основных показателей работы установки при вовлечении различных соотношений гидрогенизата и гидроочищенной нафты гидрокрекинга/бензина УЗК. Результаты исследований приведены в Таблице 2.

Таблица 1. Углеводородный групповой состав сырьевых потоков процесса каталитического риформинга

Углеводородная группа, % мас.	Гидрогенизат	Нафта гидрокрекинга после гидроочистки	Бензин УЗК после гидроочистки
Парафины	48,8	43,0	64,3
Ароматика	9,62	9,24	9,15
Нафтены	41,3	47,6	25,0
Олефины	0,11	0,21	1,45

Таблица 2. Показатели процесса каталитического риформинга при вовлечении в процесс дополнительных потоков (расчет на модели: 1 – гидроочищенная нафта гидрокрекинга, 2 – бензин УЗК)

Показатель	Гидрогени-зат	Соотношения для смесевого потока гидрогенизат + нафта гидрокрекинга/бензин УЗК, %					
		(70 + 30)		(80 + 20)		(90 + 10)	
		1	2	1	2	1	2
Ароматика, % мас.	63,6	61,9	59,8	62,5	61,0	63,0	62,3
Кокс, % мас.	1,54	1,63	1,89	1,60	1,76	1,57	1,65
Выход риформата, % мас.	80,5	80,4	77,2	80,4	78,3	80,5	79,4
Октановое число (ИМ)	96,1	95,8	94,5	95,9	95,0	96,0	95,6

Вовлечение в переработку до 20 % нафты гидрокрекинга и до 10 % бензина УЗК позволит повысить расширить пул сырья для производства высокооктанового бензина, не снижая при этом качества целевого продукта.

Список литературы

[1] World Oil Outlook 2024 Organization of the Petroleum Exporting Countries. URL: https://woo.opec.org/pdf-download/.

[2] И.В. Пчелинцева, Е.Н. Ивашкина, Е.С. Чернякова и др. Совершенствование математической модели процесса каталитического риформинга со стационарным слоем катализатора // Катализ в промышленности. – 2024. – Т. 24, № 4. – С. 78-93.

Благодарность

Исследования выполнены при поддержке Российского научного фонда.

СД-43

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДОВ СИНТЕЗА V-СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОПОЛИСОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ОДНОСТАДИЙНЫХ ПРОЦЕССАХ ПЕРЕРАБОТКИ КОМПОНЕНТОВ БИОМАССЫ

Родикова Ю.А., Медведева Т.Б., Громов Н.В., Жижина Е.Г.

ФГБУН ФИЦ Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия, bic@catalysis.ru, rodikova@catalysis.ru

Ванадийсодержащие гетерополисоединения (V-ГПС) – перспективные для различных приложений катализа *бифункциональные* катализаторы, являющиеся одновременно сильными бренстедовскими кислотами и обратимо действующими окислителями. В последние годы они находят все большее применение в направлении переработки биомассы в ценные химические вещества, поскольку в их присутствии удается реализовать не только процессы окисления, но и «one-pot» процессы, в которых кислотно-каталитическая реакция гидролиза и последующее окисление получаемых аддуктов объединяются в одну технологическую стадию.

Результаты проведенной работы обеспечивают новую экологичную стратегию получения востребованных V-ГПС структуры Кеггина Si-W-V, P-W-V, Si-Mo-V и P-Mo-V составов, включающую последовательные этапы формирования лакунарных анионов и внедрения в их каркас атомов ванадия (V) в виде свободного от посторонних ионов раствора $H_6V_{10}O_{28}$. Его образование достигается обработкой V_2O_5 концентрированным раствором H_2O_2 по оригинальной методике (схема 1) [1]. Последующее варьирование типа внешнесферного катиона ($H^+ \rightarrow Cs^+$, $n$$Bu_4N^+$) открывает возможности перевода гомогенных V-ГПС в гетерогенное состояние, что упрощает отделение катализатора от реакционной смеси и расширяет области практического применения подобных соединений.

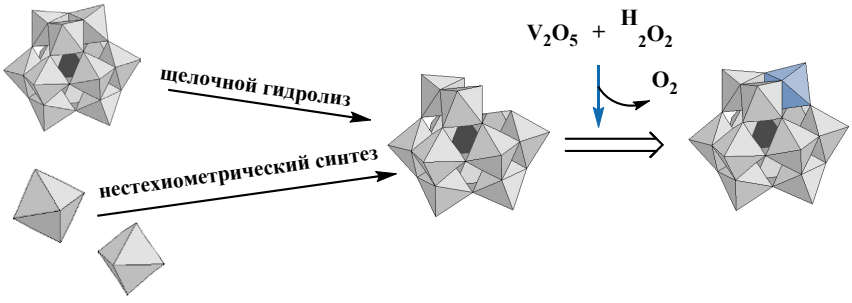
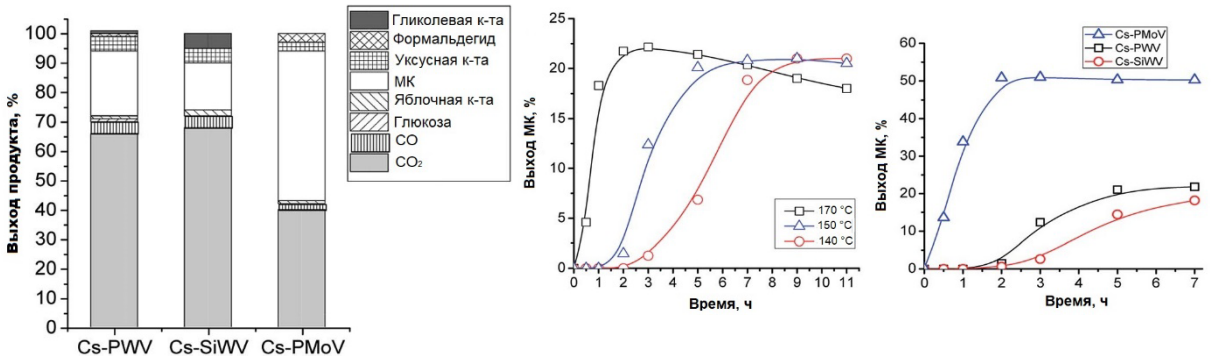


Схема 1. «Пероксидный» метод синтеза V-ГПС

СД-43

С использованием катализаторов, приготовленных по оптимизированным малоотходным технологиям, были получены важные результаты по синтезу муравьиной кислоты (МК) путем однореакторного гидролиза-окисления различных компонентов биомассы, таких как картофельный крахмал [2], сульфатная целлюлоза, ксилан и арабиногалактан, а также ее реальных образцов – газетная бумага, мискантус, древесина осины.

Исследование преобразования крахмала показало, что максимальный выход МК, равный 51 %, достигается в присутствии гетерогенного V-ГПС состава $Cs_{3.5}H_{0.5}PMo_{11}VO_{40}$ при температуре 150 °C:



В оптимальных условиях данный катализатор демонстрирует стабильность в 9 циклах реакции, а также высокие значениям TOF ($моль_{МК}/(моль_{V}\cdot ч)$), превосходящие показатели растворимых аналогов более чем в 10 раз.

Преобразование гемицеллюлоз (ксилан, арабиногалактан) в присутствии гомогенного раствора V-ГПС состава $Co_{0.6}H_{3.8}PMo_{10}V_2O_{40}$ обеспечивает образование МК с выходом до 43 мол. %, тогда как трансформация реальной растительной биомассы приводит к выходам МК от 24 до 53 мас. %. Подобные процессы реализуются в статических реакторах высокого давления (автоклавах) при *P* воздушной смеси 2 МПа и повышенных температурах (> 90 °C) в водной среде.

Список литературы

[1] Rodikova Y.A., Kardash T.Y., Zhizhina E.G. Use of the Peroxide Method for Vanadium Activation to Obtain Mixed Keggin-Type Heteropoly Compounds // Russian Journal of Applied Chemistry. 2023. V. 96. N 11. P. 929-936.

[2] Gromov N.V., Medvedeva T.B., Rodikova Y.A., Babushkin D.E., Panchenko V.N., Timofeeva M.N., Zhizhina E.G., Taran O.P., Parmon V.N. One-Pot Synthesis of Formic Acid via Hydrolysis–Oxidation of Potato Starch in the Presence of Cesium Salts of Heteropoly Acid Catalysts // RSC Advances. 2020. V. 10. N 48. P. 28856-28864.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0035).

СД-44

ОБУЧАЮЩИЙ КОМПЬЮТЕРНЫЙ ТРЕНАЖЕРНЫЙ КОМПЛЕКС РЕАКТОРНОГО БЛОКА ПРЕВРАЩЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ

Ромаденкина С.Б.[1], **Кривоносов А.А.**[2], **Бурухина О.В.**[1,2], **Кузьмина Р.И.**[1], **Ершов Е.С.**[3]

[1]ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия
[2]АО «ИНИУС», Саратов, Россия
[3]ООО «Газпром трансгаз Саратов», Саратов, Россия
romadenkina@yandex.ru

На химических, нефте- и газохимических предприятиях для операторов (а также в колледжах и вузов для студентов соответствующих направлений) внедряются компьютерные тренажерные комплексы (КТК), разработанные с применением современных методов высокоточного моделирования. КТК позволяют обучающимся расширить область знаний, приобрести навыки управления аппаратами установки. Включение в КТК аварийных сценариев для обучения персонала позволяет повысить промышленную безопасность предприятия, снизить вероятность возникновения нештатных ситуаций, отработать действия, регламентированные для ликвидации последствий аварий.

В настоящее время на кафедре нефтехимической и техногенной безопасности Института химии СГУ внедрен КТК (рисунок 1) реакторного блока производства НАК предприятия ООО «Саратоворгсинтез» (ПАО «ЛУКОЙЛ»).

Рисунок 1. Главная страница КТК с доступом к эмуляции РСУ и станции полевого оператора

КТК разработан АО «ИНИУС» (по заказу ООО «Саратоворгсинтез») на базе собственной системы моделирования и разработки тренажеров - «Универсальный тренажерный комплекс» (УТК 6.5) [1] и включает в себя полную эмуляцию установки (систем РСУ/ПАЗ (рисунок 2), станции обходчика - полевого оператора (рисунок 3), включая VR (рисунок 4), с эффектом присутствия на

производстве, с возможностью перемещаться по установке и взаимодействовать с органами управления технологического оборудования).

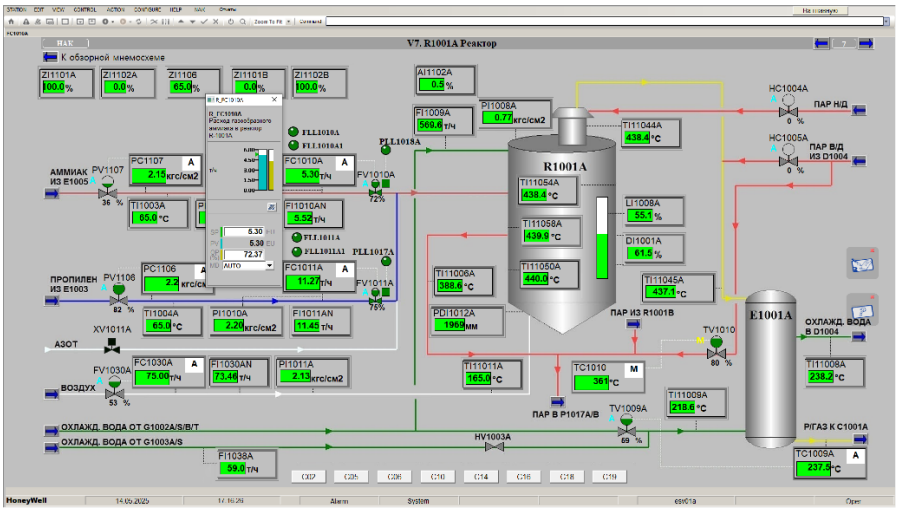


Рисунок 2. Окно эмуляции РСУ/ПАЗ реактора производства НАК

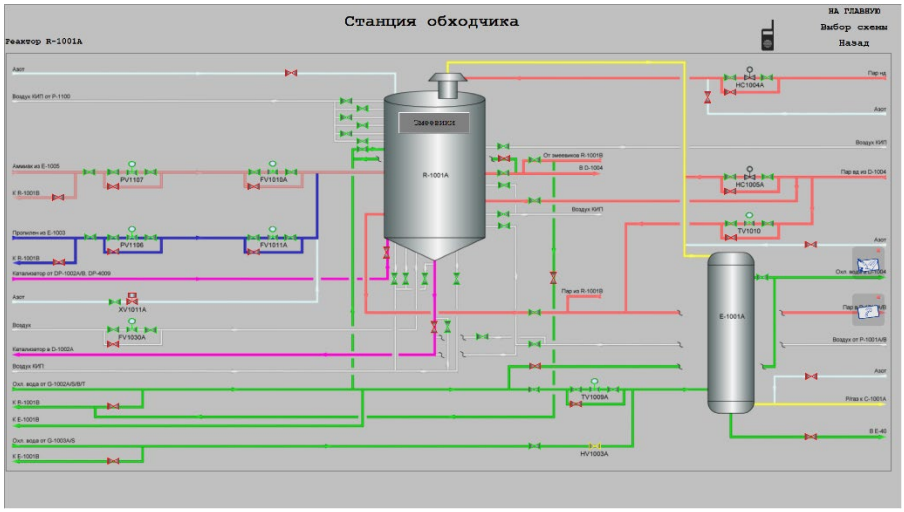


Рисунок 3. Окно станции обходчика (полевого оператора) реактора производства НАК

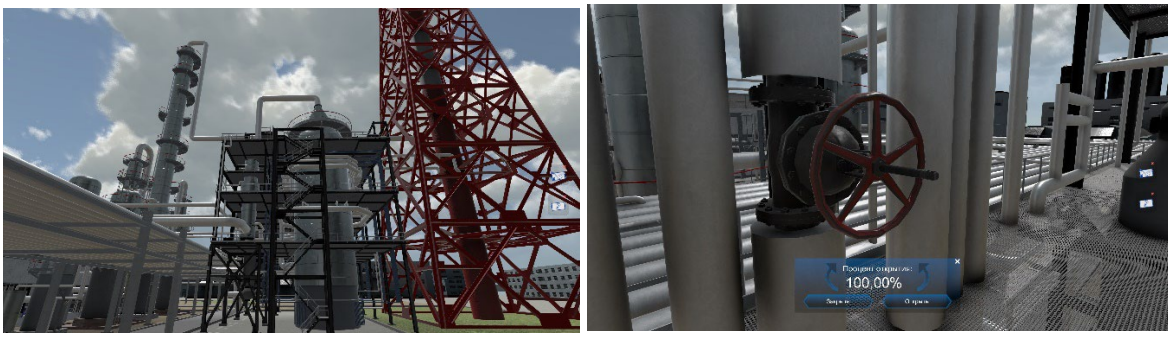


Рисунок 4. VR пространство реактора производства НАК

Список литературы

[1] Применение программных средств универсального тренажерного комплекса для повышения эффективности обучения персонала химических и нефтехимических производств / Кривоносов А.А., Агафонов С.А., Мучкаев В.Ю. и др. // Безопасность труда в промышленности. 2020. № 3. С. 86-92.

СД-45

БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ Pt-Ag КАТАЛИЗАТОРЫ, НАНЕСЕННЫЕ НА Ce-Fe ОКСИДНЫЕ НОСИТЕЛИ, ДЛЯ НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Савельева А.С., Понизовная Д.А, Таратайко А.В., Мамонтов Г.В.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия, blokhina_as@mail.ru

Увеличение количества выбросов различных ароматических соединений представляет большую опасность для окружающей среды и здоровья людей. Толуол – наиболее распространенное летучее органическое соединение, обладающее высокой токсичностью для живых организмов. Нитрофенолы (НФ) представляют собой класс высокотоксичных и не подвергающихся биоразложению органических загрязнителей, встречающихся в водных отходах красильной и фармацевтической промышленности. Эффективными способами нейтрализации толуола и НФ являются каталитическое окисление и восстановление соответственно, в результате чего образуются CO_2, H_2O и менее токсичные аминофенолы.

Применение оксидов переходных металлов, таких как CeO_2, FeO_x, MnO_x в качестве носителей для Ag- и Pt-содержащих катализаторов способствует стабилизации наночастиц металлов и кооперации активных центров Ag, Pt и MeO_x за счет взаимодействия металл-оксид металла, что, в свою очередь, ведет к увеличению их каталитической активности в окислительных и восстановительных процессах.

Целью настоящей работы являлось установление влияния метода синтеза, состава FeO_x, $CeFeO_x$ носителей на физико-химические и каталитические свойства Pt-Ag катализаторов в реакциях глубокого окисления толуола и восстановления п-НФ в п-АФ.

В работе рассмотрены серии FeO_x, CeO_2 и смешанных оксидных Ce-Fe носителей, полученные цитратным методом и соосаждением в различных условиях. Ag-, Pt- и биметаллические катализаторы на их основе были приготовлены пропиткой по влагоемкости, с варьированием предварительной обработки носителей (воздух или H_2/Ar).

Установлено, что смешанные оксиды Ce-Fe проявляют собственную каталитическую активность в реакции окисления толуола, Температура

конверсии толуола растет с увеличением количества Fe в носителе. Нанесение Pt на Ce-Fe носители существенно увеличивает реакционную способность поверхности катализаторов, что подтверждается данными ТПВ-H_2. Установлено, что каталитическое окисление толуола на Pt- и Pt-Ag-катализаторах протекает в низкотемпературной области (от 90-100 °C до 150-170 °C), что делает их перспективными для очистки воздуха от летучих органических соединений.

Восстановление п-НФ на оксидных Ce-Fe носителях не наблюдалось. Показано, что после нанесения моно- и биметаллов на поверхности носителей существенно возрастает скорость восстановления п-НФ. Наиболее активным в реакции восстановления п-НФ являлся Ag/Fe_2O_3 ($k = 2{,}63$ мин$^{-1}$), благодаря формированию активных дисперсных металлических наночастиц серебра на поверхности FeO_x. Для биметаллического катализатора состава 4,5%Ag-0,5%Pt/Fe_2O_3 наблюдается увеличение скорости реакции восстановления п-НФ, что связано с синергетическим эффектом двух металлов, схожий эффект был показан нами ранее в [1].

Таким образом, распределение и состояние металлических и биметаллических Ag-Pt частиц в катализаторах, которое, в свою очередь, зависит от способа синтеза носителей и характера взаимодействия металлов с носителем существенно влияет на каталитическую активность в реакциях нейтрализации ароматических соединений. Для Pt-Ag катализаторов выявлен синергетический эффект, выраженный в росте каталитической активности по сравнению с монометаллическими катализаторами. Замены части платины на менее дорогостоящее серебро делает такие катализаторы перспективными для применения в очистке сточных вод от нитроароматических соединений.

Список литературы

[1] Савельева, А.С. Биметаллические Pt-Ag-катализаторы, нанесенные на мезопористый оксид кремния MCM-41, в реакции восстановления 4-нитрофенола / А.С. Савельева, Е.В. Евдокимова, Г.В. Мамонтов // Журнал неорганической химии. – 2024. – Т. 69, № 11. – С. 1643-1653. – DOI 10.31857/S0044457X24110133. – EDN JKGWRL.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-73-10152. Исследования струрктуры катализаторов методом ПЭМ выполнены с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Национальный центр исследования катализаторов».

СД-46

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТОРА ПРЯМОГО КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА ПО ТЕХНОЛОГИИ ДИРОКС® В КИПЯЩЕМ СЛОЕ ДЛЯ УСТАНОВКИ ПОДГОТОВКИ НЕФТИ НА КОМАНДИРШОРСКОМ МЕСТОРОЖДЕНИИ ПАО «ЛУКОЙЛ»

Кленов О.П.[1], Хайрулин С.Р.[1], Сальников А.В.[1], Ганюшкин Д.В.[2], Белан А.Ф.[2]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]ООО «Энергосила», Ростов-на-Дону, Россия
sergk@catalysis.ru

Разработка надежных, экологически безопасных методов утилизации токсичного сероводорода при освоении месторождений углеводородного сырья особенно в условиях Заполярья Российской Федерации имеет первостепенное значение. Как показал опыт успешной промышленной эксплуатации наиболее приемлемым для решения этой задачи является одностадийный процесс прямого каталитического окисления H_2S с получением элементарной серы, характеризующийся высокой эффективность и компактностью [1].

Ключевым элементом технологии является реактор с кипящим слоем катализатора, уникальной особенностью которого является способность переработки H_2S с одновременной утилизацией тепла эндотермической реакции прямого окисления сероводорода. Моделирование процесса с использованием методов CFD является эффективным «инструментом» в части верификации и оптимизации конструкции реактора для последующего полномасштабного создания установки.

В настоящем сообщении показаны основные результаты CFD моделирования кипящего слоя газ-твердые частицы с отводом тепла реакции с помощью труб теплообменника, расположенных вертикально в кипящем слое и заполненных жидким теплоносителем. Схема движения потоков в трубах показана на рисунке 1.

Была использована модель Эйлера для моделирования гидродинамики многофазного потока. Три фазы использовались в расчетах: газовая, содержащая кислый газ и продукты реакции; твердая - частицы катализатора ИК-12-72 и жидкая - теплоноситель ТЛВ-330 (полиалкилбензол).

Для моделирования работы кипящего слоя и процесса теплообмена между реакционной зоной и теплообменными трубками в качестве расчетной модели была выбрана часть реактора, включающая 7 теплообменных труб, фрагмент

распределительной решетки и часть надтрубного пространства. Расчетная модель была разбита на 0.99 млн 3D ячеек. Расчеты проведены для турбулентного режима течения, использовалась k-ε модель турбулентности (Realizable k-ε model) и улучшенная (enhanced) пристенная функция [2]. Моделирование проводилось на базе пакета CFD программ ANSYS-Fluent. Брутто-реакция селективного окисления сероводорода (реакция Клауса) [3] была использована для описания химии процесса.

На рисунке 2 показано распределение во времени потока тепла, отводимого 1 трубкой из реакционной зоны с кипящим слоем.

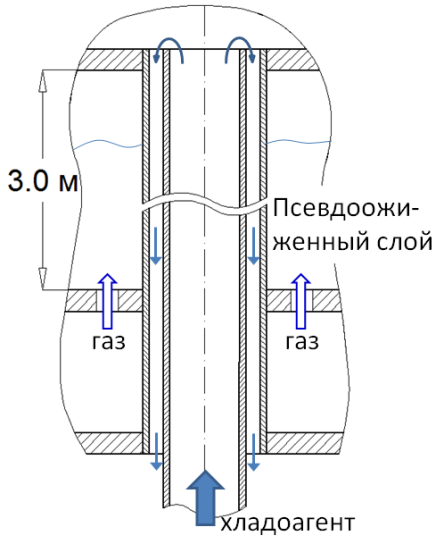


Рис. 1. Схема течения потоков в трубах теплообменника.

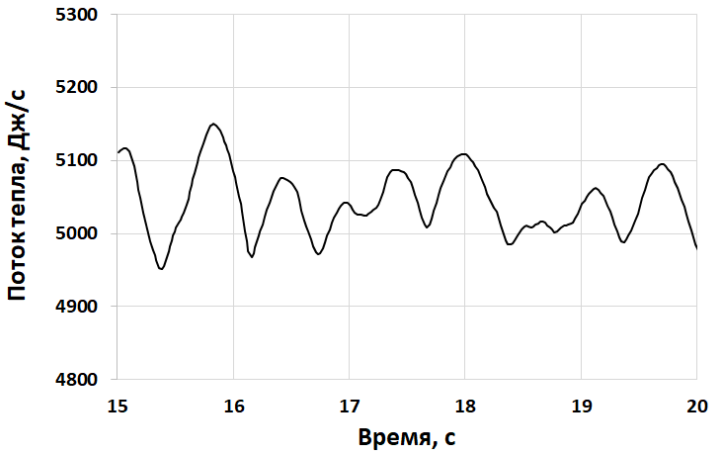


Рис. 2. Поток тепла, снимаемый 1 трубкой теплообменника.

Среднее по времени значение потока тепла, снимаемого 1 трубкой теплообменника, равно $q_{сред}$=5043.7 Дж/с.

Результаты выполненных расчетов были использованы для проектирования и создания реакторного оборудования для промышленной установки прямого каталитического окисления сероводорода по технологии ДИРОКС®.

Список литературы

[1] Khairulin S., Kerzhentsev M., Salnikov A., Ismagilov Z.R. Direct Selective Oxidation of Hydrogen Sulfide: Laboratory, Pilot and Industrial Tests. // Catalysts. 2021. V.11. N9. 1109:1-45.

[2] Fluent. Ansys Fluent Theory Guide. - Canonsburg, PA.: ANSYS Inc., 2011.

[3] A. Piéplu, O. Saur, J-C. Lavalley, O. Legendre, C. Nédez. Claus Catalysis and H2S Selective Oxidation. Catalysis Reviews: Science and Engineering. 40(4), 409-450, 1998.

Благодарность

Работа выполнена частично при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0037) и частично в рамках договора № ЭС-24052024-22 от 24 мая 2024

СД-47

Ru-СОДЕРЖАЩИЕ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПРОЦЕССА ГИДРОГЕНОЛИЗА ПРОПАНА

Сибаа Мохамд[1,*], Харитонцев В.Б.[1], Матигоров А.В.[1], Загоруйко А.Н.[1,2], Елышев А.В.[1]

[1]Тюменский государственный университет, 625003, Тюмень, ул. Перекопская, 15А, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 5, Россия
**E-mail: m.sibaa@utmn.ru*

Повышение эффективности переработки углеводородов и создание отечественных технологий переработки углеводородного сырья являются актуальными задачами для нефтеперерабатывающей промышленности [1]. Отсутствие инфраструктуры для многих газоконденсатных месторождений РФ делает перспективной переработку конденсатов методом гидрогенолиза в легкие парафины, в первую очередь метан, который далее может транспортироваться вместе с основным потоком добываемого природного газа.

Рутений занимает одну из ключевых позиций в современных каталитических процессах и являются одними из самых активных металлов, используемых в процессе гидрогенолиза [2]. Однако, несмотря на высокую активность рутениевых катализаторов, проблемы тепло- и массопереноса при использовании традиционных носителей ограничивают их активность. Применение микроволокнистых носителей является решением данных проблем, благодаря их высокой теплопроводности, массообмену и низким гидравлическим сопротивлением. В данной работе представлены результаты использования Ru-стекловолокнистых катализаторов (Ru/СВК) в процессе гидрогенолиза пропана в транспортируемые компоненты природного газа.

Образцы Ru/СВК с содержанием рутения 0,5 и 0,25 масс. % приготовлены методом импульсного поверхностного термосинтеза (ИПТ) [3]. В качестве источника рутения использовался хлорид рутения. В качестве носителя использовалась стеклоткань (КТ-11-ТО), модифицированная слоем вторичного носителя SiO_2. В качестве источника углеводородов для процесса гидрогенолиза применялась газовая смесь N_2/C_3H_8 с содержанием C_3H_8 = 3 %. Условия проведения эксперимента: атмосферное давление; соотношения потоков газов H_2/C_3H_8: 10/1; общий расход смесь – 45,5 мл/мин. Масса используемого

катализатора – 0,2 г. Предварительно катализаторы восстанавливались в потоке H_2 (150 мл/мин, 5 ч) при 510 °С. В качестве катализатора сравнения использовался катализатор, приготовленный на основе оксида алюминия (1 % Ru/Al_2O_3), по характеристикам схожий с промышленным.

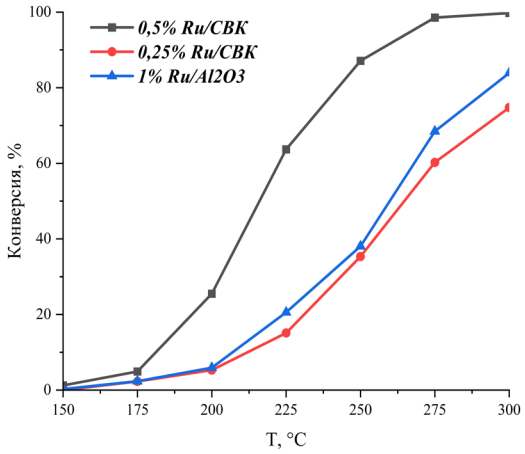


Рисунок 1. Температурная зависимость конверсии пропана для различных катализаторов

Наивысшую каталитическую активность показал катализатор 0,5 % Ru/CBK. При использовании данного катализатора достигалась максимальная конверсия при более низких температурах процесса. Также замечено, что катализатор сравнения демонстрирует более высокую каталитическую активность, чем 0,25 % Ru/CBK, но, учитывая разницу в содержании активного компонента, содержание рутения в катализаторе сравнения в четыре раза выше, чем в 0,25 % Ru/CBK. Учитывая эти различия в массе катализатора и количестве активного компонента, удельная активность катализатора на основе стекловолокна на единицу массы рутения в несколько выше, чем у катализатора на основе оксида алюминия (1 % Ru/Al_2O_3).

Список литературы

[1] Итоги работы Минэнерго России и основные результаты функционирования топливно-энергетического комплекса в 2020 году. Задачи на 2021 год и среднесрочную перспективу. Апрель 2021. 70 с.

[2] Van Broekhoven, E.H., and Vladimir Ponec. // Progress in surface science. 1985. V. 19. I. 4. P. 351-399.

[3] Lopatin, S.A., Tsyrul'nikov, P.G., Kotolevich, Y.S. et al. // Catal. Ind. 2015. V. **7**. P. 329–334.

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22–73–10015-П.

СД-48

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ПОВЕДЕНИЕ НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА БЕТА-ЦЕОЛИТЕ В РЕАКЦИИ ПРЕВРАЩЕНИЯ ЦИТРАЛЯ

Симакова И.Л.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
simakova@catalysis.ru

В настоящее время актуальным является разработка и совершенствование методов переработки возобновляемых терпеноидов в коммерческие соединения. Одним из наиболее востребованных соединений является ментол, широко применяемый в пищевой, косметической, фармацевтической и парфюмерной промышленности, который получают из цитраля в несколько стадий: 1 – гидрирование цитраля в цитронеллаль, 2 – изомеризация цитраля в изопулегол и 3 – гидрирование изопулегола в ментол. Ранее было показано, что в реакции гидрирования цитраля катализатор Ni/H-Beta полученный из нитрата никеля, обладает высокой активностью и селективностью по ментолу [1].

Целью работы является исследование влияния условий температуры прокалки (250, 350, 450 °C) и температуры восстановления (350, 400, 450 °C) на каталитические и физико-химические свойства катализатора Ni/H-Beta модифицированного бентонитом в реакции превращения цитраля в ментол.

Гидрирование цитраля (95 %, Sigma-Aldrich) 0,086 М в циклогексане (15 мл) проводили в автоклаве (T = 70 °C, PH_2 = 10 ати) в присутствии 11%Ni/(H-Beta-38+бентонит) полученного из нитрата. ГЖХ анализ осуществляли на «Хромос ГХ-1000» (BP20), ГХ-МС идентификацию продуктов на Agilent 5973N EI/PCI (VF-5ms). Катализаторы исследовали методами РФА, ПЭМ-EDX.

Результаты влияния термообработки на гидрирование цитраля приведены на рисунке: активность катализатора возрастает с увеличением $T_{пр.}$ до 350 °C, скорость конверсии цитраля увеличивается с ростом $T_{восст}$. Наибольший выход ментола наблюдается при восстановлении оксида никеля при $T_{восст}$. 400 °C. Согласно данным РФА размер частиц NiO после прокалки при 350, 400 и 450 °C составляет 7,5, 9,5 и 11 нм. По данным ПЭМ, равномерно распределённые частицы NiO образуются при всех $T_{пр}$. При этом более высокая селективность образования цитронеллаля, а также изопулегола, наблюдается при $T_{пр}$ = 350 °C и $T_{восст}$ = 400 °C. По-видимому, в этих условиях происходит формирование

оптимальных металлических частиц Ni, а также необходимое соотношение кислотных центров Брэнстеда и Льюиса носителя. Прочное взаимодействие между никелем и носителем способствует стабилизации дисперсности никеля и предотвращению его спекания.

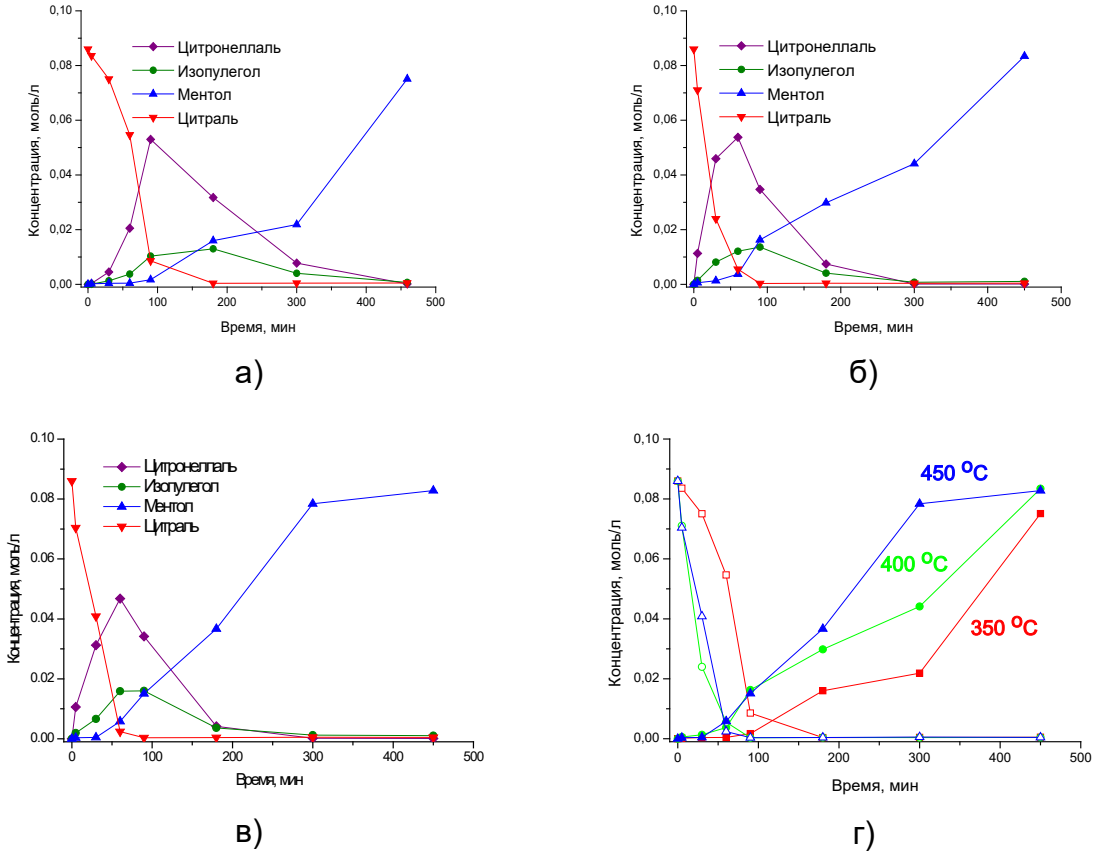


Рис. Кинетические кривые гидрирования цитраля и образования продуктов его гидрирования в присутствии катализатора 11%Ni/(H-Beta-38+бентонит), прокалённого при 350 °C и восстановленного при разных температурах: а) 350 °C; б) 400 °C; в) 450 °C; г) превращение цитраля и образование ментола (открытые и закрытые символы)

Таким образом, при $T_{пр}$ 350 °C и $T_{восст}$ 400 °C происходит формирование наиболее активных центров Ni в Ni/(Beta-38+бентонит), обеспечивающих селективность по ментолу 71 % при полной конверсии цитраля, что связано с корочковым распределением и оптимальным размером Ni по данным РФА, ПЭМ-EDX.

Список литературы

[1] Simakova I.L., Vajglová Z., Martínez-Klimov M., Eränen K., Peurla M., Mäki-Arvela P., Murzin D.Yu. // Organic Process Research & Development. 2023. Vol. 2023. P. 295–310.

Благодарность

Авторы благодарны сотрудникам ИК СО РАН к.ф.-м.н. Е.Ю. Герасимову (ПЭМ), к.х.н. В.П. Пахаруковой (РФА) за помощь в исследовании образцов.
Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0035).

СД-49

СРАВНЕНИЕ АКТИВНОСТИ Pt И Pt-Sn КАТАЛИЗАТОРОВ В СИНТЕЗЕ ГЕРАНИОЛА/НЕРОЛА ИЗ ЦИТРАЛЯ

Симакова И.Л.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
simakova@catalysis.ru

Гераниол и его *цис*-изомер нерол, ценные душистые вещества, широко применяются в медицине, так как обладают высокой биологической активностью, а именно противовоспалительной, противоопухолевой, нейропротекторной и др. Они содержатся в эфирных маслах розы, герани, вербены, бергамота и многих других. Однако растущий спрос на эти соединения стимулирует развитие синтетических методов их получения, среди которых важное место занимает селективное гидрирование цитраля на Pt [1,2].

Целью работы является сравнение активности и изучение возможности повышения выхода гераниола/нерола гидрированием цитраля в присутствии 1%Pt и 1%Pt-0,2%Sn катализаторов, нанесенных на носители разной кислотности – углеродный и оксиды металлов.

Гидрирование цитраля проводили в автоклаве при 70 °C, 10 ати H_2, 150 мг катализатора, 0,086 М раствор цитраля в циклогексане (15 мл). В качестве носителей выбраны Сибунит, TiO_2, SiO_2. Pt-Sn катализаторы готовили двумя способами: 1) предварительное восстановление (H_2); 2) предварительное прокаливание с последующим восстановлением (O_2 и H_2). ГЖХ анализ осуществляли на «Хромос ГХ-1000» (ВР20), ГХ-МС идентификацию продуктов на Agilent 5973N EI/PCI (VF-5ms).

Проведенные исследования показали, что наиболее быстрая и полная конверсия цитраля наблюдается на катализаторе Pt/TiO_2 (рис. 1, а), что обеспечивает наибольший выход гераниола/нерола (рис. 1, б), который далее превращается в цитронеллол и 3,7-диметилоктанол-1 (рис. 1, в, г). Установлено, что добавление олова к Pt на TiO_2 и SiO_2 повышает селективность по ненасыщенным спиртам и немного уменьшает скорость превращения цитраля, что может замедлить и образование продуктов нежелательного последующего гидрирования. Такой эффект может быть вызван частичным декорированием активных центров Pt оловом. Было изучено влияние давления и температуры, найдены и сопоставлены величины Е активации в присутствии Pt и Pt-Sn

катализаторов. Интересно заметить, что на Pt/Сибунит и Pt-Sn/Сибунит ненасыщенные спирты почти не образуются.

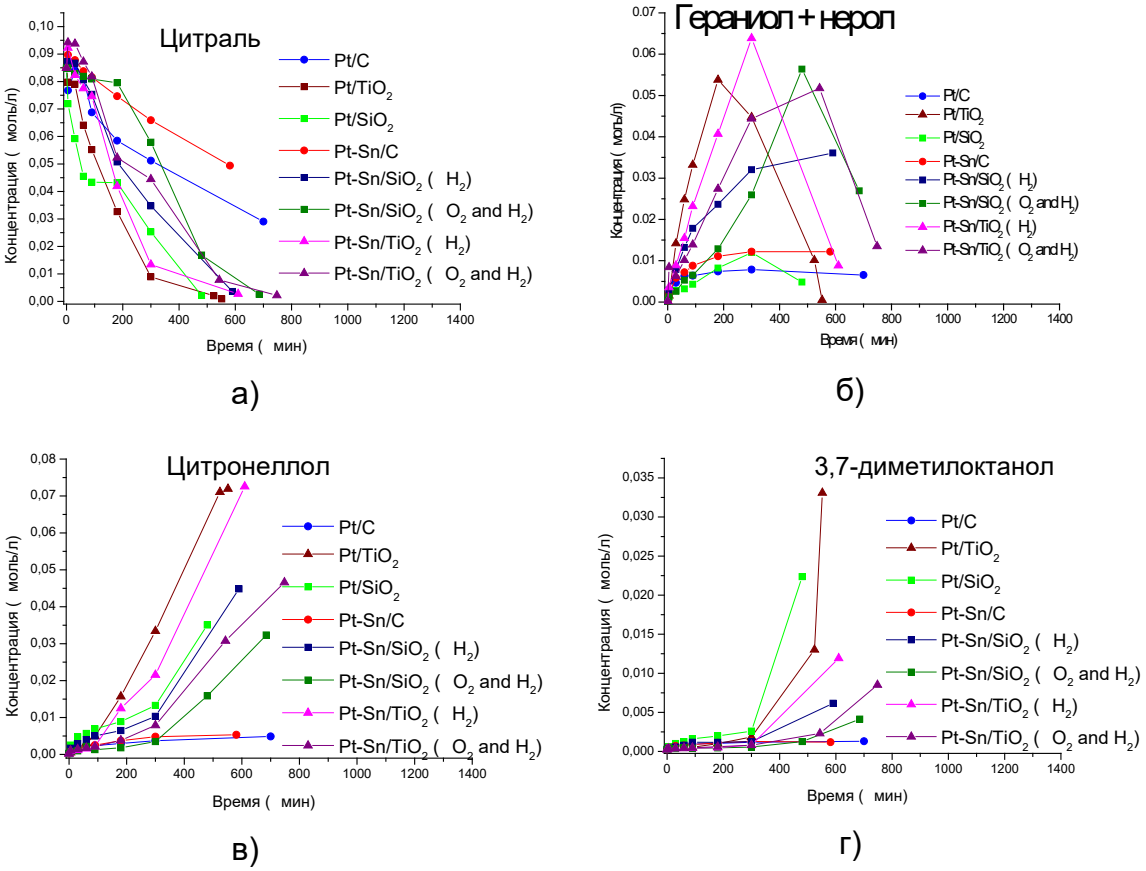


Рис. 1. Кинетические кривые: а) превращения цитраля; б) образования гераниола/нерола, в) цитронеллола; г) 3,7-диметилоктанола

Таким образом, в результате проведенных экспериментов было установлено, что катализаторы Pt/TiO_2 и $Pt\text{-}Sn/TiO_2$ (H_2) характеризуются наибольшей конверсией цитраля и селективностью по ненасыщенным спиртам. При добавлении Sn селективность по неролу и гераниолу увеличивается, однако общая каталитическая активность снижается, по-видимому, из-за снижения количества доступных центров Pt в связи с декорированием оловом.

Список литературы

[1] Vilella I.M., Borbath I., Margitfalvi J.L., Lazar K., de Miguel S.R., Scelza O.A. $PtSn/SiO_2$ catalysts prepared by controlled surface reactions for citral hydrogenation in liquid phase // Applied Catalysis A: General. – 2007. – Vol. 326, – P. 37-47.

[2] Protasova L.N., Rebrov E.V., Skelton H.E., Wheatley A.E.H., Schoutena J.C. A kinetic study of the liquid-phase hydrogenation of citral on Au/TiO_2 and $Pt–Sn/TiO_2$ thin films in capillary microreactors // Applied Catalysis A: General. – 2011. – Vol. 399, – P. 12-21.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0035).

СД-50

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОТЕРМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ГИДРОГЕНОЛИЗА ПРОПАНА

Зажигалов С.В.[1,2], **Сибаа М.**[2], **Елышев А.В.**[2], **Загоруйко А.Н.**[1,2]

[1]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2]*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия*
zazhigal@catalysis.ru

По экспертным оценкам объем добычи газового конденсата в России будет расти, однако по мере освоения запасов придется осваивать все более труднодоступные месторождения, где капитальные вложения и транспортные расходы на доставку газового конденсата к месту переработки могут превысить уровень окупаемости добытого сырья. Решением этой проблемы может стать конверсия газовой фракции газового конденсата в метан и последующая закачка его в трубопровод вместе с добытым природным газом. Реализовать такой вариант переработки можно с помощью каталитического процесса гидрогенолиза, в ходе которого длинные цепочки углеводородов конвертируются в короткие. Учитывая, что пропан является одним из основных компонентов газоконденсата, в данном исследовании на основе лабораторных экспериментов была построена кинетическая модель гидрогенолиза пропана на никелевом стекловолокнистом катализаторе (СВК). Лабораторные эксперименты с различным составом смеси в диапазоне температур 150-400 °C показали, что в выходной смеси содержание этана незначительно, поэтому химически процесс может быть описан одной реакцией:

$$C_3H_8+2H_2=>3CH_4,$$

скорость которой предполагалась подчиняющейся следующему уравнению:

$$W = \frac{k_1^0 \exp\left(-E_1/RT\right) \cdot C_{C3H8} \cdot C_{H2}^a}{1 + k_2^0 \exp\left(-E_2/RT\right) \cdot C_{H2}}.$$

Данная модель с подобранными кинетическими параметрами стала основой для построения двумерной математической модели [1] в адиабатическом промышленном реакторе. Модель учитывала массо-, теплоперенос, химическую реакцию и изменение поля скоростей. Свободное пространство в реакторе чередовалось с продольными слоями СВК в двух различных конструкциях – классической с одним проходом в реакторе и второй, содержащей в себе две внутренние стальные стенки в виде концентрических окружностей в сечении,

образующие 3 прохода от периферии к центру. За счет высокой теплопроводности стенок тепло, выделяемое в ходе реакции, распространяется на соседние проходы и оказывает влияние на протекание реакции.

Показано (Рис. 1), что конструкция реактора с тремя каналами обеспечивает на 10-12 % более высокую конверсию пропана и на 15-20 К более высокую температуру. Полная конверсия в трехходовом реакторе достигается при ~300 °C, тогда как в одноходовом реакторе она вообще не наблюдается даже при 400 °C.

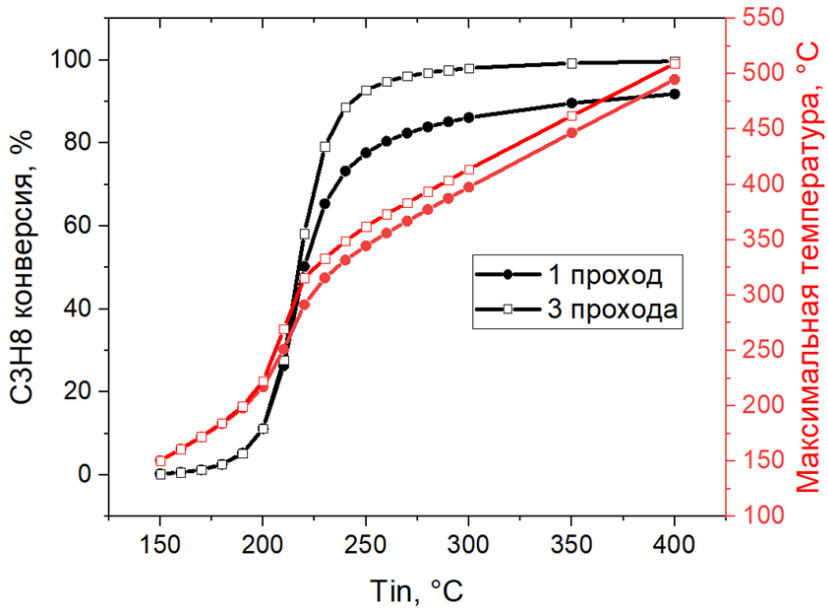


Рис. 1. Зависимость конверсии пропана и максимальной температуры от температуры подаваемой смеси для реакторов с 1 и 3 проходами

Также проведено 1D моделирование реверс-процесса гидрогенолиза пропана, в ходе которого было показано, что возможна реализация длительных циклов при сохранении высокой (97-100 %) средней конверсии пропана.

Список литературы

[1] Zazhigalov S., Sebaa M., Sozonov M., Elyshev A., Zagoruiko A. Mathematical Modeling of Autothermal Light Paraffins Hydrogenolysis Processes. Energy. 2025. V.319. 134996:1-11. https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.134996.

Благодарность

Данная работа проводилась при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственных заданий для Тюменского государственного (FEWZ-2024-0015) и для Института катализа им. Борескова (проект FWUR-2024-0037).

СД-51

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ РЕАКТОРА С ЦЕНТРОБЕЖНО-ПУЛЬСАЦИОННЫМИ МЕШАЛКАМИ

Сидоров Н.Э., Абиев Р.Ш.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия
Nikita.E.Sidorov@gmail.com

Энергоэффективные процессы перемешивания широко востребованы во многих отраслях промышленности. Эффективное перемешивание способствует интенсификации процессов массопереноса, теплообмена, в том числе при проведении химических реакций. Наиболее распространенным конструктивным решением для ввода механической энергии в реактор являются вращающиеся перемешивающие устройства. Отдельная группа методов и устройств – пульсационные мешалки. В данной работе исследовано комбинированное устройство, при вращении которого в жидкости генерируются крупномасштабные пульсации – центробежно-пульсационная мешалка, обладающая периодической формой по азимутальному углу [1].

Конструкция перемешивающего устройства оказывает непосредственное влияние на формирование поля скоростей и характеристик турбулентного и конвективного переноса. При смешении взаимно растворимых жидкостей эти характеристики напрямую определяют время гомогенизации. При использовании в качестве рабочих сред гетерогенных систем (жидкость–газ, жидкость–твердое тело, жидкость–жидкость, жидкость–газ–твердое тело) данные характеристики полностью определяют не только процессы формирования межфазной поверхности (получение эмульсий, суспензий, дисперсий и т.д.), но и скорости процессов тепло- и массообмена.

В работе рассматриваются результаты численного моделирования различных модификаций центробежно-пульсационных мешалок, в полотне которых выполнены отверстия диаметром 10 мм или 20 мм с различным количеством и взаимным расположением. Базовый вариант центробежно-пульсационных мешалок не имеет отверстий и представлен на рисунке 1.

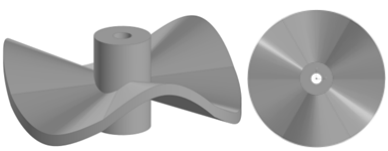


Рисунок 1. Центробежно-пульсационная мешалка

Особенностью центробежно-пульсационной мешалки является частичное преобразование вращательного движения мешалок в пульсации давления и скорости в гетерогенной среде, что обеспечивает повышение эффективности использования вводимой в аппарат энергии путем уменьшения неравномерности распределения энергии в объеме аппарата, повышение степени диспергирования капель и пузырей и качества перемешивания внутри них (особенно капель), а также повышение кинетических коэффициентов (коэффициентов тепло- и массопередачи) за счет локализованного преимущественно вблизи мешалки направленного ввода энергии и снижения осевых усилий на валу смесителя [1].

Моделирование реакторов с мешалками в турбулентном режиме требует корректного выбора математической модели, а также начальных и граничных условий. В данной работе моделирование процессов осуществлялось на базе программного продукта вычислительной гидродинамики Comsol Multiphysics 6.2, модуль mixing.

В качестве параметров, на основании которых производилось сравнение показателей качества перемешивания по плоскостям, были выбраны результирующая скорость (м/с):

$$|v| = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \quad (1)$$

где: *u, v, w* – составляющие скорости по осям x, y, z, соотвественно, м/с, и удельная скорость диссипации энергии (Вт/м^3):

$$\varepsilon_{av} = \frac{1}{V}\int_V \varepsilon(x,y,z)dV \quad (2)$$

В результате исследований выявлены оптимальные модификации центробежно-пульсационных мешалок, которые по осредненным основным параметрам в характерных плоскостях превосходят базовые.

Список литературы

[1] Абиев Р.Ш. Пульсационно-центробежный смеситель. Патент на изобретение RU 2379098 C1, 20.01.2010. Заявка № 2008142995/15 от 29.10.2008.

СД-52

СИСТЕМЫ БИОУГОЛЬ – ДИОКСИД КРЕМНИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НОСИТЕЛИ КАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ

Степачёва А.А., **Маркова М.Е.**, **Акинчиц М.В.**, **Шашуев А.А.**, **Сульман М.Г.**

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
a.a.stepacheva@mail.ru

Углеродные материалы широко используются в качестве носителей для катализаторов. Последнее время большое внимание в катализе уделяется углеродным материалам, полученным из биомассы. Они используются в качестве самостоятельных катализаторов, например: в кислотно-основном катализе после функционализации поверхности кислотными группами [1], после модификации оксидами щелочных или щелочноземельных металлов [2]; в фото- и электрокатализе при внедрении гетероатомов (N, P и т.д.) в структуру кристаллической решетки [3, 4]. Кроме того, углеродные материалы используют в металлокатализе в качестве носителей и стабилизаторов металлических частиц [5, 6].

Получение биоуглеродных материалов основывается на термической карбонизации биомассы. При этом используются методы пиролиза, сухой или влажной карбонизации, плазменного или микроволнового пиролиза [7-9].

Формирование активной фазы в углеродным материалах может осуществляться либо непосредственно при карбонизации биомассы, либо при последующей модификации/нанесении. На сегодняшний день существует большое число исследований по формированию углеродных носителей из биомассы, при этом большое внимание уделяется структурам, содержащим помимо углерода другие структуры.

В данной работе проведено исследование систем биоуглерод – диоксид кремния в зависимости от методов их формирования. В работе изучены два метода получения композитов: пиролиз и гидротермальная карбонизация. Исследовано влияние типа биомассы, прекурсора кремнийсодержащей фазы и этапа его использования на состав и структуру материалов, степень карбонизации биомассы. На полученные системы уголь – диоксид кремния была нанесена никельсодержащая фаза с целью тестирования в реакции гидрирования фенольных соединений. Полученные катализаторы показали

высокую активность в гидрировании гваякола с селективностью к метоксциклогексанолу в 99,9% при полной конверсии субстрата.

Список литературы

[1] Wong W.-Y., et al. // Int. J. Energy Res. 2020. V. 46. P. 147.
[2] Balajii M., Niju S. // Energy Convers. Manag. 2019. V. 189. P. 118.
[3] Zhang J.J., et al. // ChemistrySelect 2021. V. 6. P. 6019.
[4] Song T., Yang Y. // Chem. Rec. 2018. V. 19. P. 1283.
[5] Varila T., et al. // Catal. Today 2021. V. 367. P. 16.
[6] Gronnow M.J., et al. // Green Chem. 2005. V. 7. P. 552.
[7] Yaashikaa P.R., et al. // Biotechnol. Rep., 2020. V. 28. P. 00570.
[8] Funke A., Ziegler F. // Biofuels Bioprod. Biorefin. 2010. V. 4. P. 160.
[9] De S., et al. // ChemCatChem, 2015. V. 7. P. 1608.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-79-10096).

СД-53

СТРУКТУРИРОВАННЫЕ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО СИНТЕЗА ОЛЕФИНОВ В РЕАКЦИИ ФИШЕРА-ТРОПША

Султанов Б.Ф.[1], **Андреев О.В.**[1], **Загоруйко А.Н.**[1,2], **Елышев А.В.**[1]

[1]Тюменский государственный университет,
ул. Перекопская, 15А, 625003, Россия, Тюмень
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
пр. Академика Лаврентьева, 5630090, Россия, Новосибирск
E-mail: b.f.sultanov@utmn.ru

Процесс Фишера-Тропша (ФТ) является ключевым методом преобразования синтез-газа (H_2/CO) в ценные углеводороды, включая жидкое топливо и химические продукты. Однако одним из основных вызовов остается разработка катализаторов с высокой активностью и селективностью в отношении целевых продуктов, таких как олефины или длинноцепочечные парафины [1]. Использование структурированных носителей (например, стеклоткани с кремнезолем) позволяет улучшить массоперенос и термостабильность катализаторов, что особенно важно для промышленного применения [2]. В данной работе исследуются Fe- и Co-содержащие катализаторы, нанесенные на стекловолокнистый носитель (КТ-11-ТО): $Fe_{10\%}Zn_{2\%}$/КТ-11-ТО и $Co_{10\%}Mn_{5\%}$/КТ-11-ТО.

Каталитические свойства оценивались на проточно-циркуляционной установке, которая предназначена для определения качественного и количественного состава продуктов каталитической реакции с применением газовой хроматографии. Образец катализатора помещается в реактор, который представляет из себя стальную (марка стали 12Х18Н10Т) трубу с внутренним диаметром 16 мм. Катализатор загружают в реактор, предварительно в нижнюю часть реактора вносится измельчённый кварц фракцией 10-15 мм. Далее помещается картридж, объём катализатора в котором не должен превышать 30 $см^3$. Сверху картриджа также засыпается измельчённый кварц той же фракции. Жидкие продукты, собранные из холодной ловушки, анализировались в автономном режиме на ГХ/МСД Agilent 5977B на капиллярной колонке Ultra ALLOY+-5 и с использованием гелия в качестве газа-носителя.

В ходе эксперимента температура в реакторе повышалась со скоростью 2 °C/мин. Для оценки каталитических свойств катализатора $Co_{10\%}Mn_{5\%}$/КТ-11-ТО

выбраны следующие условия: температура 250 °C, давление 20 бар. Катализатор $Fe_{10\%}Zn_{2\%}$/КТ-11-ТО(2%K-1%Cu) тестировались в следующих условиях: температура 270 °C, давление 7 бар.

В таблице 1 представлены адсорбционные характеристики синтезированных катализаторов.

Таблица 1. Адсорбционные характеристики катализаторов

Катализатор	**$S_{уд}$, м²/г**	**$V_{пор}$, см³/г**	**$d_{пор}$, нм**
Co10%Mn5%/ КТ-11-ТО	43,8	0,042	3,05
$Fe_{10\%}Zn_{2\%}$/КТ-11-ТО	48,7	0,044	3,27

Результаты тестирования катализаторов представлены в таблице 2.

Таблица 2. Результаты проведения синтеза Фишера-Тропша

Катализатор	m cat, г	T, °C	P, бар	Конверсия CO, %	Селективность по парафинам C_{5+}, %	Селективность по олефинам C_{5+}, %
$Fe_{10\%}Zn_{2\%}$/КТ-11-ТО(K2%-Cu1%)	2,54	270	7	18	28	65
$Co_{10\%}Mn_{5\%}$/КТ-11-ТО	2,57	250	20	24	49	39

На стекловолокнистом катализаторе $Co_{10\%}Mn_{5\%}$/КТ-11-ТО селективность по газообразным продуктам не превысила 1 %. На катализаторе $Fe_{10\%}Zn_{2\%}$/КТ-11-ТО(2%K-1%Cu) продуктов в газовой фазе не обнаружено.

Катализатор $Fe_{10\%}Zn_{2\%}$/КТ-11-ТО(2%K-1%Cu) показал селективность по олефинам C_{5+} на уровне 65 %, что делает его перспективным для получения ценных ненасыщенных углеводородов. В то же время $Co_{10\%}Mn_{5\%}$/КТ-11-ТО проявил более высокую конверсию CO и селективность по парафинам C_{5+} (49 %), что характерно для кобальтовых систем.

Список литературы

[1] De Jong K. P., Zečević J., Friedrich H. et al. Heterogeneously catalyzed processes in sustainable energy production // Chemical Reviews. 2015. Vol. 115. P. 6687–6718.

[2] Садиков И.В. Современные катализаторы для синтеза Фишера-Тропша: проблемы и перспективы // Катализ в промышленности. 2020. Т. 20. С. 34–45.

Благодарность

Исследование выполнено при финансовой поддержке в рамках НИР ГЗ (FEWZ-2024-0015). «Структурированные микроволокнистые катализаторы новых геометрических форм и сорбционно-каталитические процессы одностадийного производства водорода на их основе».

СД-54

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НАНОБИОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ ЦЕЛЛЮЛАЗЫ

Сульман А.М., Гребенникова О.В., Молчанов В.П., Балакшина Д.В., Матвеева В.Г.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
E-mail докладчика: alexsulman@mail.ru

Переработка целлюлозосодержащего сырья представляет собой один из наиболее сложных вызовов в биотехнологии. Наиболее эффективным решением становится использование ферментов, которые являются хорошими и экологически чистыми катализаторами [1].

Три основных фермента («ферменты целлюлозолитического комплекса»), разлагающие целлюлозу, в совокупности известны как целлюлаза (CEL). Основная функция целлюлазы включает гидролиз полимерной целлюлозы до мономера глюкозы: последовательное и синергическое действие на полимерную цепь целлюлозы, высвобождая глюкозу [2]. Однако использование любого энзима сталкивается с некоторыми трудностями, которые затрудняют процесс. К ним можно отнести возможность утечки фермента, низкий шанс повторного использования, плохие термическая стабильность и устойчивость при хранении и т.д. Чтобы преодолеть данное препятствие, необходимо создать нанобиокатализаторы для биотрансформации целлюлозосодержащих отходов. В качестве носителя для иммобилизации выгодно применять материалы с магнитными частицами, так как они обеспечивают не только лёгкую магнитную сепарацию от среды, но и возможность повторного использования.

В данном исследовании синтез магнитных носителей проводился in-situ кристаллизацией наночастиц магнетита в мезопорах первоначального материала: оксида кремния, аминофункционализированного сверхсшитого полистирола. Нанобиокатализаторы синтезированы путём иммобилизации фермента с помощью ковалентной сшивки.

Кривые намагничивания Fe_3O_4@SiO_2 показывают среднюю намагниченность насыщения ~ 3,0 эму/г. При синтезе наночастиц в порах кремния (SiO_2@Fe_3O_4) намагниченность имела более низкое значение около 2 emu/g. После каждой реакции катализатор легко отделялся от реакционной смеси с помощью неодимового магнита (что занимало 30-40 с).

Данные по адсорбции жидкого азота для магнитных наночастиц в порах кремнезема (SiO_2@Fe_3O_4) показывают, что изотермы адсорбции-десорбции представляют тип IV, обычно наблюдаемый для мезопористых материалов. Метод БЭТ (Брунауэра-Эммета-Теллера) использовался для оценки общей площади поверхности. Для SiO_2@Fe_3O_4 она составляет 304 $м^2$/г с порами в 6 нм. Сравнение пористости магнитного кремнезема с порами исходного образца кремнезема показывает, что общая площадь поверхности уменьшается после образования наночастиц магнетита. Она составляет 30 % для SiO_2@Fe_3O_4, что указывает на частичную блокировку пор.

Активность свободной и иммобилизованной целлюлазы (Fe_3O_4@SiO_2@CEL и SiO_2@Fe_3O_4@CEL) оценивали путем измерения концентрации глюкозы, образующейся при гидролизе КМЦ, используемой в качестве субстрата. Относительная активность составила 71 % и 87 % для Fe_3O_4@SiO_2@CEL и SiO_2@Fe_3O_4@CEL (рисунок 1).

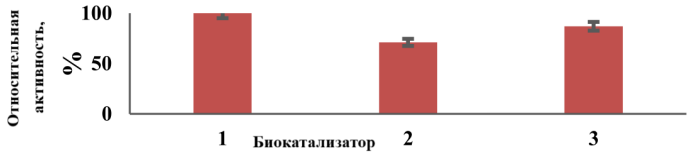


Рисунок 1. Относительная активность (%) различных биокатализаторов: (1) Свободный фермент, (2) Fe_3O_4@SiO_2@CEL, (3) SiO_2@Fe_3O_4@CEL

Список литературы

[1] Sulman A.M., Matveeva V.G., Bronstein L.M. // Nanomaterials. 2022, 12, 3796.

[2] Asmat S., Husain Q. // Mater. Sci. Eng. 2019, 99, 25-36.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 24-79-10042.

СД-55

ИССЛЕДОВАНИЕ ЦЕОЛИТНОГО КАТАЛИЗАТОРА HMOR, МОДИФИЦИРОВАННОГО ОКСИДАМИ НИКЕЛЯ, ЛАНТАНА И САМАРИЯ, В ПРОЦЕССЕ ПИРОЛИЗА ПОЛИЭТИЛЕНА

Тиссен Е.А.[1,2], **Харитонцев В.Б.**[1], **Елышев А.В.**[1], **Потемкин Д.И.**[2]

[1]Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
E-mail: e.a.tissen@utmn.ru

Пластик, при всех своих преимуществах, вызывает серьезные экологические проблемы за счёт его накопления в виде отходов [1]. Переработка пластика в ценные химические соединения методом каталитического пиролиза является актуальным решением проблемы. В отличие от термического пиролиза, каталитический процесс обеспечивает лучшую селективность и эффективность при более мягких условиях [2]. Цеолиты, благодаря своей уникальной структуре, обеспечивают стабильность и активность в каталитических процессах. В данной работе представлены результаты исследований процесса каталитического пиролиза полиэтилена высокой плотности (ПЭВП) в присутствии алюмосиликатных катализаторов, таких как цеолиты HMOR и их модификации, содержащие оксиды никеля и редкоземельных металлов.

В эксперименте использовался цеолит HMOR в аммонийной форме (Zeolyst International) с содержанием Na_2O 0,05 %. Оксид никеля на цеолит наносили с использованием 10%мас. водного раствора нитрата никеля(II). При нанесении оксида никеля совместно с оксидами редкоземельных металлов (РЗМ) использовали водные растворы с 10 % нитрата никеля и 0,01 % нитратов РЗМ (La(III), Sm(III)). Физико-химические характеристики катализаторов изучали с помощью ИК-Фурье спектроскопии, рентгеноструктурного анализа и метода физической адсорбции N_2. Эффективность полученных катализаторов исследовали с применением методов термогравиметрического анализа (ТГА) и пиролитической газовой хроматографией. В качестве источника пластика использовался обычный бытовой ПЭВП, полученный путем перекристаллизации из пластикового пакета.

Основными продуктами пиролиза полиэтилена являются олефины. Макромолекулы полимера разрываются случайным образом, что приводит к образованию более коротких цепей алкенов, алканов и диенов. Цеолит HMOR обладает одномерной системой каналов, что ограничивает доступ к кислотным

центрам фрагментам макромолекул ПЭВП. Это снижает доступность фрагментов макромолекул первичного крекинга, что, в свою очередь, влияет на более низкое содержание ароматических соединений в продуктах пиролиза. Основные процессы в модифицированных HMOR происходят на внешней поверхности частиц, поскольку частицы оксидов металлов частично осаждаются во внутреннем пространстве цеолита из-за большего объема пор, ограничивая доступ к кислотным центрам. В результате продукты пиролиза с использованием катализаторов HMOR содержат повышенное количество алкенов, по сравнению с некаталитическим пиролизом (рис. 1).

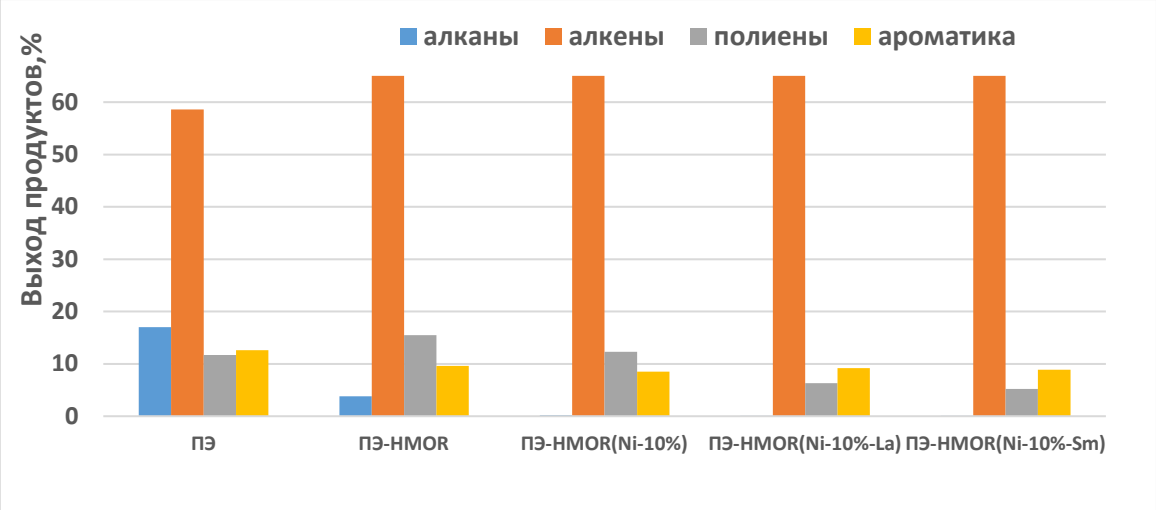


Рис. 1. Распределение продуктов пиролиза с использованием различных катализаторов

Применение катализаторов HMOR также способствовало снижению температуры разложения полиэтилена. По данным термогравиметрического анализа температура разложения ПЭВП с катализатором снизилась на 20 °C по сравнению с образцом чистого пластика. Снижение энергозатрат делает процесс пиролиза более экономически выгодным, что подтверждает эффективность данных катализаторов для пиролиза.

Список литературы

[1] Biakhmetov B., Dostiyarov A., Ok Y.S., You S. // WIREs Energy and Environment. 2023. V.12. P.1-34.

[2] Dong Z., Chen W., Xu K., Liu Y., Wu J., Zhang F. // ACS Catalysis. 2022, V. 12, P. 14882−14901.

Благодарность

Исследование выполнено при поддержке государственного задания FEWZ-2024-0015.

СД-56

КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ГОМОКОНДЕНСАЦИИ АЦЕТОНА В ИЗОФОРОН И 3,5-КСИЛЕНОЛ

Усманова А.А.[1], Коледина К.Ф.[1], Коржова Л.Ф.[2], Кирсанов В.Ю.[1], Губайдуллин И.М.[1]

[1]Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение ФГБНУ «Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук» (ИНК УФИЦ РАН)
450075, Россия, Республика Башкортостан, Уфа, пр. Октября, 141
[2]Акционерное общество «Институт Нефтехимпереработки» (АО «ИНХП»),
450065, Россия, Республика Башкортостан, Уфа, ул. Инициативная, 12
aausmanova@yandex.ru

Ранее в работе [1] рассматривалось кинетическое моделирование каталитической гомоконденсации ацетона в мезитилен с учетом влияния воды на скорости протекания реакций. Реакция, рассматриваемая в данной работе, является продолжением работы гомоконденсации ацетона с получением ключевых компонентов изофорона и 3,5-ксиленола. Химическая реакция изучалась в интервале температур 300-450 °С и массовой скорости подачи сырья в диапазоне 0,25-3 $ч^{-1}$. Химическое превращение разбито на 8 реакций, среди которых 2 обратимые (табл. 1). Гомоконденсация ацетона в изофорон (X_{10}) происходит при температурах до 350 °С. Далее, повышая температуру, происходит формирование 3,5-ксиленола (X_5), за счет усиления реакции ароматизации изофорона. Также наблюдается образованием кокса на поверхности катализатора.

Таблица 1.

Номер стадии	Стадия
1, 9	$2C_3H_6O$ (**X_1**) ↔ $C_6H_{10}O$ (**X_2**) + H_2O (**X_3**)
2, 10	C_3H_6O (**X_1**) + $C_6H_{10}O$ (**X_2**) ↔ $C_9H_{14}O$ (**X_{10}**) + H_2O (**X_3**)
3	C_3H_6O (**X_1**) + $C_6H_{10}O$ (**X_2**) → C_9H_{12} (**X_4**) + $2H_2O$ (**X_3**)
4	$C_9H_{14}O$ (**X_{10}**) + $C_6H_{10}O$ (**X_2**) → $C_{15}H_{20}$ (**X_6**) + $2H_2O$ (**X_3**)
5	$C_9H_{14}O$ (**X_{10}**) → $C_8H_{10}O$ (**X_5**) + CH_4 (**X_8**)
6	$2C_8H_{10}O$ (**X_5**) → $C_9H_{12}O$ (**X_{11}**) + C_7H_8O (**X_{12}**)
7	$C_9H_{14}O$ (**X_{10}**) + $C_6H_{10}O$ (**X_2**) → $C_{14}H_{18}O$ (**X_{13}**) + H_2O (**X_3**) + CH_4 (**X_8**)
8	$2C_6H_{10}O$ (**X_2**) → $C_{10}H_{16}$ (**X_9**) + $C_2H_4O_2$ (**X_7**)

В формуле (1) представлены кинетические уравнения скоростей химических реакций, где x_i – концентрация реагентов реакции, мол. дол, ω_i – скорость j-й стадии, $ч^{-1}$, k_i – константа скорости j-й стадии, $ч^{-1}$, N – изменение количества молей реакционной смеси, k_{11} – константа адсорбции.

$$\begin{cases} \omega_1 = \dfrac{k_1 x_1^2}{N^2(1+k_{11}x_3)} - \dfrac{k_9 x_2 x_3}{N^2}, \\ \omega_2 = \dfrac{k_1 x_1 x_2}{N^2(1+k_{11}x_3)} - \dfrac{k_{10} x_{10} x_3}{N^2}, \\ \omega_3 = \dfrac{k_3 x_1 x_2}{N^2(1+k_{11}x_3)}, \\ \omega_4 = \dfrac{k_4 x_{10} x_2}{N^2(1+k_{11}x_3)}, \\ \omega_5 = \dfrac{k_5 x_{10}}{N(1+k_{11}x_3)}, \\ \omega_6 = \dfrac{k_6 x_5^2}{N^2(1+k_{11}x_3)}, \\ \omega_7 = \dfrac{k_7 x_{10} x_2}{N^2(1+k_{11}x_3)}, \\ \omega_8 = \dfrac{k_8 x_2^2}{N^2(1+k_{11}x_3)}, \end{cases} \quad (1)$$

Выявлено, что значение константы адсорбции практически не зависит от температуры. Поэтому моделирование процесса при высоких температурах возможно с найденной константой адсорбции при низкой температуре. Это дает возможность отдельно исследовать взаимосвязь коксообразования на поверхности катализаторе с выходом целевых продуктов.

Список литературы

[1] V.Yu. Kirsanov, N.G. Grigor'eva, B.I. Kutepov, L.F. Korzhova, S.G. Karchevskii, A.A. Usmanova, K.F. Koledina, I.M. Gubaidullin. A Kinetic Model of Catalytic Homocondensation of Acetone into // Pet. Chem. – 2023. – V. 63. – P. 1311–1321.

Благодарность

Работа выполнена в рамках темы государственного задания ИНК УФИЦ РАН «Компьютерное моделирование химических и химико-технологических процессов: разработка и тестирование новых алгоритмов и программ» (FMRS-2025-0031).

СД-57

ТРАНСФОРМАЦИЯ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА В ФОРМАЛЬДЕГИД И ЕГО ПРОИЗВОДНЫЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Цветков Д.Ю., Курагин А.А., Маркова М.Е., Бахвалова Е.С., Сидоров А.И., Лакина Н.В., Сульман М.Г., Долуда В.Ю.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия,
doludav@yandex.ru

Увеличение концентрации углекислого газа в атмосфере [1] декларирует необходимость разработки новых технологий его использования для устойчивого развития современной промышленности и общества [2]. Возможные пути утилизации углекислого газа включают производство топлива и ценных химикатов. Формальдегид является одним из наиболее востребованных видов сырья для промышленной химии и производства полимеров. Обычно формальдегид получают с помощью каталитического окисления метанола над серебряными или смешанными катализаторами. Прямое образование формальдегида из углерода можно рассматривать как один из возможных путей утилизации углекислого газа. Обычно в ходе реакции в реакционных средах может протекать несколько реакций. Первым шагом последовательных реакций может быть превращение углекислого газа в оксид углерода и воду. Поэтому уменьшение содержания воды в реакционной среде может играть положительную роль в скорости образования оксида углерода. Вторым шагом этого пути реакции является образование формальдегида путем гидрирования оксида углерода. Однако формальдегид мгновенно превращается в метанол. Поэтому для достижения высокого выхода формальдегида необходимо подавить образование метанола в реакционной среде. В ходе выполнения исследований были изучены вопросы образования формальдегида на биметаллических катализаторах, содержащих Cu, Ni, Pt. Для синтеза катализатора образец оксида кремния суспендировали в воде. К суспензии добавляли раствор реагента, затем суспензию переносили в испарительную чашку, где испаряли воду. Затем образец восстанавливали в трубчатой печи в атмосфере водорода при 500 °C в течение трех часов. В случае введения второго металла в образец процедуру повторяли дважды с разными металлами. Результаты испытаний разработанных катализаторов показывают (Таблица 1),

что чистый оксид кремния практически неактивен в процессе превращения диоксида углерода в формальдегид.

Таблица 1. Результаты тестирования синтезированных образцов катализаторов

Образец	Количество образовавшегося формальдегида mmol/g (Cat)	Конверсия CO_2, %
SiO_2	-	-
Cu-SiO_2	0.002	0.004
Ni-SiO_2	0.01	0.01
Pt-SiO_2	0.2	0.7
Ni-Cu-SiO_2	1.4	5.3
Cu-Ni-SiO_2	1.6	6.4
Pt-Cu-SiO_2	7.4	24.2

Образец, содержащий медь, показывает выход всего 0,002 ммоль(HCOH)/г(кат), образец, содержащий никель, показывает выход 0,01 ммоль(HCOH)/г(кат), а результат образца платины показывает немного более высокий выход фармальдегида в 0,2 ммоль(HCOH)/г(кат). Это позволяет сделать вывод, что монометаллические образцы неактивны в превращении диоксида углерода в формальдегид. Активность образцов биметаллических катализаторов значительно выше по сравнению с монометаллическими образцами. Образцы, содержащие никель и медь, показали выход 1,4-1,6 ммоль(HCOH)/г(кат), в то время как образец платины и меди показал 2,4 ммоль(HCOH)/г(кат).

Список литературы

[1] Hepburn C. et al. The technological and economic prospects for CO2 utilization and removal // Nature 2019 575:7781. Nature Publishing Group, 2019. Vol. 575, № 7781. P. 87–97.

[2] Rauch M., Strater Z., Parkin G. Selective Conversion of Carbon Dioxide to Formaldehyde via a Bis(silyl)acetal: Incorporation of Isotopically Labeled C1 Moieties Derived from Carbon Dioxide into Organic Molecules // J Am Chem Soc. American Chemical Society, 2019. Vol. 141, № 44. P. 17754–17762.

Благодарность

Исследования выполнены в рамках проекта РНФ 25-23-00333.

СД-58

ДИЗАЙН БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ Ag-Ir/CeO_2-Fe_2O_3 СИСТЕМ ДЛЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО КАТАЛИЗА

Черных М.В., Грабченко М.В., Мамонтов Г.В.

Томский государственный университет, Томск, Россия
msadlivskaya@mail.ru

В последнее время во всем мире проблемам защиты окружающей среды уделяется все большее внимание. Загрязнение воды и воздуха является одной из острых экологических проблем современности. Среди подходов, позволяющих снизить уровень загрязнений, наиболее эффективным является каталитический, поскольку способствует полной деструкции загрязнителей до безопасных CO_2 и H_2O, либо позволяет преобразовывать загрязнители в продукты, пригодные для дальнейшего использования, например, в производстве красителей, удобрений и др. В связи с чем разработка подходов получения эффективных катализаторов для очистки окружающей среды является актуальной.

Целью настоящей работы было исследовать влияние способа введения и соотношения активных компонентов в биметаллических Ag-Ir катализаторах, нанесенных на CeO_2, Fe_2O_3 и CeO_2-Fe_2O_3, на их физико-химические характеристики и каталитическую активность в процессах очистки окружающей среды (глубокого окисления летучих органических соединений и восстановления нитроароматических соединений в водных растворах до соответствующих аминов).

Были синтезированы несколько серий катализаторов при варьировании соотношений Ag-Ir, CeO_2-Fe_2O_3 и способа введения компонентов (пропитка по влагоемкости, соосаждение). Также были исследованы особенности стабилизации активных компонентов на поверхности блочного кордиеритового носителя. Полученные системы были исследованы комплексом физико-химических методов: низкотемпературная адсорбция-десорбция N_2, рентгенофазовый анализ, температурно-программируемое восстановление H_2, просвечивающая электронная микроскопия и др.

Показано, что активность катализаторов, полученных последовательной пропиткой предшественниками Ir и Ag носителя CeO_2-Fe_2O_3, в процессе восстановления 4-нитрофенола в 4-аминофенол $NaBH_4$ в мягких условиях

(водный раствор, комнатная температура, атмосферное давление) проходит через максимум при массовом соотношении Ir : Ag = 1 : 1 (рис. 1а). Несмотря на низкое содержание благородных металлов в составе (до 2 масс. %) данные катализаторы обладают более высокой активностью по сравнению с аналогичными монометаллическими катализаторами за счет синергетического эффекта между высокодисперсными наночастицами Ag и одноатомными и кластерными структурами иридия (рис. 1б). В то же время было обнаружено, что при совместном осаждении Ag, CeO_2, Fe_2O_3 с получением монометаллических Ag-$Ce_nFe_{1-n}O_x$ (5 масс. % Ag) катализаторов при мольном соотношении Ce : Fe = 0,75 : 0,25 наблюдается значительное увеличение скорости восстановления 4-нитрофенола.

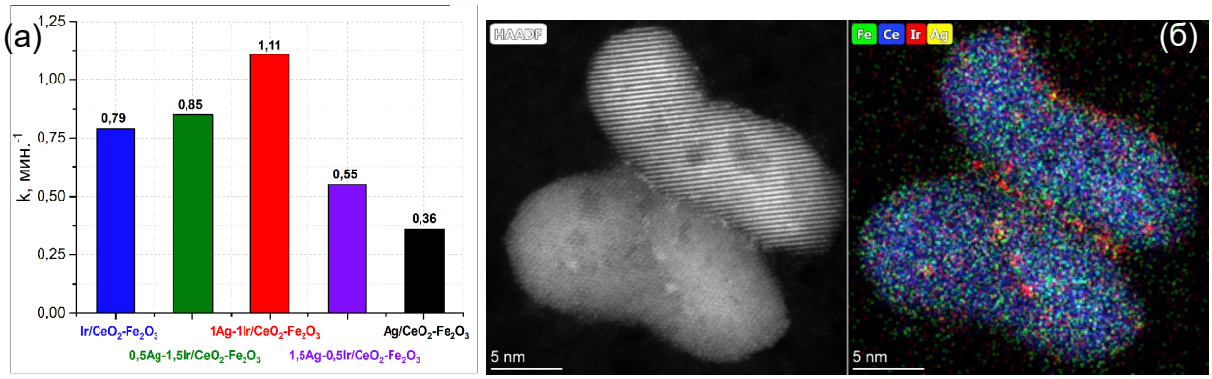


Рисунок 1. Зависимость констант скоростей восстановления 4-нитрофенола в 4-аминофенол от соотношения компонентов в Ir-Ag/CeO_2-Fe_2O_3 (а), СПЭМ изображения и карта распределения элементов катализатора 1Ir-1Ag/CeO_2-Fe_2O_3 (б)

В докладе будут представлены результаты исследования влияния физико-химических характеристик Ag-Ir/CeO_2-Fe_2O_3 катализаторов, полученных при варьировании состава и способа введения компонентов, на их каталитическую активность в глубоком окислении летучих органических соединений (толуола) и восстановлении нитросоединений в соответствующие амины, а также рассмотрены особенности стабилизации активных компонентов на поверхности блоков кордиеритовой керамики.

Список литературы

[1] *ACS Applied Nano Materials* **2025** *8* (12), 6255-6265.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-73-10152.

СД-59

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОИНТЕГРИРОВАННЫХ ПРОЦЕССОВ РИФОРМИНГА И ПОЛНОГО ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНОЛА В МИКРОСТРУКТУРИРОВАННОМ РЕАКТОРЕ

Шеболтасов А.Г.[1,2], Верниковская Н.В.[1,2], Андреев Д.В.[1], Грибовский А.Г.[1], Чумаченко В.А.[1]

[1]Институт катализа им Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
asheb@catalysis.ru

Современные тенденции в химической технологии демонстрируют интерес к структурированным микрореакторным системам, особенно в контексте создания распределённых и малотоннажных производств, в том числе энергоэффективных автономных установок для химического синтеза.

В данной работе представлены результаты комплексного исследования совмещённых по теплу экзо- и эндотермических процессов в микроструктурированном каталитическом реакторе.

В качестве модельных процессов были выбраны экзотермический процесс полного окисления метанола на Pt/Al_2O_3 катализаторе (ПОМ) и эндотермический процесс парового риформинга (конверсии) метанола на Zn/TiO_2 катализаторе (ПКМ). Термическое интегрирование этих процессов позволяет повысить эффективность получения водорода по реакции ПКМ.

Микрореакторная система состояла из двух каталитических секций, разделенных между собой теплопередающей перегородкой из нержавеющей стали. Секции представляли собой пакеты прессованных пенометаллических пластин из меди и никеля с нанесёнными катализаторами для ПКМ и ПОМ, соответственно. Общая схема и габариты микрореакторной системы показаны на рис. 1. Тепловой баланс системы регулировался за счёт изменения потоков реагентов, что позволило минимизировать необходимость внешнего подвода тепла [1].

В ходе проведения экспериментов исследовано влияние расхода смеси $CH_3OH + O_2$ в секции ПОМ на разогрев реактора при отсутствии реакции паровой конверсии метанола в секции ПКМ; влияние расхода водно-метанольной смеси на конверсию CH_3OH, выход H_2 и температуру микрореакторных пластин в секции ПКМ при фиксированном расходе смеси $CH_3OH + O_2$ в секции ПОМ.

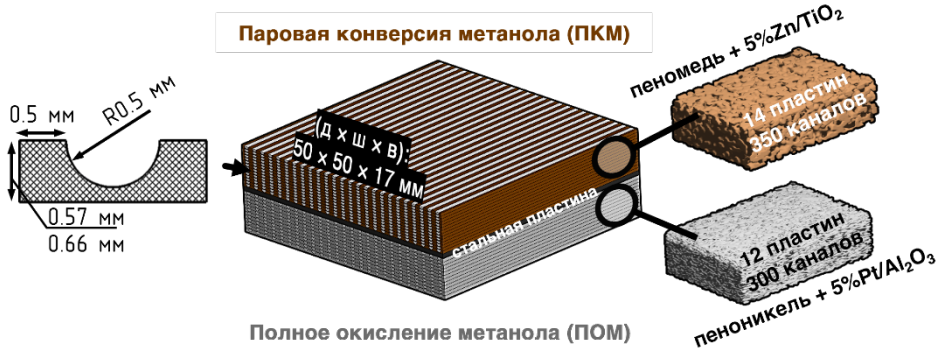


Рис. 1. Общая схема микрореакторной системы

Математическое моделирование системы было выполнено с использованием пакета COMSOL Multiphysics 5.4 на основе трехмерной математической модели микроструктурированного реактора, описывающей химические превращения и процессы тепло- и массопереноса в двух сопряженных пространственных областях: в каналах и в газопроницаемых каталитических пластинах; при этом учитывались тепло- и массообмен между областями и теплоперенос в межсекционной перегородке. В секции ПКМ, наряду с реакцией паровой конверсии метанола, учитывались также реакции сдвига водяного газа и разложения метанола до H_2 и CO.

Верификация полученных численных результатов путем сравнения с экспериментальными зависимостями подтвердила адекватность используемой математической модели.

Установлено, что повышение расхода воздушно-метанольной смеси в секции ПОМ, приводящее к росту тепловой мощности, обеспечивает полную конверсию метанола при больших расходах в секции ПКМ и, как следствие, высокий выход водорода.

Совместная реализация процессов ПКМ и ПОМ в микроканальном реакторе отличается высокой эффективностью теплообмена, сниженной тепловой инерцией и возможностью точно контролировать температуру, что позволяет достичь оптимального баланса между экзо- и эндотермическими реакциями, тем самым повышая управляемость системы. Кроме того, такая микрореакторная система отличается компактностью и простотой масштабирования.

Список литературы

[1] Д. В. Андреев, Ползуновский вестник, 4 (2021) 123−128.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0037).

СД-60

РЕЦИКЛИНГ ПОЛИЭФИРНЫХ СТЕКЛОКОМПОЗИТОВ: НОВЫЕ ПОДХОДЫ

Ширялин И.М.[1,2], Бондарь А.А.[2], Лагусева Е.И.[1]

[1]Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
[2]ООО «Ключевые системы и компоненты», Тверь, Россия
shiryalini@mail.ru

Интенсификация технологического прогресса и устойчивое возрастание спроса на продукцию машиностроительного, строительного, электротехнического секторов обусловили расширение применения полиэфирных стеклокомпозитов в промышленности. Несмотря на активное использование полиэфирных стеклокомпозитов в промышленности, переработка отходов данных материалов сохраняет статус нерешенной технологической проблемы.

В условиях формирования экономики замкнутого цикла и активного внедрения инновационных технологических решений актуализируется потребность в разработке эффективных технологий рециклинг полиэфирных стеклопластиков, соответствующим основополагающим экологическим принципам. К числу перспективных технологий рециклинга относится пиролиз, обеспечивающий генерацию комплекса продуктов вторичной переработки

На территории «Промтехнопарка» ГК КСК разрабатывается и реализуется программа экологического проекта рециклинг отходов [1]. В рамках реализации проекта при научно-техническом сотрудничестве с Тверским государственным техническим университетом разработано инновационное оборудование для вторичной переработки полиэфирных стеклопластиков. Исследования, проведенные в рамках данной работы, продемонстрировали способность системы к организации безотходного производственного цикла.

Список литературы

[1] Ширялин, И.М. Выявление оптимальных параметров проведения процесса пиролиза полиэфирных стеклопластиков / И.М. Ширялин, А.А. Бондарь, И.П. Туляев, Е.И. Лагусева // XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии: Сборник тезисов докладов в 7 томах. Том 6. (Федеральная территория «Сириус» 7-12 октября 2024). – Москва: ООО «Адмирал Принт», 2024. С. 345.

СД-61

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПАЛЛАДИЙ-ВИСМУТОВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Щербакова-Санду М.П.[1], **Гулевич С.А.**[1], **Сараев А.А.**[2]

[1]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия*
[2]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
mpsandu94@gmail.com

Палладий-висмутовые наноматериалы используются в различных сферах химической промышленности в качестве детекторов, электродов и катализаторов [1-3]. Эффективность систем на основе наноматериалов в значительной степени зависит от размера, состава, формы и локального окружения используемых наночастиц [4].

Pd-Bi катализаторы с различным атомным соотношением (Bi:Pd = 0.35, 0.4, 0.5, 1.0, 2.0) были получены путем совместной пропитки носителя (γ-Al_2O_3) предшественниками $Pd(acac)_2$ и $Bi(ac)_3$, растворенными в уксусной кислоте. Поверхность полученных образцов была охарактеризована методами просвечивающей электронной микроскопии, сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, EXAFS и XANES.

Согласно данным ПЭМ, средний и медианный размеры частиц увеличиваются по мере уменьшения содержания палладия в образцах. Для катализатора состава 0.35Bi:Pd/Al_2O_3 медианный размер частиц составил 4 нм, а для 2Bi:Pd/Al_2O_3 – 11 нм. Соотношение между Pd и Bi, определенное методом РФЭС выше, чем теоретически заложенное и определенное с помощью РФлА (таблица 1). Данная закономерность позволяет сделать заключение о том, что висмут имеет тенденцию к поверхностной концентрации.

Таблица 1. Соотношение Bi:Pd, определенное с помощью РФЭС и ПЭМ-ЭДС

Образец/Al_2O_3	Pd, ат.%	Bi, ат. %	Bi/Pd	Bi/Pd
РФЭС				РФлА
Pd	0,27	-	-	-
Bi	-	0,28	-	-
0.35Bi:Pd	1,23	0,58	0,47	0,35
0.4Bi:Pd	0,48	0,30	0,62	0,42
0.5Bi:Pd	0,32	0,34	1,06	0,47
1Bi:Pd	0,29	0,56	1,93	0,95
2Bi:Pd	0,25	1,01	4,04	1,81

На основании XANES и EXAFS методов подтверждено, что увеличение доли висмута приводит к обогащению поверхности биметаллических частиц висмутом, находящимся в окисленном состоянии.

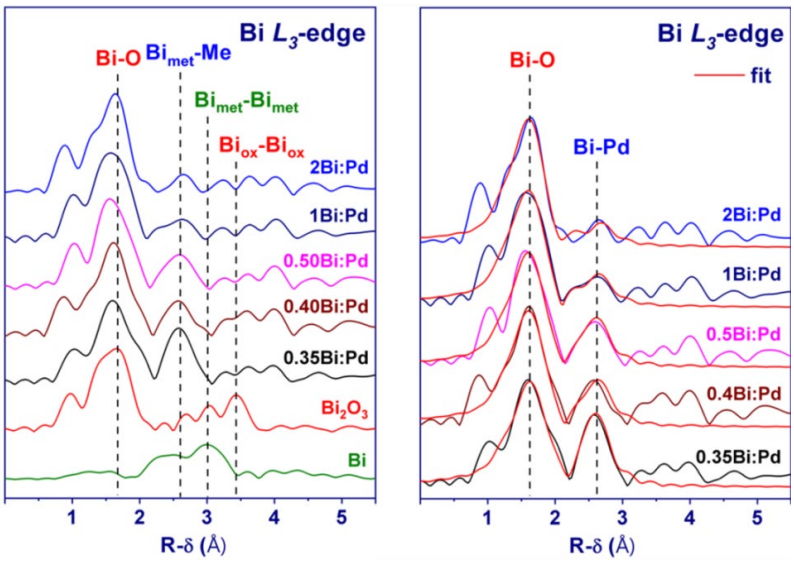


Рис. 1. EXAFS-спектры образцов катализаторов Bi:Pd/Al_2O_3

Катализаторы были протестированы в модельной реакции окисления глюкозы в глюконовую кислоту. Конверсия глюкозы в присутствии образца 0.35Bi:Pd/Al_2O_3 составила 57 % в том время, как для катализатора с наибольшим содержанием висмута степень превращения глюкозы не превышала 28 % и была близка к конверсии, полученной в присутствии монометаллического образца Pd/Al_2O_3 (X = 29 %). Селективность во всех случаях была выше 90 %. Определено, что увеличение концентрации висмута приводит к снижению выхода глюконовой кислоты вследствие формирования малоэффективной конфигурации активного компонента (биметаллических частиц), поскольку наиболее активные центры палладия недоступны для адсорбции реагентов. Следовательно, увеличение доли висмута приводит к снижению каталитической активности полученных образцов катализаторов.

Список литературы

[1] Du L.., Zheng L.., Wei H., Zheng S., Zhu Z., Chen J., Yang D. // Appl. Nano Mater. 2019. V. 2. P.1178-1184.

[2] Chu M., Huang J., Gong J., Qu Y., Chen G., Yang H., Wang X., Zhong Q., Deng C., Cao M. et al. // Nano Res. 2022. V. 15, P. 3920-3926.

[3] Wito´nska I.A., Walock M.J., Dziugan P., Karski S., Stanishevsky A.V. // Appl. Surf. Sci. 2013. V. 273. P. 330–342.

[4] Singh S.B.; Tandon, P.K. // J. Energy Chem. Eng. 2014. V. 2. P. 106–115.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2023-468).

СД-62

ФИЗИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ОПТИЧЕСКОГО ПРОБОЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ $ZnGeP_2$ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ С ДЛИНОЙ ВОЛНЫ ~ 2,1 мкм

Юдин Н.Н.[1], Подзывалов С.Н.[1], Зиновьев М.М.[1], Кузнецов В.С.[1], Слюнько Е.С.[1], Лысенко А.Б.[1], Кальсин А.Ю.[1], Власов Д.В.[1], Худолей А.Л.[2]

[1]Томский государственный университет, Томск, rach3@yandex.ru
[2]Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь, rach3@yandex.ru

В докладе представлены актуальные сведения посвященные физическим причинам инициализации оптического пробоя в монокристаллах ZnGeP2(ZGP) при воздействии наносекундного излучения Ho:YAG лазера на длине волны 2,1 мкм и технологическим операциям, позволяющим повысить LIDT ZGP. В качестве основных итогов можно отметить следующее:

1) Показано, что уменьшение количества объемных дефектов и концентрации дислокаций внутри кристалла ZGP на порядок приводит к увеличению LIDT более чем в три раза.

2) Показано, что диффузионное легирование монокристалла ZGP Mg и Se приводит к увеличению LIDT. При отжиге при температуре 750°C порог разрушения образцов, легированных Mg и Se, увеличивается на 31 % и 21 % с 2,2±0,1 Дж/см2 до 2,9±0,1 и 2,7±0,1 Дж/см2 соответственно. Снижение проводимости наблюдается при легировании образцов ZGP Mg и Se по сравнению с нелегированным отожженным образцом. Проведенные исследования показали, что имеется технологическая возможность повышения LIDT кристаллов ZGP за счет снижения проводимости образцов путем контролируемого легирования.

3) Обнаружено увеличение порога оптического пробоя после нанесения просветляющего покрытия в случае нанесения покрытия на основе материалов ZnS и Al2O3 увеличение LIDT составило 55 % по сравнению с непросветленным образцом.

4) Обнаружена сильная зависимость LIDT на длине волны 2,1 мкм от температуры кристалла. Наблюдаемое резкое увеличение пороговой плотности энергии (в 1,5-3 раза) при уменьшении температуры ZGP от 00 °C до -600 °C можно объяснять температурной зависимостью чисел заполнения фононов,

принимающих совместно с оптическими квантами участие в непрямых переходах валентная зона – примесный уровень, обусловленный наличием в кристалле краевых дислокаций. Рост числа заполнения фононов при понижении температуры кристалла приводит к уменьшению вероятности их участия в непрямых переходах электронов из валентной зоны на примесные уровни и, соответственно, к уменьшению нелинейного поглощения кристалла в предпробойной области параметров.

5) Результаты визуализации процесса оптического пробоя при помощи метода цифровой голографии показали, что оптический пробой монокристалла ZGP инициализируется за счет термических эффектов. Локальное плавление за счет резкого повышения температуры приводит к формированию вдоль лазерного луча трека оптического пробоя. Процесс закалки, образовавшегося расплава, приводит к диффузии свободных носителей заряда от разогретой области кристалла в перпендикулярном к лазерному лучу направлению и сопровождается появлением светящейся области у выходной оптической поверхности в объеме кристалла за счет рекомбинации, образовавшихся неравновесных носителей заряда, и последующим движением данной светящейся области в сторону входной оптической поверхности, т.е. в направлении противоположном распространению излучения лазера.

6) Установлен факт обратимого «фотопотемнения» канала распространения мощного лазерного излучения на длине волны 2,1 мкм в ZGP в предпробойной области параметров. Такое обратимое фотопотемнение канала распространения лазерного изучения можно объяснить локальным уменьшением ширины запрещённой зоны ZGP при нагреве.

Благодарность

Исследование выполнено при поддержке РНФ (грант № 23-79-10193, https://rscf.ru/project/23-79-10193.%22).

СД-63

ГИПЕРБОЛИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕСТАЦИОНАРНОГО ПРОЦЕССА В СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА

Янгляев И.Р.[1], Язовцева О.С.[2], Губайдуллин И.М.[3]

[1]Национальный исследовательский Мордовский государственный университет, Саранск, Республика Мордовия, Российская Федерация
[2]Математический институт им. В.А. Стеклова РАН, Москва, Россия
[3]Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация
kurinaos@gmail.com, ilnur.yanglyaev@mail.ru

Актуальным вопросом ресурсосбережения и минимизации рисков является эффективность применения методов математического моделирования для исследования нестационарных процессов.

Моделирование химико-технологических процессов проводится в несколько этапов – кинетическая модель [1], модель зерна катализатора [2], модель слоя катализатора [3]. Представленная в работе модель имеет иерархическую структуру [4]. Кинетическая составляющая отвечает химическим превращениям. Уравнения диффузии-конвекции-реакции описывают движение реакционной смеси в порах зерна катализатора. Гетерогенный характер реакции приводит к изменяющемуся реакционному объему, что вызывает возникновение процесса вынужденной конвекции [5]. Система балансовых уравнений веществ твердой фазы описывают изменения концентраций веществ. Уравнение теплопроводности включает теплообмен зерна со слоем газа и его нагрев вследствие экзотермических реакций. Оно получено для слоя катализатора путем осреднения уравнений по зерну катализатора. Уравнения тепломассопереноса составлены для описания движения газа в слое катализатора в приближении модели идеального вытеснения [6]. Зерно имеет сферическую форму. В работе оно принято равномерным и изотермичным [7].

Для математической модели составлен вычислительный алгоритм, на основе которого разработан программный код на языке C++. Для обхода вычислительной сложности при расчете диссипативных сил уравнение диффузии-конвекции-реакции записано в гиперболической форме с использованием малого параметра, рассчитанного на основе характерных времен процесса [8]. Это позволяет увеличить шаг интегрирования по времени и

сократить общее время расчета [9]. Алгоритм имеет второй порядок точности по времени и пространству [10].

Соответствие расчетных данных экспериментальным позволяет сделать вывод об адекватности модели.

Список литературы

[1] Яблонский Г.С., Быков В.И., Горбань А.Н. Кинетические модели каталитических реакций Новосибирск: Наука (Сиб. отделение), 1983.

[2] Малиновская О.А., Бесков В.С., Слинько М.Г. Моделирование каталитических процессов на пористых зернах. Новосибирск: Наука, 1975. 265 с.

[3] Боресков Г.К., Слинько М.Г. Моделирование химических реакторов // Теоретические основы химической технологии. 1967. Т. 1, № 1. С. 5-16.

[4] Слинько М.Г. Моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1968. 95 с.

[5] Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. Долгопрудный: Издательский Дом Интеллект, 2008. 408 с.

[6] Вольтер Б.В., Сальников И.Е. Устойчивость режимов работы химических реакторов. М.: Химия, 1972. 192 с.

[7] Reshetnikov S.I., Petrov R., Zazhigalov S., Zagoruiko A.N. Mathematical modeling of regeneration of coked Cr-Mg catalyst in fixed bed reactors // Chemical Engineering Journal. 2020. V. 380. DOI: 10.1016/j.cej.2019.122374.

[8] Chetverushkin, B.N. Three-Level Scheme for Solving the Radiation Diffusion Equation // Doklady Mathematics. 2023. Vol. 108, No. 1. P. 320-325. DOI 10.1134/s1064562423700837.

[9] Язовцева О.С. Применение гиперболизации в диффузионной модели гетерогенного процесса на сферическом зерне катализатора // Сибирский журнал вычислительной математики. 2024. Т. 27, № 4. С. 457-471. DOI 10.15372/SJNM20240407.

[10] Yazovtseva O.S. Numerical Study of Wave Processes during Oxidative Regeneration of a Stationary Catalyst Layer // Mathematical Models and Computer Simulations. 2024. Vol. 16, No. S2. P. S272-S281. DOI 10.1134/S2070048224700972.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Института нефтехимии и катализа Российской академии наук (тема № FMRS-2025-0031).

ПУБЛИКАЦИЯ В ЭЛЕКТРОННОМ СБОРНИКЕ ТЕЗИСОВ

ПБ-1

КОМБИНИРОВАННАЯ СВЧ-ПЛАЗМОХИМИЧЕСКАЯ СИСТЕМА СИНТЕЗА ОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ НА ОСНОВЕ КОНВЕРСИИ МЕТАНА И АКТИВАЦИИ ВОДЫ

Агрба А.И.[1], **Гринвальд И.И.**[1], **Капустин Р.В.**[2]

[1]ФГБОУ ВО «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева», Нижний Новгород, Россия
[2]ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», Нижний Новгород, Россия
grinwald@mts-nn.ru

Органические соединения, такие как, ацетилен, ацетальдегид, бензол и фенол являются исходными компонентами органического синтеза лаков, красок, полимеров, биологически активных и фармацевтических систем. В настоящее время основными методами получения этих соединений является глубокая переработка нефтяного сырья. Однако эта технология имеет серьезные недостатки, а именно, образование большого количества экологически опасных отходов, необходимость использования дорогостоящих катализаторов и низкая энергоэффективность. Альтернативой нефтехимическим синтезам являются плазмохимические процессы, среди которых СВЧ-технологии на основе конверсии природного газа наиболее экологичные и энергоэффективные.

В работе предложен подход к созданию технологии высокоселективного получения ацетилена, ацетальдегида, бензола и фенола на основе СВЧ-плазменной конверсии метана, основного компонента природного газа, в комбинации с процессом СВЧ-активации воды в плазмохимическом реакторе. Исследования показали, что плазмохимическое воздействие на воду дает возможность получить активные компоненты гидрирования и гидроксилирования продуктов конверсии. При этом основной продукт конверсии метана – ацетилен может тримеризоваться с образованием бензола и превращением его в фенол в комбинированной системе. При изменении условий и параметров СВЧ-плазмохимического процесса в качестве конечных продуктов могут быть получены ацетальдегид и фенол.

Для проведения комбинированных СВЧ-плазмохимических синтезов, сопровождающихся конверсией метана и активацией воды, авторами разработан макет установки, позволяющей существенно увеличить селективность процесса и обеспечить регулируемость основных направлений

протекания реакций (рис. 1). Для мониторинга процесса использовались методы ИК-спектроскопии *in situ* с новыми элементами, предложенными авторами.

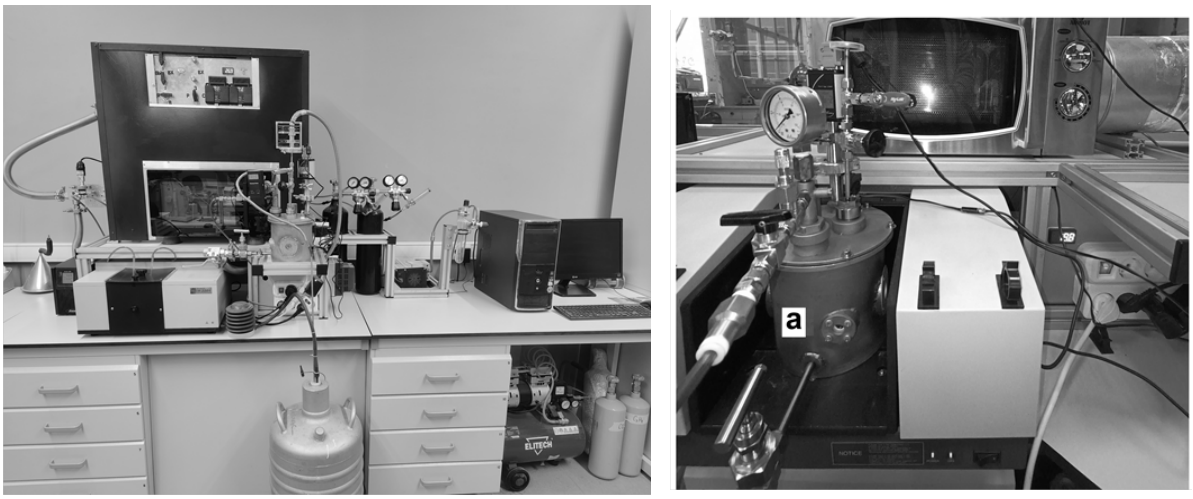


Рис. 1. Установка для СВЧ-плазмохимических синтезов в комбинированной системе (слева). Система низкотемпературной сепарации продуктов плазмохимического синтеза (а) с ИК-спектральным мониторингом (справа)

Для оптимизации выхода продуктов синтеза варьируются давление газа в системе, скорость потока газа через реактор, температура предварительного нагрева стенок реактора, время горения плазмы. .На рис. 2 приведены зависимость выхода ацетилена в системе от времени горения плазмы при различных давлениях метана в реакторе (рис. 2, слева) и зависимость выхода бензола от скорости потока метана в реакторе при различной температуре стенок реактора (рис. 2, справа).

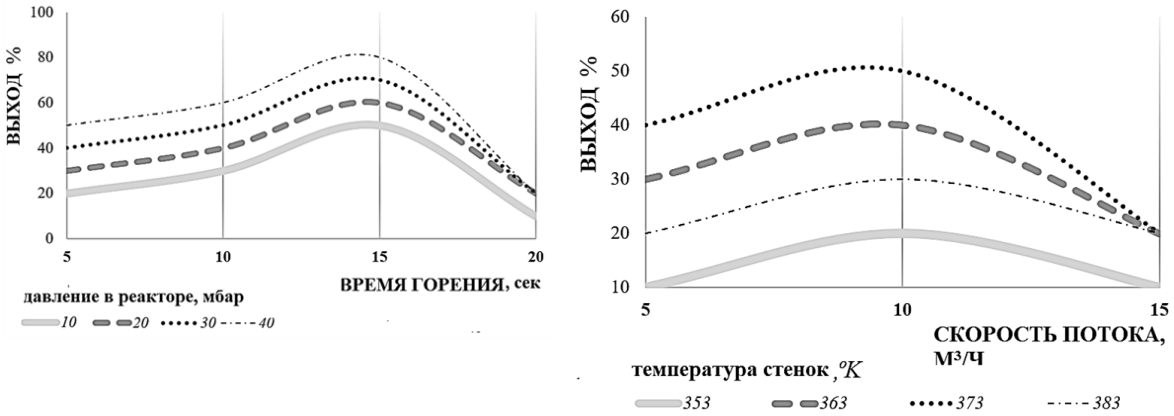


Рис. 2. Влияние времени горения плазмы на выход ацетилена (слева) и зависимость выхода бензола от скорости потока метана в реакторе (справа)

ПБ-2

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПАО МАСЛЯНЫХ ФРАКЦИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ АЛЮМИНИЙ ХЛОРОРГАНИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Ахундова К.М., Юнусов С.Г., Ибрагимова М.Дж., Заманова Л.С., Ибрагимова З.М., Маммадов А.М.

Институт нефтехимических процессов имени академика Ю.Г. Мамедалиева МНиОАР, пр. Ходжалы, 30, Баку, Азербайджан,
Konul.akhundova83@mail.ru

Процесс каталитической олигомеризации олефинов является одним из перспективных методов синтеза полиальфаолефиновых (ПАО) масел, используемых в качестве компонентов моторных масел и топлив. В качестве основного сырья для синтеза ПАО масел в промышленности применяются октен-1, децен-1, додецен-1 или смесь альфа-олефинов. Основными каталитическими системами, широко применяемыми для указанной цели, в настоящее время считаются смеси, включающие галогениды алюминия и доноры протонов. Однако, указанные каталитические системы обладают рядом недостатков [1-5]. С этих позиций, усовершенствование процесса приготовления и использования применяемых каталитических систем для синтеза ПАО, остается одной из актуальных проблем.

В работе представлены результаты исследований по олигомеризации децена-1 в присутствие алюминийхлорорганического каталитического комплекса, синтезированного на основе алюминия и н-бутилхлорида. Данный метод позволяет упростить процесс, проведением стадии синтеза катализатора в среде самого олефина без использования дополнительных количеств растворителя и активатора. Процесс олигомеризации децена-1 проводилась при массовом соотношении Al:БтХ:Децен-1=0.1-3:5-52:150-222, в температурном интервале 80-100 °C, в течение 4-8 часов; выявлено влияние указанных параметров на выход, структуру и свойства полученного олигомера. Установлено, что при массовом соотношении Al:БтХ:Децен -1=1:5:150, температуре 100-120 °C и времени реакции 6 час. выход олигомера составляет 96.17 % масс. Причем, 95.96 % масс полученного олигомеризата являет масляной олигомерной фракцией с температурой кипения $T_{кип.}$ ≥ 350 °C. Структурные параметры синтезированной масляной фракции изучены с помощью методов ИК- и ЯМР-спектроскопии. Методом ИК-спектроскопии

выявлено, что образцы полученного олигодецена, в основном, состоят из насыщенных углеводородных звеньев. Вместе с тем, в спектре в незначительном количестве наблюдается полосы поглощения, соответствующие C=C связям. В ^{1}H NMR (BRUKER-Fourier, 300.18 МГц, C_6D_6) спектре синтезированной олигомерной фракции приходится на долю резонансных сигналов групп CH_3 20.95 %, обнаруженных при 0.65-1.04 м.д., доля групп CH_2 наблюдаемых при 1.04-1.51 м.д. составляет 71.43 %, (2.86 %)- это нафтеновые звенья при 1.51-1.90 м.д., (3.96%) составляют группы CH_2, CH, расположенные в альфа положении относительно двойной связи при 1.90-2.70 м.д., (0,8 %) же приходится на долю атомов водорода, присущих углероду с двойной связью, расположенных при 4.70-5.90 м.д. Согласно данным спектрального анализа можно прийти к выводу о том, что во время реакции олигомеризации децена-1 при заданных условиях часть двойных связей, расположенных на концах полученной углеродной цепи в последней стадии циклизуясь образует нафтеновую структуру, за счет чего намного уменьшается общая непредельность олигомерного продукта. Олигомерная фракция, полученная в заданных условиях характеризуется йодным числом 0.76 Yq/100q, индексом вязкости 148, температурой застывания минус 56 °C, температурой воспламенения 235 °C.

Таким образом, полученные результаты показывают возможность синтеза ПАО продуктов линейного строения при участии Al и БтХ в режиме «in situ», исключая использование дополнительных количеств растворителя и активирующего компонента, времени и энергии.

Список литературы

[1] Tsvetkov O.N. Poly-α-olefin oils: Chemistry, technology and application. Moscow: Texnika. 2006.192 p.

[2] Котов С.В. Получение основ и компонентов масел на основе низших олефинов. Химия и технология топлив и масел. 2003. № 3. С.43-46.

[3] Матковский П.Е., Старцева Г.П., Чуркина В.Я. и др. Олигомеризация децена-1 под действием каталитических систем Al-активатор алюминия-R-Cl, Al-RCl[1]. Высокомолекулярные соединение. Серия А. 2008.т.50. №11. С.2001-2015.

[4] Ибрагимов Х.Д., Ализаде Ш.А., Ибрагимова З.М., Ахундова К.М. Каталитический комплекс на основе алюминия, 1,2-дихлорэтана и хлорида хрома в процессе олигомеризации гексена-1. Технологии нефти и газа, научно-технологический журнал. 2022. №3(140). С.11-14.

[5] Akhundova K.M., Yunusov S.H., İbrahimova M.J., Zamanova L.S. Hasanova F.M. İnvestigation of the oligomerization process of decene-1 in the presence of a catalytic system based on aluminum and n-butylchloride. Processes of Petrochemistry and Oil Refining. vol.26. No.2. 2025. pp.399-407.

ПБ-3

МЕХАНИЗМ АКТИВАЦИИ МЕТАНА НА M,ReO_x/Al_2O_3 КАТАЛИЗАТОРАХ

Бабаева Ф.А., Ахмедова Р.Г., Абасов С.И.

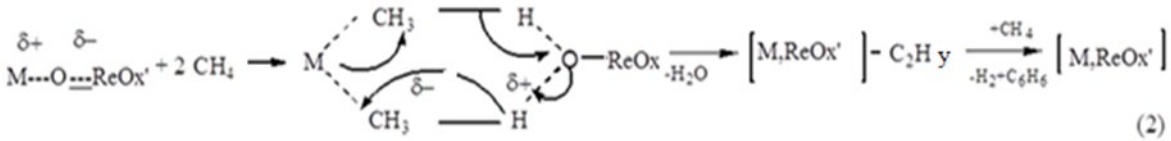
Институт нефтехимических процессов им. Ю.Г. Мамедалиева, Баку, Азербайджан
feridan@rambler.ru

Все большее внимание исследователей привлекает природный газ, запасы которого достаточно велики, в качестве альтернативного нефти источника сырья для создания ценных углеводородов и моторных топлив. В этой связи актуально вовлечение метана и других газообразных алканов в процессы с образованием С-С связей с участием новых каталитических систем.

Предположение об активации метана на M,ReOx/Al_2O_3 катализаторах сделаны на основании обобщения данных каталитических исследований, результатов изучения воздействия реакционной среды на катализатор и физико-химических исследований. Согласно этим данным активацию метана на таких катализаторах можно представить следующими схемами:

(1)

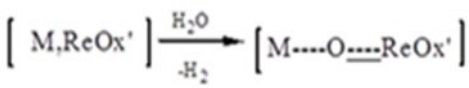
Реакция (1) определяет эффект разработки катализатора и образование активного центра, который далее взаимодействует с метаном (2)



(2)

Далее, интермедиат C_2Hy может тримеризоваться, образуя бензол и дегидрироваться с образованием углеродистых отложений

Схема (3) объясняет участие одного атома кислорода в образовании большого количества молекул бензола и роста соотношения C_6H_6/Оост с увеличением продолжительности опыта.



(3)

Таким образом, эффективность действия M,ReOx/Al_2O_3 катализаторов в превращении метана зависит от наличия центров, в состав которых входит

относительно легко восстанавливаемый элемент VIII группы, связанный с частично восстановленным оксидом переходного элемента. Благодаря этому, в катализаторе образуется особая форма кислорода, активирующая метан [1-4].

M,ReOx/Al_2O_3 катализатор, приготовленный адсорбционным методом и обладающий высокой активностью в превращении метана в бензол, содержит металл в высокодисперсном состоянии [1,2]. Благодаря взаимодействию высокодисперсного металла VIIIб гр и оксида рения, связанный кислород приобретает неоднородную реакционную способность. M,ReOx/Al_2O_3 катализатор ДГЦГМ активируется реактантом благодаря частичному восстановлению и покрытию углеродистыми отложениями. Связанный кислород участвует в образовании С-С связи, т.е. интермедиатов C_2Hy, а углеродистые отложения − в их последующей олигомеризации и дегидроциклизации.

Литература

[1] Бабаева Ф.А., Абасов С.И., Рустамов М.И. / Азербайджанский химический журнал, Баку: – 2008. № 1. С. 27-31.

[2] Бабаева Ф.А., Абасов С.И., Рустамов М.И. // Катализ в химической и нефтехимической промышленности, Москва: 2009. № 6. С. 23-27.

[3] Абасов С.И., Бабаева Ф.А., Рустамов М.И. // Материалы Российского Конгресса по катализу «РОСКАТАЛИЗ», Новосибирск: 3-7 октября 2011. С. 118.

[4] Бабаева Ф.А. // Процессы нефтехимии и нефтепереработки, – Баку: 2012. Т. 13. № 2. С. 181-190.

ПБ-4

ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ КАК ВОЗМОЖНОСТЬ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ОКИСЛЕНИИ АЛКИЛАРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ

Бухаркина Т.В., Вержичинская С.В., Горбунов М.А., Баскакова А.В.

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия, E-mail: verzhichinskaia.s.v@muctr.ru

Процесс окисления алкилароматических углеводородов представляет собой набор элементарных стадий с участием молекул, ионов и радикалов. Ключевыми из них, при схожих условиях окисления, можно считать те, в которых принимают участие пероксидные соединения (табл. 1).

Таблица 1. Элементарные стадии окисления алкилароматических углеводородов

<table>
<tr><td colspan="2">Углеводороды</td></tr>
<tr><td>этилбензол (1), изопропилбензол (2)</td><td>пара-ксилол (3), кумол (4) и мезитилен (5)</td></tr>
<tr><td>1) ROO• + RH* → ROOH + R•
2) ROO• + ROH → RO• + ROOH
RO• + O_2 → RO + HO_2•
3) 2ROOH → молекулярные продукты
4) ROO• + RO → R′COOH + RO•
5) ROOH + R′COOH ↔ ROH + R′COOOH
6) [Me^{+3}…R′COOOH] + ROH ↔ [Me^{+3}…R′COOH] + ROOH</td><td rowspan="2">1) ROO• + RH → ROOH + R•
2) R′COH + ROH → [R′COH…ROH]
ROO• + [R′COH…ROH] → ROOH + [R′COH…RO•]
[R′COH…RO•] + O_2 → 2 R′COH + HO_2•
3) 2ROOH → молекулярные продукты
4) R′COH + R′COH → [R′COH…R′COH]
ROO• + [R′COH… R′COH] → R′COOH + R′COH + R′CO•
5) ROOH + R′COOH ↔ ROH + R′COOOH
6) [Me^{+3}…R′COOOH] + ROH ↔ [Me^{+3}…R′COOH] + ROOH</td></tr>
<tr><td>* RH – углеводород;
ROOH – гидропероксид;
ROH – спирт;
RO – кетон;
R′COH – альдегид;
R′COOH – кислота;
R′COOOH – надкислота</td></tr>
</table>

Величина констант скоростей указанных элементарных стадий, очевидно, зависит от структуры окисляемого вещества. В настоящее время проведены исследования по окислению таких углеводородов этилбензол [1], пара-ксилол [2, 3], кумол и изопропилбензол [4], мезитилен [5], отличающихся типом и количеством алифатических заместителей. Наибольшее влияние на константы скоростей реакций оказывают индукционные и стерические эффекты [6] и изменение свободной энергии системы в процессе окисления может быть прямо пропорционально структурным характеристикам веществ. Одним из предлагаемых способов оценки количественного влияния индукционного и стерического эффекта заместителей на реакционную способность участников

процесса окисления может являться соотнесение констант элементарных стадий с максимумов интенсивности отклика связи в соответствующем веществе.

Так были проанализированы спектральные характеристики, полученные путем моделирования ИК-спектров органических соединений в программном комплексе ir.cheminfo.org. С учетом данных таблицы 1, в качестве модельных веществ выступали пероксиды, спирты, кетоны, альдегиды и кислоты, образующиеся в процессе окисления соответствующих углеводородов (1) – (5).

В результате проведенного анализа установлено, что с высоким коэффициентом детерминации описываются зависимости констант скоростей реакций элементарной стадий 1) с участием перекидных радикалов и 2) с участием спиртов – от величины интенсивности отдельностоящего пика связи «O – H» (3500-3550 $см^{-1}$), а стадии 4) с участием альдегидов и стадии 5) и 6) с участием кислот и их комплексов от величины интенсивности пика связи «C = O» (1740-1760 $см^{-1}$). При этом скорость стадии 3) слабо зависит от типа окисляемого углеводорода и накопление продуктов определяется, в основном, скоростью рекомбинации пероксидных радикалов. Данный результат объясним с позиций химических взаимодействий конкретных связей в процессе формирования продуктов и полупродуктов процесса окисления.

Список литературы

[1] С.В. Вержичинская, Д.А. Малинкин, А.А. Шарипов Индукционный период жидкофазного окисления этилбензола кислородом в присутствии стеарата кобальта. Схема превращений реагентов // Успехи в химии и химической технологии. сб.научн. трудов. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева. Т. XXVIII. № 10. 2014. 35–38 с.

[2] Т.В. Бухаркина, С.В. Вержичинская, Н.Г. Дигуров, С.Е. Шуляка Жидкофазное окисление пара-ксилола воздухом в присутствии металлов переменной валентности. [Текст]/ Химическая промышленность сегодня, №6 с. 32-39. 2013г. ISSN 0023.

[3] Бухаркина Т.В., Вержичинская С.В., Шуляка С.Е., Кресова К.Ю. Кинетическая модель окисления пара-ксилола кислородом воздуха в присутствии кобальтового катализатора // М.: РХТУ им.Д.И.Менделеева. Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. – 2011. – Том XXV. – №5 – с.63-66.

[4] Т.В. Бухаркина, С.В. Вержичинская, П.К. Кислова Кинетическая модель жидкофазного окисления изопропилбензола кислородом воздуха в присутствии кобальтового катализатора // Успехи в химии и химической технологии: сб.науч.тр. 2023. Т. 37. №8. с. 70-74.

[5] Buharkina T.V., Verzhichinskaya S.V., Gorbunov M.A., Kislova P.K., Bovaeva A.T. Acentric factors in kinetic modeling of the oxidation process of alkyl-fermented aromatic hydrocarbons // В книге: Mechanisms of Catalytic Reactions s (MCR-XII). Abstracts XII International Conference. Novovsibirsk, 2024. С. 295-296.

[6] В.А. Пальм Строение и реакционная способность органических соединений (Количественные закономерности) // Успехи химии. сб.научн. трудов. Э.: Тартуский гос.университет. Т. XXX. № 9. 1961. 1069 – 1123 с.

ПБ-5

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСШИХ АЛКИЛМЕТАКРИЛАТОВ НА ОСНОВЕ ВЫСШИХ ЖИРНЫХ СПИРТОВ

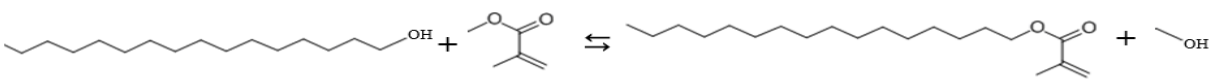
Веселинович А.М., Подпорина Д.А., Воронов М.С., Козловский Р.А., Сапунов В.Н., Сучков Ю.П.

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия, aveselinovich@bk.ru, dashagul68@bk.ru

Проблема зависимости от импортных производителей сырья продолжает оставаться одним из приоритетных вызовов перед отечественной нефтехимической промышленностью. Существует потребность в разработке и совершенствовании имеющихся технологий по получению ценных продуктов промышленной органической химии, в т.ч. малотоннажной химии. Такие продукты находят широкое применение в фармацевтике, сельском хозяйстве, строительстве, а также в качестве присадок для топлива. Большой потенциал в этой сфере имеет разработка способа получения алкилметакрилатов (АМА).

Основное применение данных соединений – использование как промежуточного продукта для синтеза на их основе депрессорных присадок к нефтям. Отличительной особенностью олигомеров высших АМА, обуславливающей их применение как активных компонентов депрессоров застывания, является сочетание в составе молекулы полярной эфирной группы с длинным углеводородным скелетом. Это позволяет АМА-депрессорам проявлять превосходящие свойства по сравнению с другими депрессорами. В конечном счете, это позволяет расширить диапазон применения дизельного топлива в условиях холодного климата.

В рамках данной работы рассмотрен синтез высших АМА путем основно-каталитического алкоголиза метилметакрилата (ММА) соответствующими высшими жирными спиртами (ВЖС). В качестве исходного сырья использовали индивидуальные ВЖС – миристиловый, цетиловый, стеариловый спирты и 2-этилгексанол. Реакцию проводили при катализе KOH в избытке ММА.



Алкоголиз ММА цетиловым спиртом

За ходом реакции наблюдали по выделению метанола. На основании наблюдаемого объема метанола делали вывод о степени превращения исходного спирта и протекании реакции (см. Рис. 1.).

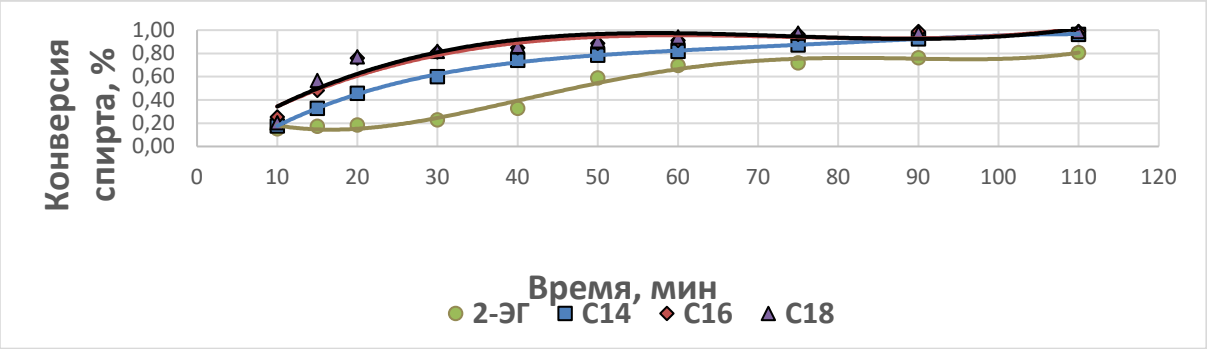


Рис. 1. Протекание реакции алкоголиза ММА различными ВЖС

Была отмечена различная реакционная способность ВЖС в реакции. На основании приведенных ниже экспериментальных данных (см. Рис. 2), можно сказать, что по мере увеличения углеводородной цепи спирта его реакционная способность в переэтерификации ММА возрастает. Выход АМА определяли по результатам анализа массы на ГХ после отгонки низкокипящих компонентов.

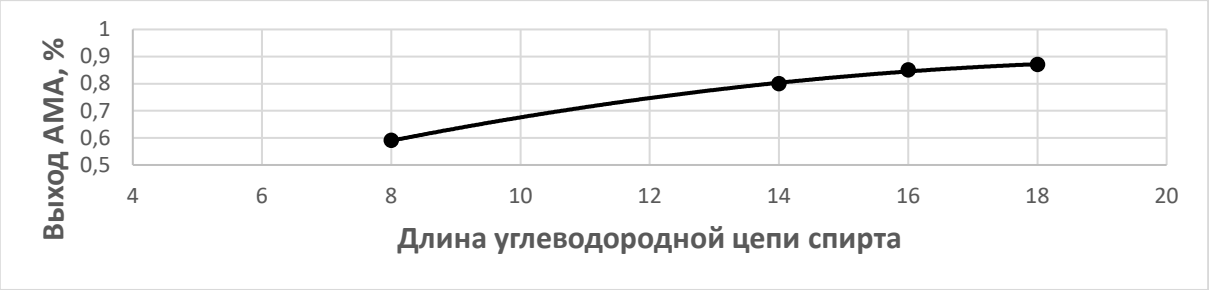


Рис. 2. Результаты переэтерификации ММА с ВЖС

В дальнейшем, полученные данные будут использованы для разработки технологии получения алкилметакрилатов различного строения.

Список литературы

[1] Ахмедов А. Н. и др. Вязкостные присадки к смазочным маслам на основе алкилметакрилатов и аллиловых мономеров //Журнал прикладной химии. – 2007. – Т. 80. – №. 8. – С. 1403-1404.

[2] Chen W., Zhao Z., Yin C. The interaction of waxes with pour point depressants //Fuel. – 2010. – Т. 89. – №. 5. – С. 1127-1132.

ПБ-6

ИЗУЧЕНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ФЕРРИТ КОБАЛЬТА (II) / БИОЧАР

Вяльцев А.В.[1], **Сундукова Н.Г.**[1], **Шабельская Н.П.**[1,2]

[1]Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, Новочеркасск, Россия
[2]Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
nina_shabelskaya@mail.ru

Увеличение техногенной нагрузки на человека в современном обществе приводит к развитию множества заболеваний, в том числе онкологических. Исследования в области медицины принимают все более междисциплинарный характер, создаются новые методы лечения. Ферриты переходных элементов являются перспективным кандидатом на применение в медицинских целях благодаря удачному сочетанию технических параметров: простотой синтеза, наличием магнитных свойств. Оксидные соединения железа проявляют антибактериальные свойства, не токсичны [1], что позволяет их рассматривать в качестве перспективных материалов для тераностики [2]. Развитая поверхность наночастиц имеет повышенную адсорбционную активность, что может быть использовано для синтеза органо-неорганических композиционных материалов [3]. Основной целью исследования было изучение условий формирования феррита кобальта (II) на поверхности биочара.

В качестве исходных материалов использовали раствор нитрата кобальта (II) с концентрацией 183 г/л, нитрата железа (III) с концентрацией 242 г/л, раствор аммиака 25 % (масс.), раствор лимонной кислоты 1200 г/л. Реагенты – $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$, $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$, $NH_3 \cdot H_2O$, $C_6H_8O_7$ использованы аналитической чистоты. В качестве органической части композита использовали биочар из скорлупы кокоса.

В качестве основного метода синтеза применяли золь-гель технологию [4]. В результате проведенного исследования установлено, что для формирования образцов с максимальной дефектностью и наибольшим выходом целевого продукта (феррита кобальта (II)) количество введенного аммиака составляет 40 ммоль (8 моль на 1 моль образовавшегося продукта). Это количество соответствует стехиометрическому по реакции:

$$Co(NO_3)_2 + 2Fe(NO_3)_3 + 8NH_4OH = Co(OH)_2 + 2Fe(OH)_3 + 8NH_4NO_3.$$

В процессе термолиза на поверхности биочара образуются частицы феррита кобальта (II) по реакции:

$$Co(OH)_2 + 2Fe(OH)_3 = CoFe_2O_4 + 4H_2O.$$

Минимальным размером кристаллитов (7,9 нм) обладает образец, полученный при введении 54 ммоль аммиака. Максимальное значение размера кристаллитов (12,6 нм) установлено для образца, полученного при введении 27 ммоль аммиака (67 % от оптимального). Этот же образец обладает наибольшим количеством примесных фаз. Можно предположить, что недостаточное количество аммиака приводит к не полному осаждению гидроксидов металлов, что затрудняет формирование структуры феррита кобальта (II). Избыточное количество аммиака может приводить к формированию устойчивых аммиакатных комплексов, что также снижает количество шпинели.

Список литературы

[1] Ezealigo U.S., Ezealigo B.N., Aisida S.O., Ezema F.I. Iron oxide nanoparticles in biological systems: antibacterial and toxicology perspective // JCIS Open. 2021. V. 4. N 100027.

[2] Sankaranarayanan S.A., Thomas A., Rengan A.K. [et al.] Iron oxide nanoparticles for theranostic applications - recent advances // Journal of Drug Delivery Science and Technology. 2022. V. 70. N 103196.

[3] Thamer B.M., Abdulhameed M.M., El-Newehy M.H. Tragacanth Gum Hydrogel-Derived Trimetallic Nanoparticles Supported on Porous Carbon Catalyst for Urea Electrooxidation // Gels. 2022. V. 8. N 5. P. 292.

[4] Shabelskaya N.P., Sulima S.I., Sulima E.V. [et al.] Study of the Possibility of Using Sol–Gel Technology to Obtain Magnetic Nanoparticles Based on Transition Metal // Gels. 2023. V. 9, Is. 3. N 217.

Благодарность

Исследование выполнено при финансировании Проекта Министерства науки и высшего образования РФ по поддержке молодежной лаборатории в рамках межрегионального НОЦ Юга России (FENW-2024-0001).

ПБ-7

УСТАНОВКА ДЛЯ КОМПЛЕКСНОГО УЛАВЛИВАНИЯ ЛЕТУЧИХ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА И НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ОКСИДОВ АЗОТА

Гаспарян М.Д.[1], **Грунский В.Н.**[1], **Мочалов Ю.С.**[2], **Сальникова О.Ю.**[1], **Дубко А.И.**[1], **Савчиц С.М.**[2], **Обухов Е.О.**[1]

[1]ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», 125047, Москва, Миусская площадь, 9, e-mail: migas56@yandex.ru
[2]АО «Прорыв», 107140 Москва, ул. Малая Красносельская, 2/8, корп. 7

Установка предназначена для очистки отходящих газов процесса остекловывания жидких высокоактивных отходов (ВАО), содержащих, в основном, нитраты летучих продуктов деления (ЛПД). При температурах варки стекла до 1200 °С в окислительной среде происходит выделение в газовую фазу оксидов целого ряда ЛПД и оксидов азота. Для их улавливания и нейтрализации предложен концепт многокорпусной модульной установки (рис. 1), состоящий из двух универсальных газоочистных аппаратов, число которых может быть увеличено, в зависимости от состава очищаемых газов.

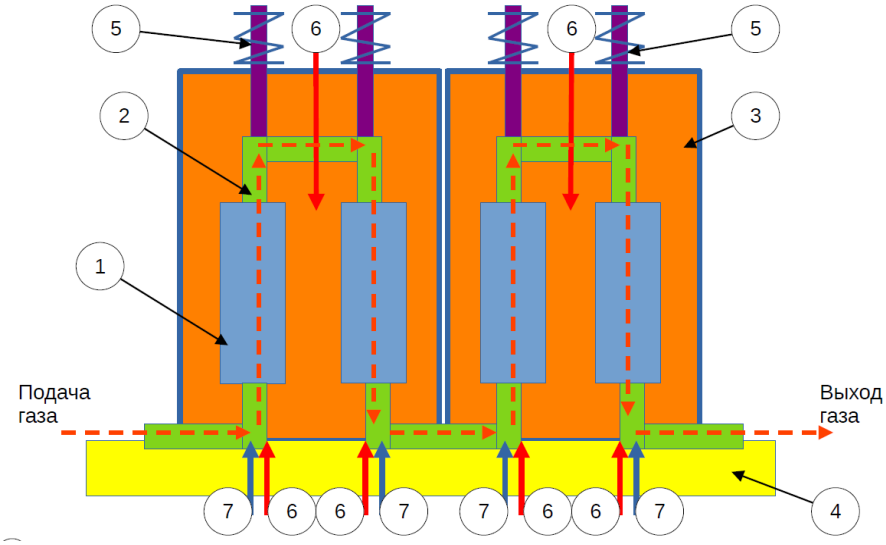


Рис. 1. Концепт экспериментальной газоочистной установки:
1 – сменный газоочистной картридж, 2 – газоход, 3 – съемная колпаковая электропечь, 4 – электрообогреваемое основание, 5 – подпружиненный шток, 6 – регулировка и контроль температуры, 7 – датчики давления

В каждом аппарате, работающем в своей температурной зоне, расположены 2 сменных картриджа, заполненных полифункциональными керамическими блочно-ячеистыми контактными элементами с различными активными покрытиями [1]. Рассмотрим вариант с 4-мя аппаратами.

В первом по ходу газа аппарате при температуре 900 ± 50 °С происходит хемосорбция оксида цезия контактными элементами с активным слоем из смеси оксидов алюминия и кремния с образованием устойчивых алюмосиликатов цезия: поллуцита ($CsAlSi_2O_6$) и нефелина ($CsAlSiO_4$) [2].

Во втором – улавливание оксидов модибдена, теллура, рутения, технеция, селена, сурьмы и некоторых других ЛПД при температуре 750 ± 50 °С контактными элементами с активным слоем оксида кальция с образованием его солей кислородсодержащих кислот: $CaMoO_4$, $CaTeO_3$, $CaRuO_3$ и т.д. [3].

В третьем аппарате контактными элементами с активным слоем нитрата серебра в интервале температур 150-200 °С улавливается молекулярный йод с оразованием иодида серебра (AgI) [2].

И наконец, в четвертом аппарате, после сорбционного улавливания большинства соединений ЛПД, можно проводить каталитическое восстановление оксидов азота на контактных элементах с активным слоем из оксидов церия и марганца с использованием в качестве агента-восстановителя моноксида углерода при температурах 350 ± 50 °С [4].

На основании разработанного концепта выполнен эскизный проект установки, который может являться прототипом опытно-промышленной системы газоочистки для применения в процессе остекловывания ВАО на радиохимических производствах.

Список литературы

[1] Гаспарян М.Д., Грунский В.Н., Беспалов А.В., Давидханова М.Г., Кабанов А.Н., Лукин Е.С., Попова Н.А., Харитонов Н.И. Синтез полифункциональных высокопористых блочно-ячеистых материалов на основе оксидной керамики // Огнеупоры и техническая керамика – 2016. – № 6. – С.3-8.

[2] Гаспарян М.Д., Грунский В.Н., Мочалов Ю.С., Суханов Л.П., Титов А.В., Тищенко С.В., Обухов Е.О. Локализация паров иодида цезия на керамических блочно-ячеистых контактных элементах в окислительной среде // Теоретические основы химической технологии – 2023. – Т.57. – № 6.– С.720-730.

[3] Гаспарян М.Д., Грунский В.Н., Сальникова О.Ю., Мочалов Ю.С., Суханов Л.П., Тищенко С.В. Локализация летучих продуктов деления на керамических блочно-ячеистых контактных элементах с нанесенным активным слоем оксида кальция // Химическая технология – 2024. – Т.25.– № 6. – С. 232-240.

[4] Гаспарян М.Д., Грунский В.Н., Обухов Е.О., Соколова А.Н. Керамические высокопористые блочно-ячеистые контактные элементы для сорбционно-каталитической очистки газов от оксидов азота // Сборник трудов XXI всероссийского симпозиума с международным участием «Физико-химические проблемы адсорбции, структуры и химии поверхности нанопористых материалов». Москва, ИФХЭ РАН – 2025. С. – 231-232.

Благодарность

Работа выполнена в рамках и при поддержке Проектного направления «Прорыв».

ПБ-8

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ БИОЭТАНОЛА В ПРИСУТСТВИИ КАТАЛИЗАТОРА НТК-4

Дубровский В.С., Козловский И.А., Капнина О.А.

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия, dubrovskiy456@mail.ru

В последние десятилетия биоэтанол стал объектом повышенного внимания в качестве альтернативного источника энергии и сырья. Как и этанол, биоэтанол может быть использован в качестве топлива, а также для производства ряда химических веществ, в частности, для синтеза этилацетата – одного из наиболее распространенных растворителей лакокрасочной промышленности. Процесс получения этилацетата из этанола проводят в газовой фазе в присутствии гетерогенного катализатора, как правило, содержащего медь или оксид меди [1]. В данной работе приведены результаты исследования процесса прямой конверсии этанола в этилацетат на промышленном катализаторе НТК-4. Состав катализатора НТК-4, % масс: Al_2O_3 – 19,2, CuO – 56,8, ZnO – 10,2, Cr_2O_3 – 13,7. Каталитические испытания проводили в газовой фазе в проточном реакторе со стационарным слоем катализатора. Предварительно катализатор активировали в токе азотно-водородной смеси.

На рисунке 1 показано влияние времени контакта катализатора с реакционной смесью на конверсию этанола. Эксперименты проводили при давлении 2 МПа, температуре 270 °С и подаче этанола 0,225 мл/мин. Время контакта варьировали изменением загрузки катализатора в диапазоне от 2 до 30 г.

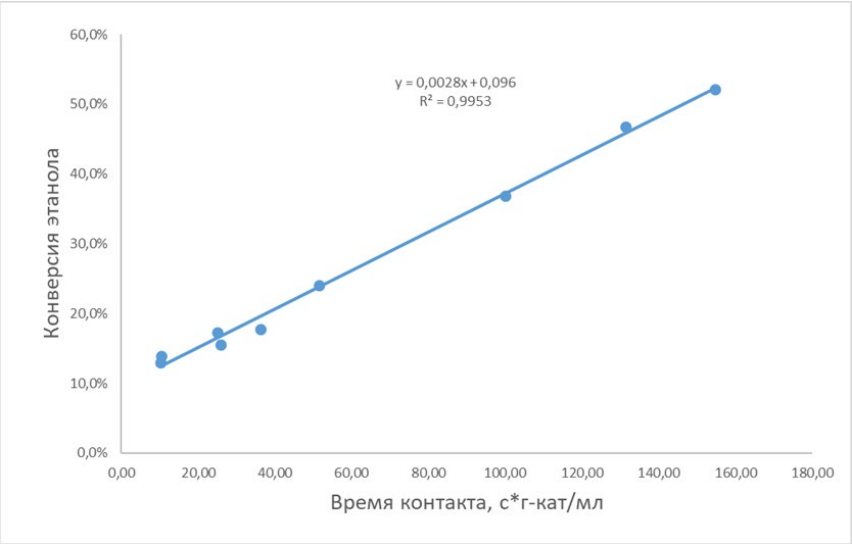


Рисунок 1. Зависимость конверсии этанола от времени контакта

Т.к. данная зависимость описывается линейной функцией, можно сделать вывод, что суммарный порядок реакции расходования этанола равен нулю.

На рисунке 2 показано влияние температуры проведения процесса на конверсию этанола и селективность по этилацетату. Эксперименты проводили при давлении 2 МПа и объемном расходе по жидкому этанолу 0,87 $ч^{-1}$.

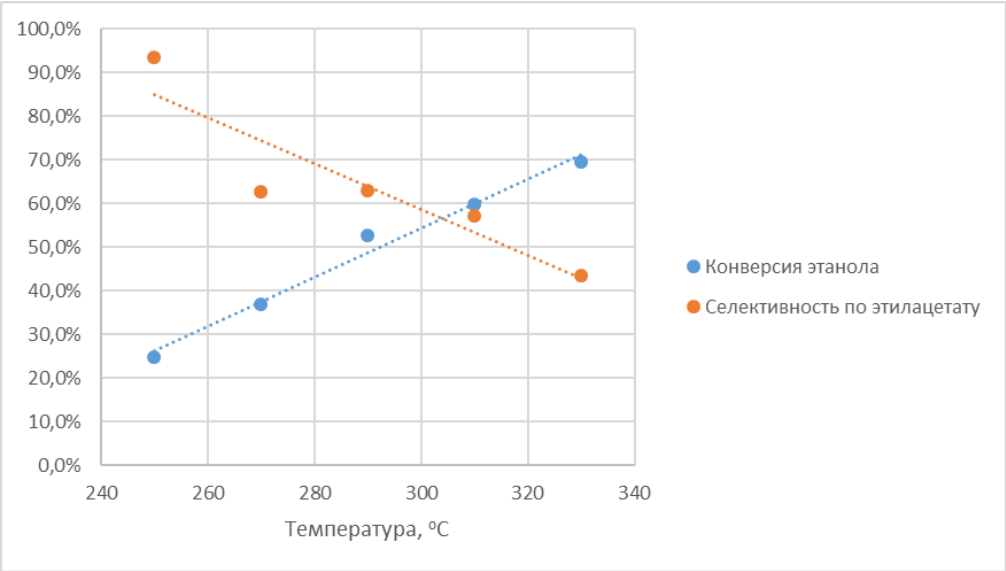


Рисунок 2. Зависимость конверсии этанола и селективности образования этилацетата от температуры

Как было сказано выше, суммарный порядок реакции расходования этанола равен нулю. Тогда зависимость конверсии этанола от времени описывается следующим уравнением: $(dx_{EtOH})/dt=k$. Обработкой экспериментальных данных по полученному уравнению была вычислена наблюдаемая энергия активации процесса расходования этанола: 34,9 кДж/моль.

Список литературы

[1] Freitas I.C., Domyanova S., Oliveira D.C., Marques C.M.P., Bueno J.M.C. // Journal of Molecular Catalysis A: Chemical. 2014. 381. 26-37.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FSSM-2023-0004).

ПБ-9

МОДИФИКАЦИЯ БИТУМНОГО ВЯЖУЩЕГО МАЛЕИНОВЫМ АНГИДРИДОМ И ПОЛИОЛЕФИНАМИ

Зарубин П.И., Сапунов В.Н., Луганский А.И.

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия, acetoxime@gmail.com

Разработка технологии получения основного компонента – битума для производства качественного и долговечного дорожного покрытия является важным вопросом в условиях изменяющихся климатических условий. Одним из способов решения проблемы трещиностойкости и увеличения долговечности асфальтодорожных покрытий выступают его модификации полимерами – полимерно-битум вяжущие (ПБВ). При этом перспективным направлением является использование материалов вторичной переработки таких как термопласты, которые составляют 80 % от общего объема производства полимеров, производимых во всем мире [1-3].

На основе ранее проведенных исследований [4] было установлено, что малеиновый ангидрид хорошо себя зарекомендовал в качестве модификатора для битумной композиции при добавке вторичных полиолефинов (полиэтилена и полипропилена). Он способствует значительному увеличению температуры размягчения и твердости материала за счет связывания двойных связей по реакции Дильса-Альдера.

Целью данной работы является изучение влияния полиолефинов на свойства ПБВ на основе малеинового ангидрида, что позволяет в дальнейшем перерабатывать вторичные полиолефины, получая при этом качественное дорожное покрытие с повышенными прочностными характеристиками.

Получение ПБВ проводят в 2 стадии в термостойком стакане, оснащенном механической мешалкой с числом оборотов 1500 об/мин. Температуру смеси регулируют с помощью термопары. На 1 стадии в разогретый до 160 °С битум добавляется малеиновый ангидрид и тщательно перемешивается в течение 2 часов. После образования однородной смеси температуру увеличивают до 180 °С и далее добавляют небольшими порциями полимер и продолжают нагрев реакционной массы в течение 2 часов до полного растворения полимера в битумной композиции.

Составы полученных образцов на основе малеинового ангидрида с различным содержанием полиэтилена и полипропилена представлены в таблице 1.

Необходимо отметить, что температура размягчения смеси возрастает при добавлении большего количества полимера (табл. 1). При этом пенетрация композиций на основе полиэтилена ниже, чем у составов на основе полипропилена, что связано с большей реакционной способностью двойных связей полиэтилена, обеспечивая при этом твердость готового продукта.

Полученные образцы соответствуют требованиям ГОСТ Р52056-2003 [5] по температуре размягчения, но не соответствуют по пенетрации и растяжимости, однако большой запас температуры размягчения для образцов с составом 3 % МА, 3 % ПП и 3 % МА, 3 % ПЭ дает возможность получить ПБВ с необходимыми свойствами путем разбавления смеси гудроном или битумом.

Таблица 1. Характеристики ПБВ с различным содержанием МА и полиолефинов

Содержание компонентов (% масс)	Пенетрация при 25 °С, 0,1 мм	Температура размягчения, °С	Растяжимость, мм при 25 °С
Составы на основе МА и ПП			
1%МА, 2%ПП	33	59,3	120
3%МА, 3%ПП	29	69,1	57
3%МА, 2%ПП	35	63,2	75
2%МА, 1%ПП	47	55,8	120
2,5%МА, 1%ПП	25	57,2	77
3%МА, 1%ПП	33	62,8	86
4%МА, 1%ПП	25	61,6	73
Составы на основе МА и ПЭ			
1%МА, 3%ПЭ	31	67,8	124
2%МА, 3%ПЭ	35	64,5	97
2%МА, 5%ПЭ	26	72,9	33
3%МА, 3%ПЭ	27	68,9	91
Значение по ГОСТ (не менее)	60	54	250
ГОСТ	ГОСТ 11501-78	ГОСТ 11506-73	ГОСТ 11505-75

Список литературы

[1] Гуреев А.А., Чернышёва Е.А., Коновалов А.А., Кожевникова Ю.В. Производство нефтяных битумов. М.: Изд. Нефть и газ, 2007. 102 с.

[2] Модификатор органического вяжущего пат. РФ 2583016 / Лысенко Алексей Георгиевич, Плешаков Николай Олегович, 2016.

[3] Production of stable polypropylene-modified bitumens, Carlo Giavarini, Paolo de Filippis, M. Laura Santarelli and Marco Scarsella, Fuel Vol. 75, No. 6, pp. 681-686, 1996.

[4] Строкова В.А., Зарубин П.И., Луганский А.И. Модификация битумно-вяжущего добавкой малеинового ангидрида// Успехи в химии и химической технологии, издательство Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (Москва), том 35, № 7, с. 87-90.

[5] ГОСТ Р 52056-2003. Вяжущие полимерно-битумные дорожные на основе блоксополимеров типа стирол-бутадиен-стирол.

ПБ-10

ДВАДЦАТЬ ПЯТЬ КОНФЕРЕНЦИЙ «ХИМРЕАКТОР»: БИБЛИОМЕТРИЧЕСКАЯ СТАТИСТИКА ЗА 60 ЛЕТ

Зибарева И.В., Альперин Б.Л.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
zibareva@catalysis.ru

XXV Международная конференция по химическим реакторам (ХимРеактор-25) состоялась в 2023 г. в Тюмени, первая (в статусе Всесоюзного совещания) – в 1963 г. в Новосибирске. Все 25 конференций организованы Институтом катализа СО АН. В настоящее время собранная из разрозненных, часто труднодоступных, источников информация о докладах ХимРеактор агрегирована на информационно-поисковом портале «Катализ» Института [1] в разделе «Материалы конференций» с возможностью поиска по названиям докладов, именам и аффилиациям авторов, рефератам, и др. В настоящей работе проведен библиометрический и тематический анализ материалов конференций. Всего в них участвовало почти 7 тыс. авторов, аффилированных с более чем 1 тыс. организаций 70 стран. Сделано ~ 3.9 тыс. докладов – более 160 пленарных и ключевых, 2.3 тыс. устных, и 1.3 тыс. стендовых (рис. 1).

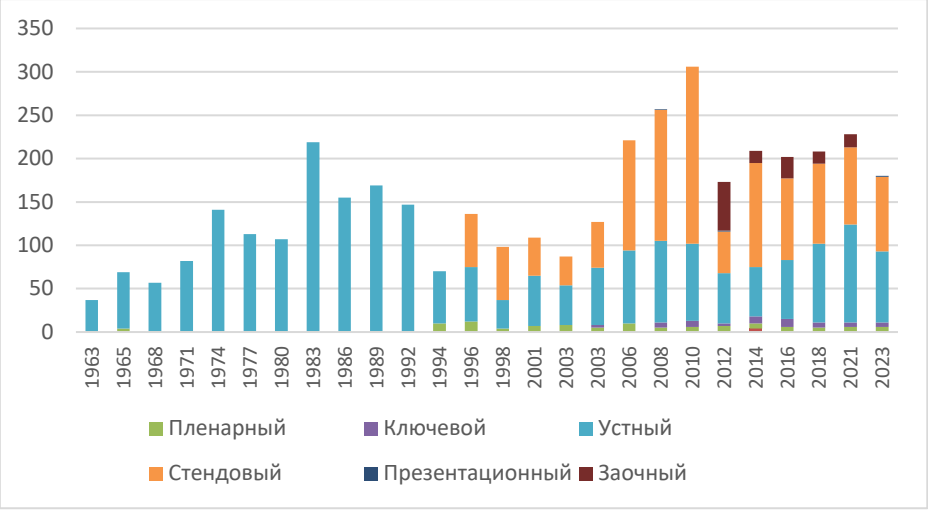


Рис. 1. Распределение докладов на ХимРеактор-1 – ХимРеактор-25 по типам

Начиная с 1994 г. (ХимРеактор-12, Ярославль) конференция, участие в которой приняли ученые из России, Украины, Беларуси и Казахстана, стала международной. Конференции ХимРеактор-15 – ХимРеактор-24 проведены за рубежом, авторы докладов аффилированы более чем с 40 странами (рис. 2). По количеству докладов на конференциях ХимРеактор-1 – ХимРеактор-25 после

России (1837) наиболее представлены Италия (124), Германия (114), Украина (104), Испания (101), Нидерланды (73), Соединенное королевство (69), США (68), Финляндия (66), Франция (65), Бельгия (63), Казахстан (60), Азербайджан (59), и Польша (57). Избранные доклады издавались в виде статей в специальных выпусках журналов Chemical Engineering Journal (CEJ), Катализ в промышленности (КвП), Теоретические основы химической технологии (ТОХТ) и Химическая промышленность (ХП) (рис. 3).

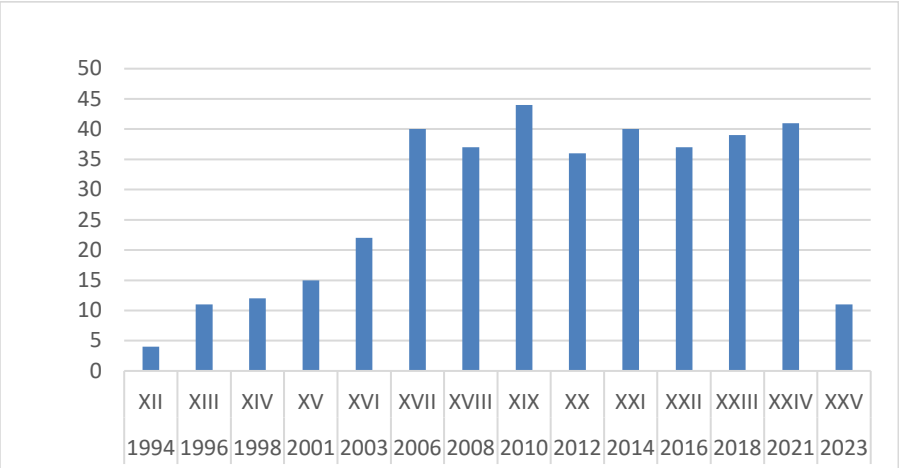


Рис. 2. Количество стран-участников конференций ХимРеактор-12 – ХимРеактор-24

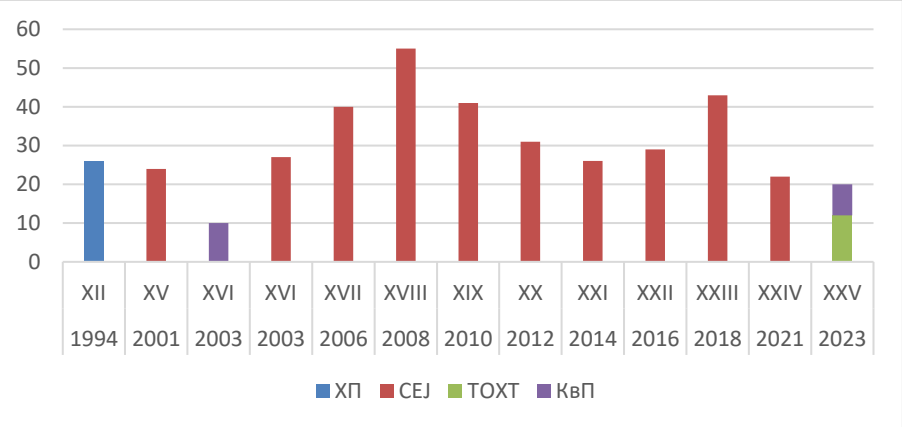


Рис. 3. Количество статей на основе докладов на конференциях ХимРеактор-15 – ХимРеактор-24 в специальных выпусках журналов

Литература

[1] URL: https://biblhelper.catalysis.ru/public

Благодарность

Авторы благодарны Т.В. Замулиной за помощь в сборе материалов конференций ХР, А.Н. Загоруйко за полезное обсуждение, и Министерству науки и высшего образования Российской Федерации за финансовую поддержку в рамках государственного задания Институту катализа им. Г.К. Борескова (проект FWUR-2024-0034).

ПБ-11

ОСОБЕННОСТИ ОСНОВНО-КАТАЛИТИЧЕСКОГО АЛКОГОЛИЗА МЕТИЛОВОГО ЭФИРА КАПРОНОВОЙ КИСЛОТЫ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЕМ

Ибатов Я.А., Качаева А.С., Горбунова С.А., Воронов М.С., Сапунов В.Н., Сучков Ю.П., Староверов Д.В.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9,
ya.ibatov@mail.ru

Сложные эфиры полиолов и масложирового сырья являются возобновляемыми продуктами, обладающими низкой токсичностью, хорошей биоразлагаемостью, высокой смазывающей способностью. Они применяются в качестве смазочно-охлаждающих жидкостей, эмульгаторов, присадок, добавок в фармацевтике и пищевой промышленности [1]. Для масштабирования процесса необходима адекватная кинетическая модель процесса, а значит её необходимо разработать.

В настоящей работе изучались реакции основно-каталитического алкоголиза метилового эфира капроновой кислоты (МЭКК), выбранного в качестве модельного вещества, и этиленгликоля в присутствии гидроксида калия в среде растворителя - диоксана. Предполагается следующая реакционная схема:

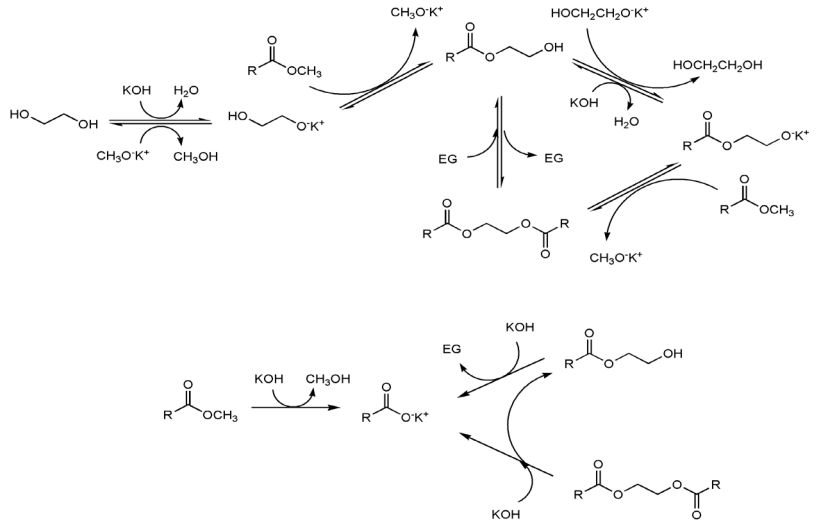


Рисунок 1. Реакционная схема алкоголиза МЭЖК и этиленгликоля

Эксперименты проводили при общей загрузке 30 г, из которых 20 г составлял диоксан и 10 г – реагенты, при 60 °С и 1 масс. % гидроксида калия. Процесс алкоголиза МЭКК и этиленгликоля проводили при 4-кратном мольном избытке гликоля, а реакцию дигексаноата этиленгликоля с 8-кратным избытком

этиленгликоля. Для проведения данных процессов эфир в среде диоксана нагревали в трехгорлой колбе до температуры реакции. После чего туда добавляли раствор щелочи в этиленгликоле, предварительно полученный путём его растворения в лабораторном стакане, считая этот момент началом реакции.

Алкоголиз моноэфира этиленгликоля и капроновой кислоты проводили, разогревая эфир до температуры реакции и добавляя по достижении 60°C твёрдый гидроксид калия. Данный момент принимали за начало протекания реакции. С помощью газо-жидкостной хроматографии было подтверждено протекание данных реакций.

Таблица 1. Результаты алкоголиза эфиров капроновой кислоты

Вещество	**Концентрации веществ, моль/л**					
	Алкоголиз МЭКК и ЭГ		**Алкоголиз моноэфира**		**Алкоголиз диэфира и ЭГ**	
	Начало реакции	Конец реакции	Начало реакции	Конец реакции	Начало реакции	Конец реакции
Этиленгликоль	3,5	2,9	–	0,4	3,5	3,7
МЭКК	0,9	0,3	–	–	–	–
Моноэфир	–	0,54	2,0	1,52	0,02	0,10
Диэфир	–	0,028	0,045	0,32	0,430	0,351

Установлено, что в ходе алкоголиза метилового эфира капроновой кислоты с этиленгликолем образуются моно- и диэфир этиленгликоля и капроновой кислоты, которые также участвуют в реакционном процессе [2]. В свою очередь, моноэфир подвергается межмолекулярному обратимому алкоголизу с образованием диэфира и этиленгликоля. Обратимость подтверждается взаимодействием диэфира с гликолем. Также с помощью метода неводного титрования был подтвержден факт протекания реакции омыления, который необходимо учитывать при составлении кинетической модели процесса.

Список литературы

[1] Godfred Appiah, Samuel Kofi Tulashie, Ephraim Edem Amoah Akpapi, Eldon R. Rene, Daniel Dodoo. Biolubricant production via esterification and transesterification processes: Current updates and perspectives // Energy Research. – 2021. – Т. 46. – №. 4. – С. 3860 – 3890.

[2] А.К. Гуськов, Р.А. Козловский, М.Г. Макаров, С.В. Перевертайлов, В.Ф. Швец. Кинетика взаимодействия оксида этилена с уксусной кислотой в переходной области // Кинетика и катализ. – 1996. – Т.37. - №4. – С.563-568.

Благодарность

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д.И. Менделеева «Приоритет-2030».

ПБ-12

ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В 3D ТЕХНОЛОГИЯХ

Князева А.Г.[1], Поболь И.Л.[2]

[1]Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия
[2]Физико-технический институт НАН Беларуси, Минск, pobol@phti.by

Трудно найти отрасль, где бы сейчас не использовались 3D-технологии. В химии технология послойного наплавления, стереолитография, селективное лазерное плавление, электронно-лучевые технологии используются для создания реакторов и катализаторов, различного вспомогательного оборудования. Однако, кроме этого, некоторые виды комбинированных 3D технологий могут рассматриваться как объекты изучения в химии и химической технологии. К ним относятся, например, лазерные и электронно-лучевые порошковые технологии, когда смеси порошков включают химически реагирующие компоненты. В этом случае в области высоких температур протекают химические реакции, приводящие к формированию состава материала in situ [1-4]. При этом тепловыделение в реакциях влияет на тепловой баланс в системе и режимы создания материалов и изделий. Область расплава и двухфазную зону можно рассматривать как химический реактор, который приближается к идеальному в квазистационарном режиме технологического процесса. Определение условий, при которых такой режим реализуется, представляет интерес для оптимизации технологий [2, 4-7].

Список литературы

[1] Князева А.Г., Поболь И.Л., Гордиенко А.И., Демидов В.Н., Крюкова О.Н., Олещук И.Г. Моделирование теплофизических и физико-химических процессов, сопровождающих формирование покрытий в электронно-лучевых технологиях модификации поверхностей металлических материалов // Физическая мезомеханика. 2007, Т.10, №5. - С. 105-119.

[2] Bakinovskiy A.A., Knyazeva A.G., Krinitcyn M.G., Kryukova O.N., Pobol I.L., Fedorov V.V., Rajczyk Ya. Electron beam assisted deposition of Ni–Al coatings onto steel substrate // Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis. 2019, V. 28, No. 4, pp. 245–255.

[3] Anisimova M.A., Knyazeva A.G., Krinitcin M.G., Fedorov V. V., Pobol I. L. Formation of a porous titanium part under directed energy deposition: theory and experiment // High Temperature Material Processes. 2019, V. 23, No 1, pp.1–23.

[4] Knyazeva A.G., Krinitcin M.G. Reaction initiation by laser in Ti-Al-CuO-powder mixture // Int. Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis. 2025, V. 34, No. 1, pp. 1–9.

[5] Князева А.Г. , Крюкова О.Н. Критические явления при растворении частиц в расплаве в процессе электронно-лучевой наплавки покрытий // Журнал ПМТФ. 2007, № 1. – С.131-142.

[6] Kryukova O.N., Knyazeva A.G. Modeling of multiphase composite synthesis on substrate taking into account the staging of chemical reactions // Applied Solid State Chemistry. 2019, V. 4., No. 1, pp.9-24.

[7] Knyazeva A., Kryukova O. Modeling Ti-Al-C-composite synthesis on a substrate under control of electron beam // Journal of Crystal Growth. 2020, V. 531, 125349.

ПБ-13

МЕХАНОХИМИЧЕСКИЙ *IN SITU* СИНТЕЗ КАРБИДА ТИТАНА В МАТРИЦЕ ТИТАНА

Ковалева С.А.[1], Григорьева Т.Ф.[2], Веремей И.С.[1,3], Разумов Н.Г.[4], Девяткина Е.Т.[2], Восмериков С.В.[2], Ридель Н.С.[2], Ляхов Н.З.[2]

[1]Объединенный институт машиностроения НАН Беларуси, Минск, Беларусь
[2]Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск,
[3]Университет Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
[4]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия
svetakov2021@gmail.com

Титан является одной из наиболее перспективных матриц для металломатричных композиционных материалов, поскольку имеет высокую температуру плавления, высокие прочностные характеристики, высокую коррозионную стойкость и низкий коэффициент теплового расширения. Эти свойства титана дают возможность изделиям из него работать в широком диапазоне температур и в различных средах. Титан, как и все практически чистые металлы, подвержен высокотемпературной ползучести, и для ее снижения в качестве упрочняющей добавки наиболее перспективен карбид титана вследствие его низкой плотности, высокой температуры плавления, высокого модуля упругости, высокой твердости по Виккерсу, высокой прочности на изгиб, хорошей теплопроводности, высокой устойчивости к коррозии и окислению и высокой термостойкости. Механохимический синтез TiC исследован многими авторами, и показано, что он инициируется локально и начинается внутри частиц порошка. Процесс распространяется по цепному механизму и происходит в течение долей секунды. Общая кинетика процесса контролируется расплавленной фазой. Объединение таких факторов, как высокая энергетика системы, плавление и механическая активация твердой и жидкой фаз позволяют обеспечить высокие скорости МСР. Наиболее эффективно этот процесс идет в высокоэнергетической планетарной шаровой мельнице АГО-2, индукционный период реакции составляет менее 4 мин [1].

Целью этой работы было изучение процесса механохимического *in situ* формирования карбида титана при существенном разбавлении металлом (50 и 70 мас. %), т. е. непосредственно в титановой матрице.

В работе использованы порошки титана марки ПТОМ-1 с размером частиц ~45 мкм и сажи ПМ-15. Использованы смеси порошков (Ti+C) + 50 (и 70) мас. %

Ti (при стехиометрическом соотношении Ti : C). Смеси обрабатывали в планетарной шаровой мельнице АГО-2, в атмосфере аргона (диаметр стальных шаров 5 мм, загрузка 200 г, навеска образца 10 г, скорость вращения барабанов вокруг общей оси ~1000 об/мин).

Рентгенодифракционные исследования выполнены на дифрактометре D8 Advance (AXS Bruker, Германия) с использованием Cu*K*α излучения. Рентгеноструктурный анализ (РСА) выполнен по методу наименьших квадратов. Исследования микроструктурных характеристик (размера кристаллитов *L* и микродеформаций *e*) и количественный фазовый анализ (Q, мас. %) проведены по методу Ритвельда.

МХС карбида титана в смеси Ti+C, разбавленной титаном (50 и 70 мас. %), был проведен в тех же условиях, что и в стехиометрической смеси. Расчет адиабатических температур реакций в этих смесях показал, что при x = 50 мас. % $T_{ад}$ = 2062 K, т. е. выше температуры плавления титана, и механохимическая реакция идет с участием жидкой фазы, как и в стехиометрической смеси. При x = 70 мас. % $T_{ад}$ = 1568 K, т. е. ниже температуры плавления титана, поэтому реализуется твердофазное взаимодействие. В обоих случаях механохимически *in situ* формируется металломатричный механокомпозит Ti/TiC, индукционный период реакции составляет около 4 мин, процесс завершается к 8 мин механической активации. Появление фазы жидкого титана влияет на повышение скорости формирования карбида, что приводит к бóльшей дисперсности частиц. В смеси с 50 мас. % Ti после 2 мин механической активации образуется незначительное количество разупорядоченного карбида титана $TiC_{0.47}$, после 4 мин активации соотношение C/Ti в карбиде повышается – $TiC_{0.52}$ (*L* = 8 нм), и кроме того, образуется αTi(C) (*L*=13 нм). При 70 мас. % Ti после 2 мин активации в смеси присутствует единственная фаза пересыщенного твердого раствора αTi(C) (*L* = 14 нм), после 4 мин активации – 11 мас. % $TiC_{0.47}$ (*L* = 4 нм) и 89 мас. % Ti(C) (*L* = 13 нм). После 8 мин активации фазовый состав продуктов механохимического синтеза близок к ожидаемому: 56Ti(C)/43$TiC_{0.47}$ и 72Ti(C)/28$TiC_{0.47}$.

Список литературы

[1] Lyakhov N., Grigoreva T., Šepelák V., Tolochko B., Ancharov A., Vosmerikov S., Devyatkina E., Udalova T., Petrova S. Rapid mechanochemical synthesis of titanium and hafnium carbides. J. Mater. Sci. 2018. V. 53. Is. 19. P. 13584–13591.

ПБ-14

СТРУКТУРА И ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ *in situ* МЕХАНОСИНТЕЗИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ TiC/30Cu

Ковалева С.А.[1], Григорьева Т.Ф.[2], Жорник В.И.[1], Веремей И.С.[1,3], Девяткина Е.Т.[2], Восмериков С.В.[2]

[1]Объединенный институт машиностроения НАН Беларуси, Минск, Беларусь
[2]Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия
[3]Университет Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
svetakov2021@gmail.com

Композиционные металломатричные материалы на основе меди, армированные частицами карбида титана, интенсивно разрабатываются для применения в качестве электротехнических материалов с высокой стойкостью к электроэрозии, теплоотводящих материалов с высокой механической прочностью для работ в условиях высокотемпературного динамического потока. В данной работе использовали механохимический подход к синтезу композитов в реакционных смесях 30Cu-(Ti-C), обеспечивающему *in situ* формирование упрочняющих частиц TiC непосредственно в металлической матрице. Одной из задач при таком подходе является определение оптимальных режимов синтеза продукта, обеспечивающих формирование порошков заданной структуры и свойств. Цель данной работы – исследование влияния длительности механической активации (МА) на структуру и термическую устойчивость композитов TiC/30Cu методами рентгеноструктурного анализа (РСА) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

Механохимический синтез проведен в планетарной шаровой мельнице АГО-2 в атмосфере аргона с длительностью 8, 12 и 20 мин МА. В реакционной смеси Ti + 6%C(сажа) + 30%Cu с оцениваемой адиабатической температурой 2868 К реализуется механостимулированная реакция горения с образованием карбида титана, которая, согласно данным РСА, заканчивается уже после 8 мин МА. Формируется композит состава твердый раствор на основе меди (Cu) (a_{Cu} = 0.3626 нм), содержащий до 87 мас. % TiC. Рентгенографически определяемое количество фазы (Cu) ~12 масс. %, что значительно меньше ожидаемого (30 %). Однако с увеличением длительности до 20 мин МА количество (Cu) увеличивается до 28 %. Происходит фрагментация компонентов фаз TiC и (Cu) до размеров кристаллитов *L* = 11 и 5 нм соответственно, параметр решётки карбида варьируется в интервале значений 0.4331 – 0.4327 нм.

По данным ДСК композит после 8 мин еще содержит не прореагировавшие компоненты титана и углерода, реакции которых при первом нагреве сопровождаются потерей массы и экзотермическими эффектами при T = 328 °C и T = 382 °C. Количество фаз меди и ее твердого раствора увеличивается до 29 мас. %. При T = 938 °C начинает разлагаться карбид, параметр его решётки снижается до a_{TiC} = 0.4316 нм и соответствует стехиометрии $TiC_{0.63}$. Основной структурный вклад, который оказывает увеличение длительности с 8 до 20 мин МА, заключается в активации диффузионных процессов, что проявляется в увеличении доли формируемого твердого раствора меди и повышении его термической устойчивости к распаду, регистрируемых при повторном нагреве (рисунок б). Образование однофазного (Cu) (a_{Cu} = 0.3622 нм) регистрируется ДСК для композитов после 20 мин МХС, а устойчивость карбида к разложению повышается до T = 961 °C. Вероятно наличие интерметаллидов CuTi.

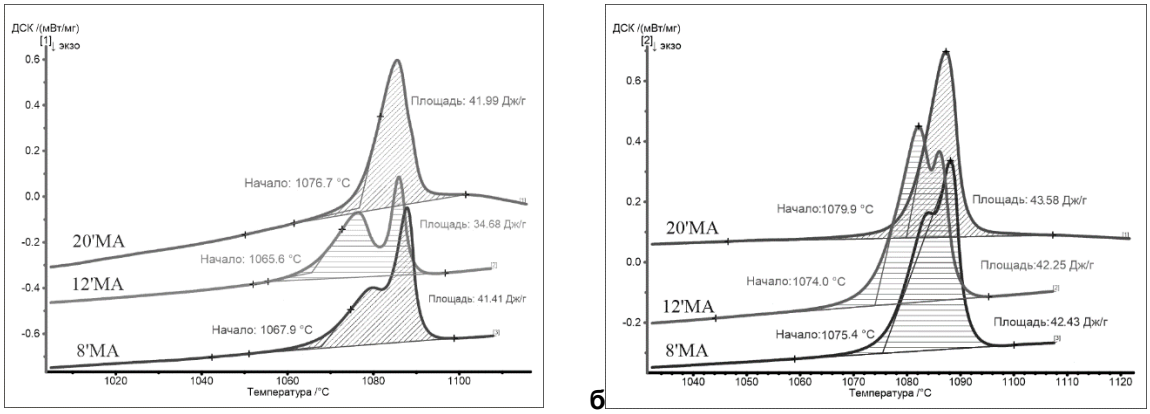


Рисунок. ДСК порошков механосинтезированных in situ композитов TiC/30Cu (в среде аргона, скорость нагрева 10 град/мин): а - первый нагрев, б - второй нагрев

При кристаллизации из расплава после двукратного нагрева до T = 1100 °C размер кристаллитов (Cu) в композите после 20 мин МА увеличивается до 102 нм. Карбид титана образуется в двух соотношениях $TiC_{0.9}$ и $TiC_{0.47}$, размер его кристаллитов увеличивается от 11 до 37 нм. Количество определяемого железа (намола) после нагрева составляет 3, 5 и 9 масс. % при 8, 12 и 20 мин МА соответственно, и обусловлено высокой абразивной способностью карбида.

Результаты работы могут быть использованы для анализа технологических процессов производства металломатричных композиционных материалов.

ПБ-15

СРАВНЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КАВИТАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ В ГИДРОДИНАМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ И АППАРАТЕ ВИХРЕВОГО СЛОЯ

Королев А.Н., Николаев А.И., Пешнев Б.В., Антонюк С.Н.

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия,
waterpolist2000@yandex.ru

В последнее время для интенсификации протекания химико-технологических процессов используют такое явление как кавитация [1,2]. В качестве реакционных устройств для этого могут быть использованы реакционные устройства, в которых реализуется гидродинамическое движение сырьевого потока или аппараты вихревого слоя (АВС). Следует отметить, что применение кавитации в технологических процессах для их интенсификации относительно новое направление, которое требует проведения исследований по изучению влияния параметров процесса на изменение характеристик сырья и сравнительного анализа результатов обработки сырья, проведенного в различных реакционных устройствах, для определения наиболее перспективного. Последнее является целью данной работы.

Объектом исследования была выбрана прямогонная бензиновая фракция (БФ) нефти (предоставлена Газпром-МНПЗ). Выбор объекта обусловлен тем, что бензиновая фракция выступает в качестве сырья таких крупнотоннажных производств как пиролиз, изомеризация и риформинг.

Обработку БФ проводили в АВС и аппарате марки ДОНОР-2. Последний моделирует гидродинамическое движение потока. Обработку в АВС осуществляли при загрузке в аппарат БФ в количестве 200 мл с добавлением 10%об. ферромагнитных элементов в течении 6 минут (циклов). Гидродинамическую кавитацию в аппарате ДОНОР-2 осуществляли при давлении 40 МПа и 5 циклах обработки. Выбор условий основан на проведенных ранее исследованиях [3,4] показавших, что при этих условиях обработки изменения характеристик БФ и ее углеводородного состава наибольшие.

Анализ характеристик БФ, а именно плотность, показатель преломления и фракционный состав определялись по методикам отраженными в соответствующей нормативно-технической документации (ГОСТ).

Результаты представлены в таблице.

Таблица 1. Характеристики исходной и обработанной БФ

Параметр/сырье	Исходная БФ	Гидродинамическая кавитация	Кавитация в АВС
Плотность, г/см^3	0,7301	0,7272	0,7284
Показатель преломления	1,4118	1,4077	1,4090
Фракционный состав: Начало кипения °С 10% отгона °С 50% отгона °С 90% отгона °С Конец кипения °С	 87,2 95,0 111,1 145,0 159,3	 77,2 88,7 101,1 155,0 169,3	 82,2 90,0 106,1 148,0 164,0

Видно, что в результате обработки значение характеристик снижается. Полученные результат может быть объяснены тем, что при кавитации, не зависимо от используемого реакционного устройства, протекают реакции разложения углеводородов, в результате которых образуются углеводороды с меньшей молекулярной массой по сравнению с исходными. Стоит так же отметить, что при проведении обработки с использованием аппарата ДОНОР-2 (при выбранных условиях обработки БФ) наблюдается более сильное снижение значений характеристик, т.е. более интенсивное протекание кавитации.

Список литературы

[1] Курносов Н.Е., Лебединский К.В., Николотов А.А., Алексеев Д.П. Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе. 2014. № 4(12). С. 112-123.

[2] Терентьева В.Б., Пешнев Б.В., Николаев А.И. Тонкие хим. технологии. 2021. № 5. С. 390-398.

[3] Николаев А.И., Пешнев Б.В., Алхамеди М.Х.И., Королев А.Н. Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2023. Т.88. №66. С. 99-105.

[4] Антонюк С.Н., Торховский В.Н., Дворецков П.А., Юсупова Д.В., Голованов А.Б. Проблемы науки. Химия, химическая технология и экология. Тула, 2022. С. 254-259.

ПБ-16

СРАВНЕНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ Cu/Cr_2O_4 И МЕДНЫХ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ ГИДРОГЕНОЛИЗА ГЛИЦЕРИНА

Лаврентьев В.А., Порукова Ю.И., Самойлов В.О., Максимов А.Л.

Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, Москва, Россия, lavrentev@ips.ac.ru

Переработка биомассы в топливо и химические продукты представляет собой стратегически важное решение для снижения экологической нагрузки и уменьшения зависимости от ископаемых ресурсов. Особый интерес в этом контексте вызывает использование биоглицерина – побочного продукта производства биодизеля, образующегося в объёме около 1 тонны на каждые 10 тонн биотоплива. Его доступность и низкая стоимость делают биоглицерин перспективным сырьём для синтеза экологически безопасных соединений.

Одним из ключевых процессов переработки глицерина является каталитический гидрогенолиз, позволяющий получать ценные продукты, такие как 1,2-пропандиол и н-пропанол. Н-пропанол находит применение не только в качестве компонента антифризов, тормозных жидкостей и косметических эмульсий, но и как оксигенатная добавка к моторным топливам.

Основной задачей в превращении глицерина в пропиленгликоль и далее в пропанол является совмещение кислотной (для дегидратации) и редокс-активной (для гидрирования карбонильных интермедиатов) функций в едином катализаторе. Такие системы значительно повышают эффективность гидрогенолиза глицерина, минимизируя побочные реакции и улучшая селективность целевых продуктов, что подтверждается исследованиями [1,2].

Несмотря на то что катализаторы на основе благородных металлов (Pt, Pd, Ru) демонстрируют высокую активность в гидрогенолизе глицерина, их применение ограничено из-за дороговизны и низкой селективности [3]. Однако медные катализаторы в реакции гидрогенолиза глицерина имеют высокую селективность, значительно дешевле благородных металлов, устойчива к дезактивации, а её активность и селективность можно регулировать за счёт введения промоторов. Особый интерес представляют бифункциональные системы на основе алюмосиликатов (в данной работа 15%-Cu/Al-HMS и 15%-Cu/BEA-38), так как такие носители позволяют производить настройку

кислотности катализатора (за счёт изменения соотношения Al/Si), оптимизацию пористой структуры и регенерацию катализатора без потери активности благодаря термической стабильности.

Проведенные эксперименты в проточном реакторе с неподвижным слоем катализатора подтвердили высокую эффективность медь/алюмосиликатных систем (15%-Cu/Al-HMS) в конверсии глицерина в низшие спирты. Интенсификация процесса за счет повышения давления до 8 МПа, температуры до 280 °C, кратности водорода к сырью до 1000 нм³/м³ и снижения объёмной скорости подачи сырья до 0,5 $ч^{-1}$ привела к значительному росту конверсии глицерина и увеличению выхода целевых продуктов. Сравнение с катализатором Cu/Cr_2O_4 выявило превосходство 15%-Cu/Al-HMS: выход пропиловых спиртов достиг 68 % мол., что в 8 раз выше, чем у Cu/Cr_2O_4 (8,6 % мол.).

Повышенная активность 15%-Cu/Al-HMS обусловлена синергизмом функциональных центров и структурными преимуществами носителя. Кислотные центры алюмосиликата катализируют дегидратацию глицерина в ацетол, а нанесенная медь обеспечивает их селективное гидрирование в пропиловые спирты, минимизируя побочный гидрогенолиз связей C–C.

Список литературы

[1] Zhu S., Qiu Y., Zhu Y., Hao S., Zheng H., Li Y. Hydrogenolysis of glycerol to 1,3-propanediol over bifunctional catalysts containing Pt and heteropolyacids // Catal Today. 2013. V. 212. P. 120–126. DOI: 10.1016/j.cattod.2012.09.011.

[2] Greish A.A., Finashina E.D., Tkachenko O.P., Kustov L.M. Preparation of Propanols by Glycerol Hydrogenolysis over Bifunctional Nickel-Containing Catalysts // Molecules. 2021. V. 26. N 6. P. 1565. DOI: 10.3390/molecules26061565.

[3] Zhao H., Zheng L., Li X., Chen P., Hou Z. Hydrogenolysis of glycerol to 1,2-propanediol over Cu-based catalysts: A short review // Catal Today. 2020. V. 355. P. 84–95. DOI: 10.1016/j.cattod.2019.03.011.

ПБ-17

ЦЕНТРОБЕЖНЫЙ МАССООБМЕННЫЙ АППАРАТ В ПРОИЗВОДСТВЕ ПРИСАДКИ К ДИЗЕЛЬНОМУ ТОПЛИВУ

Лайлов С.В.[1], **Василишин М.С.**[1,2], **Карпов А.Г.**[2], **Иванов О.С.**[2]

[1]АО «ФНПЦ «Алтай», Бийск, Россия, E–mail: lailovsv@frpc-altay.ru
[2]ФГБУН Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, Бийск, Россия
E–mail: lailovsv@frpc-altay.ru

Важнейшим показателем качества дизельных топлив является цетановое число, значение которого у топлив экологического класса «ЕВРО–5» должно быть не менее 51 единицы. Это достигается, в том числе, применением специальных цетаноповышающих присадок. К их числу относятся нитраты спиртов, в том числе 2–этилгексилнитрат (2–ЭГН), производимый в РФ под торговой маркой «Экоцетан».

Основной технологической стадией получения 2–ЭГН является нитрование спирта 2–этилгексанола (2–ЭГ) смесью азотной и серной кислот с последующей промывкой целевого продукта водой и раствором щёлочи до нейтральной реакции. В условиях промышленного производства процесс реализован по периодической технологии с применением крупногабаритной аппаратуры с перемешивающими устройствами и характеризуется значительной длительностью (1,5–2,0 ч). В связи с низкой химической стабильностью реакционной массы, к его аппаратурному оформлению предъявляются специфические требования по загрузке взрывоопасным веществом при одновременном создании условий для интенсивного перемешивания реагентов и оптимального времени их пребывания в рабочей камере аппарата.

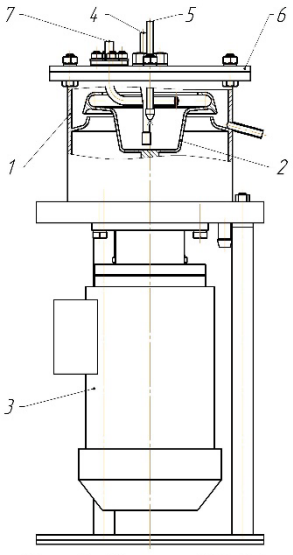


Рис.1-Схема ЦМА

Нами исследован процесс получения 2–ЭГН [1] в установке с центробежным массообменным аппаратом (ЦМА). Устройство аппарата поясняет рис. 1.

В корпусе 1 аппарата помещён комбинированный вертикальный ротор 2 с приводом от электродвигателя переменного тока 3. Подача реагентов во внутреннюю полость ротора производится через патрубок 4 и центробежную форсунку 5, закреплённые на крышке 6 корпуса аппарата. Для вывода реакционной массы предусмотрена трубка 7, заборный конец которой вводится

в тороидальную часть ротора. мощность электродвигателя привода – 0,5кВт; частота вращения ротора – 0…50с$^{-1}$.

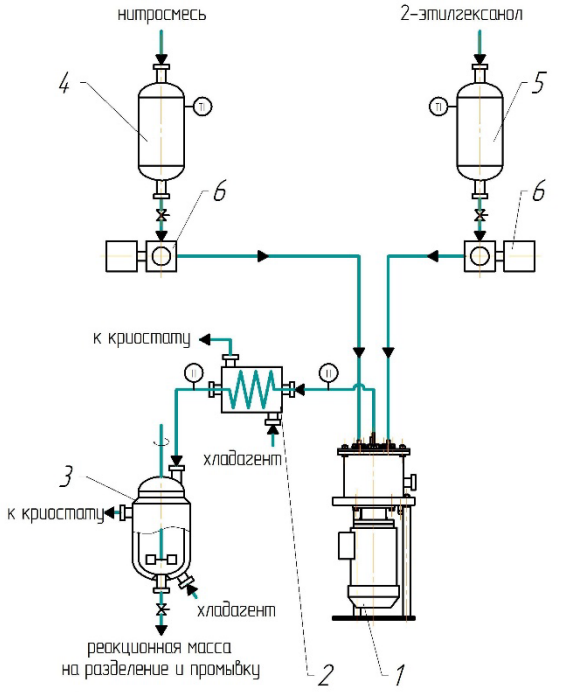


Рис.2-Схема установки с ЦМА

Схему установки и принцип её работы поясняет рис. 2. Нитросмесь и 2–ЭГ в заданном соотношении подаются в ЦМА 1 из емкостей 4 и 5 при помощи перистальтических насосов 6. Нитросмесь образует на внутренней поверхности ротора аппарата вращающуюся плёнку, в которую диспергируется спирт. Реакционная масса через заборную трубку под давлением выводится из ЦМА и, далее, поступает в змеевиковый теплообменник 2. Гидродинамический режим, реализуемый в теплообменнике, близок к идеальному вытеснению, что обеспечивает полноту химического превращения и отвод основного количества выделяющегося в процессе тепла. Далее, реакционная масса из аппарата 3 с перемешивающим устройством направляется на отделение отработанной кислоты и промывку 2–ЭГН.

Процесс нитрования непрерывен, отличается устойчивостью тепловых и гидродинамических режимов [2,3], при этом температура реакционной массы находилась в диапазоне от 16 до 20 °С. Выход 2–ЭГН составлял 90–92 % при чистоте продукта 99,5 %. Фиксированная производительность установки по 2–ЭГН составила 5,2 кг/ч. Результаты исследования свидетельствуют о перспективности применения ЦМА в производстве цетаноповышающей присадки.

Список литературы

[1] Василишин М.С., Кухленко А.А., Орлов С.Е., Иванов О.С., Иванова Д.Б., Карпов А.Г., Лайлов С.В., Ляпина Е.А., Григоренко А.П. Получение 2–этилгексилнитрата в установке с центробежным массобменным аппаратом // Химическое и нефтегазовое машиностроение.–2019.–№12.–с.3–6.

[2] Карпов А.Г., Василишин М.С., Иванов О.С., Кухленко А.А., Орлов С.Е., Овчаренко А.Г. К оценке устойчивости тепловых режимов нитрования 2–этилгексанола // Химическое и нефтегазовое машиностроение.–2022.–№3.–с.3–5.

[3] Карпов А.Г., Василишин М.С., Кухленко А.А., Иванов О.С., Иванова Д.Б., Орлов С.Е, Лайлов С.В., Беляев В.Н., Григоренко А.П. О влиянии температуры на процесс нитрования 2–этилгексанола в установке с центробежным массообменным аппаратом // Химическое и нефтегазовое машиностроение.–2020.–№11.–с.12–14.

ПБ-18

ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ ДЕГИДРИРОВАНИЕ ЭТИЛБЕНЗОЛА В СТИРОЛ В ПРИСУТСТВИИ CO_2 НА КАТАЛИЗАТОРАХ 1%ZrO_2, 2%MgO/Al_2O_3

Мамедова М.Т., Абасов С.И., Искендерова А.А., Зарбалиев Р.Р., Сулейманова Т.И., Насибова А.Р.

Институт Нефтехимических Процессов им. Акад. Ю.Г. Мамедалиева Министерство Науки и Образования Азербайджанской Республики, Баку, Азербайджан, memmedova-melahet@mail.ru

Стирол является важным мономером для синтеза полимерных материалов на его основе, производство которых неуклонно возрастает. Основным промышленным процессом производства стирола (Ст) является непосредственное, энергозатратное дегидрирование этилбензола (ЭБ). Уменьшение затрат на производство Ст возможен посредством перевода процесса с прямого дегидрирования ЭБ на окислительное с использованием в качестве окислителя CO_2. В настоящее время в этом направлении ведутся интенсивные исследования. Главной задачей здесь является синтез катализаторов, способных осуществлять процесс с высокой селективностью. Исходя из этих позиций, в настоящей работе синтезирован комплексный катализатор на основе ZrO_2, MgO, CuO, H_3PO_4 и Al_2O_3 и изучена его активность в реакции окислительного дегидрирования ЭБ в стирол в присутствии CO_2. Процесс изучался в проточной лабораторной установке.

Результаты исследования конверсии ЭБ в стирол на цирконий-магний-алюминийоксидных катализаторах в присутствии CO_2 показали, что конверсия ЭБ в Ст на этих катализаторах существенно зависит от соотношения CO_2:ЭБ (моль/моль) (рис. 1). При увеличении этого соотношения до 4-5 на 1.0%ZrO_2, 2.0%MgO/Al_2O_3 конверсия ЭБ возрастает до 53-54 %, а селективность по Ст достигает 94 %. На катализаторе 1.0%ZrO_2, 2.0%MgO/Al_2O_3 + 5%P_2O_5 в рамках соотношения ЭБ: CO_2 = 1: 5 (моль/моль) конверсия ЭБ увеличивается в 2.5 раза по сравнению с традиционным дегидрированием, а выход Ст достигает 46 %. Дальнейшее увеличение соотношения ЭБ:CO_2 с 5 до 10 не оказывает существенного влияния на конверсию ЭБ и выход Ст. Модификация ортофосфорной кислотой не оказывает существенного влияния на конверсию и селективность ЭБ (конверсия снижается на 3-4 %, а селективность снижается на 2 %) (рис. 1), а также повышает стабильность катализатора.

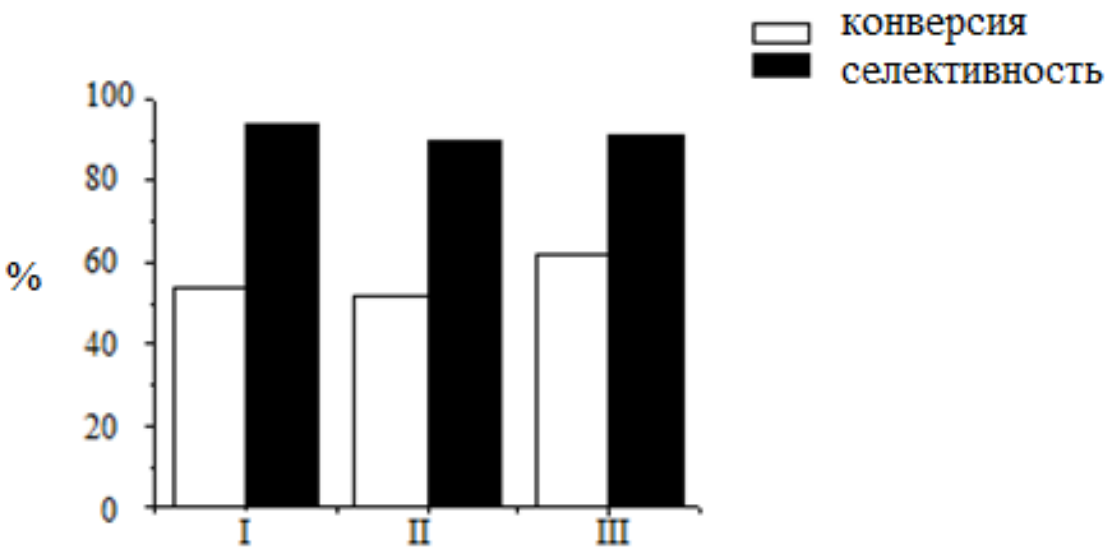


Рис. 1. Превращение ЭБ в стирол в присутствии CO_2 на цирконий-магний-алюминийоксидных катализаторах

Т = 500 °С; объёмная скорость ЭБ = 1 $ч^{-1}$, объёмная скорость CO_2 = 500 $ч^{-1}$; CO_2:ЕВ = 5:1 (моль/моль), τ = 2 ч.

I – 1.0%ZrO_2, 2.0%MgO/Al_2O_3;

II – 1.0%ZrO_2, 2.0%MgO/Al_2O_3 + 5.0%P_2O_5;

III – 1.0%ZrO_2, 2.0%MgO/Al_2O_3 + 5.0% P_2O_5 + 1%CuO

Промотирование катализатора 1.0%ZrO_2, 2.0%MgO/Al_2O_3, обработанного ортофосфорной кислотой с CuO, приводит к дальнейшему увеличению конверсии ЭБ, активность катализатора в конверсии ЭБ достигает 62 %, но при этом селективность по Ст несколько снижается до 91 % (рис. 1).

Таким образом, синтезированный композиционный катализатор позволяет осуществлять конверсию этилбензола в стирол с высокой селективностью в присутствии CO_2. Это, в свою очередь, свидетельствует о возможности предотвращения выбросов CO_2 в атмосферу и вовлечения его в процесс получения ценной промышленной продукции.

ПБ-19

ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМА РАБОТЫ РЕАКТОРНО-РЕГЕНЕРАТОРНОГО БЛОКА ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА В УСЛОВИЯХ РАСШИРЕНИЯ РЕСУРСОВ СЫРЬЯ

Назарова Г.Ю., Самсонов И.А., Ивашкина Е.Н., Антонов А.В.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия, E-mail: silko@tpu.ru

На сегодняшний день задачи разработки цифровых инструментов для комплексного обследования технологических установок нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности, базирующиеся на кинетико-термодинамическом моделировании, LP-моделях, онлайн-оптимизаторах др. приобретают еще большую актуальность и значимость.

Согласно данным с промышленного предприятия загрузка установки каталитического крекинга по сырью составляет менее 76 % (1824 тыс. т/год) от максимальной (2400 тыс. т/год). В условиях ограниченной загрузки каталитического крекинга после ввода в эксплуатацию комплекса глубокой переработки нефти возникает задача поиска и обоснования дополнительных источников сырья, способных обеспечить стабильный температурный режим и сохранить высокую маржинальность производства. Кроме того, актуальность оптимизации режима работы реакторно-регенераторного блока процесса с непрерывной циркуляцией катализатора при вовлечении в переработку фракций с других технологических объектов НПЗ обусловлена широким внедрением крупнотоннажной технологии каталитического крекинга с в России (21 установка) и мире (720 установок), мощность которых составляет от 500 до 2500 тыс. т/год.

Целью является оптимизация режима работы установки каталитического крекинга в условиях расширения ресурсов сырья с использованием математической модели сопряженной системы «реактор-регенератор», разработанной в Томском политехническом университете.

С учётом расходных характеристик потоков, доступных на установках НПЗ, были предложены два варианта композиционного сырья для загрузки установки каталитического крекинга до уровня максимальной производительности (таблица 1).

Таблица 1. Характеристика сырья

Характеристика		Вакуумный газойль	Тяжелый газойльУЗК	Остаток гидрокрекинга	Масляный дистиллят
Доля потока		0,76	0,108	0,0083	0,123
Насыщенные УВ		65,1	71,5	96,89	68,6
Легкая ароматика		9	3,6	3,02	8,4
Тяжелая ароматика		16	14,1	0	14,7
Смолы		9,9	10,8	0,09	8,3
Сырье №1	Расход, кг/ч	208219,18	-	-	-
Сырье №2	Расход, кг/ч	208219,18	-	-	63743,02
Сырье №3	Расход, кг/ч	208219,18	29566,21	2283,11	33904,11

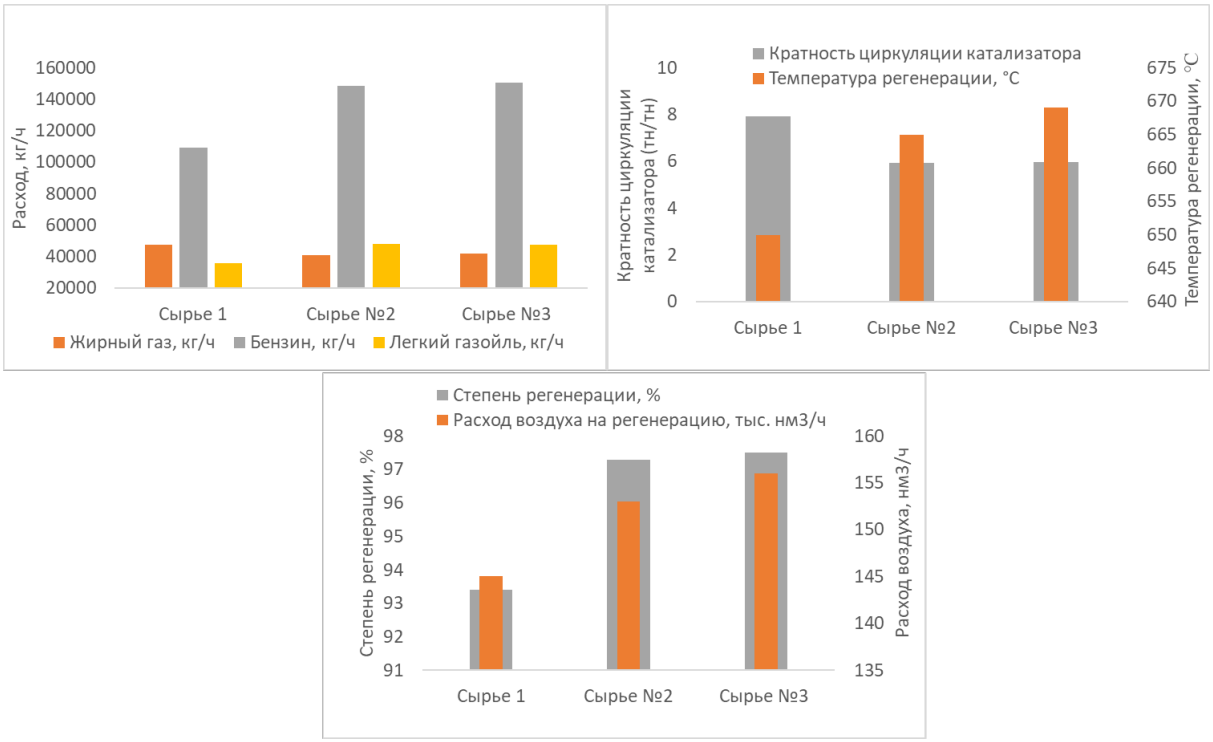


Рисунок 1. Результаты оптимизационных расчетов

Разработанная модель сопряженной системы реакторно-регенераторного блока процесса каталитического крекинга, базирующаяся на расширенной реакционной схеме, учитывающей длину цепи углеводородов, их разветвленность и степень цикличности, обеспечивает возможность проведения прогнозных и оптимизационных расчетов при вовлечении в переработку широкого спектра нефтяных фракций.

ПБ-20

ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ГАЗОВОГО БЕНЗИНА И ЕГО СМЕСИ С ПОПУТНЫМИ ГАЗАМИ В ВЫСОКООКТАНОВЫЕ КОМПОНЕНТЫ БЕНЗИНА

Мамедова М.Т., Исаева Е.С., Иманова А.А., Насирова Ф.М., Челебова К.С.

Институт Нефтехимических Процессов им. Акад. Ю.Г. Мамедалиева Министерство Науки и Образования Азербайджанской Республики, Баку, Азербайджан, memmedova-melahet@mail.ru

Растущий спрос на количество и качество бензина делает актуальным привлечение новых источников сырья для его производства. Учитывая это требование, в представленной работе исследована возможность получения высокооктановых компонентов бензина из газового бензина и попутных газов. С этой целью был синтезирован катализатор на основе модифицированного металлическим кобальтом цеолита HZSM-5 и сульфатированным диоксидом циркония (0.4%Co/HZSM-5/10%ZrO_2/2%SO_4^{2-} – K-2) и на нем изучены процессы изомеризационного превращения газового бензина (ГБ) и его смеси с пропан-бутановой фракцией.

Из полученных данных можно по изменению состава ГБ выделить два температурных диапазона: 140-180 °C и 200-250 °C (табл. 1). В первом диапазоне температур происходит интенсивное накопление изомеров C_5-C_6 и потребление компонентов C_{4-}-C_{7+}. Это свидетельствует о том, что в интервале температур 140-180 °C преобладает один из двух основных путей превращения в системе образующихся интермедиатов - гидроизомеризация.

Во второй области температур происходит заметное снижение конверсии как C_{4-}, так и C_{7+} и происходит накопление изо-C_7. Появление в продуктах углеводородов C_1-C_2 свидетельствует о преобладании гидрокрекинга в интервале температур 200-250 °C. Синхронное изменение C_{4-} и C_{7+} указывает на их совместное участие в образовании интермедиатов, предшествующих выходу продуктов превращения ГБ.

Принимая во внимание вступление в процесс образования C_5-C_6 парафинов при превращении ГБ C_{4-} алканов, для решения проблемы увеличения сырьевых источников C_5-C_6 можно исследовать возможность использовать вовлечение в процесс получения топлива (бензина) попутных нефтянных газов.

Таблица 1. Температурная зависимость превращении ГБ на К-2. H_2/CH = 1 : 3, объёмная скорость = 2 $ч^{-1}$

Т, °С	$\sum C_{4-}$	и-C_5	C_5	и-C_6	C_6	и-C_7	$\sum C_{7+}$
	Состав сырья, %						
	5.5	**25.2**	**19.2**	**18**	**8.4**	**5.4**	**18**
	Состав катализата, %						
140	4.5	28	20.3	20.2	6.3	4.2	16.5
160	1.8	34	24.4	21.6	2.8	3.6	11.8
180	1.0	37.5	26	22.6	2.6	4.5	5.8
200	0.4	26.6	32.2	19.8	2.7	7.9	10.4
220	1.0	26	31.0	19.4	1.5	9.0	12.2
250	2.0	25.4	27	20.0	2.0	10	14.0

Полученные результаты (табл. 2) показывают, что даже при температуре 160 °С наблюдается интенсивное изменение состава смеси ГБ : ПБФ (1:1). ПБФ подвергается интенсивному расходу с полным поглощением C_{4-} компонентов. При этом наблюдается расход до 50 % высокомолекулярных компонентов ГБ. В продуктах превращения смеси до 27 % возрастает содержание изомерных компонентов изо-C_5 - изо-C_6, а количество н-C_5 увеличивается 2 раза.

Таблица 2. Влияние температуры на конверсию смеси газового бензина с пропан-бутановой фракцией (1:1). К-2; объёмная скорость ГБ = 2 $ч^{-1}$, объёмная скорость ПБФ = 500 $ч^{-1}$

Т, °С	C_2	C_3	iC_4	C_4	iC_5	C_5	iC_6	C_6	iC_7	C_{7+}
	Состав исходного сырья (ГБ : ПБФ = 1 : 1), масс.%									
	5	17	9.9	16.7	15	12.3	8.1	3.7	2.4	9
	Состав катализата, масс.%									
160	-	-	-	8.8	24.3	25.8	25.6	3	8	4.5
180	-	-	-	5.4	26.2	27.2	27.6	2.0	9.2	2.4
200	-	-	-	3.5	24	21.2	23.5	1.8	12.5	13.5

Таким образом, синтезированный катализатор позволяет перерабатывать газовый бензин и его смесь с попутными газами в высокооктановые, экологически чистые компоненты бензина.

ПБ-21

CFD-ОПТИМИЗАЦИЯ ФОРМЫ ГРАНУЛ КАТАЛИЗАТОРА В ЗАЩИТНОМ СЛОЕ РЕАКТОРА ГИДРООЧИСТКИ

Мик И.А., Кленов О.П., Дик П.П., Голубев И.С., Петров Р.В., Решетников С.И., Носков А.С.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
mikluha.ia@gmail.com

В данной работе были проведены расчеты влияния формы гранул (катализатора защитного слоя) на распределение потока в реакторе гидроочистки дизельного топлива (ДТ). Для моделирования использовалась трехмерная CFD-модель, разрешенная с применением параллельных вычислений, что позволило эффективно обработать большие объемы данных и повысить точность расчетов. В ходе исследования были определены ключевые гидродинамические параметры двухфазного потока газ-жидкость, включая перепад давления, линейную скорость фаз, а также другие важные характеристики, влияющие на эффективность процессов гидроочистки [1, 2]. Расчеты проводились с использованием численных методов, решающих уравнения Навье-Стокса, что позволило точно смоделировать течение двухфазного потока через фрагменты упаковки катализатора защитного слоя. Для выполнения данных расчетов использовался один из передовых пакетов программ вычислительной гидродинамики (ANSYS Fluent), что обеспечило высокую точность и достоверность результатов. В рамках работы был исследован ряд различных конфигураций загрузки катализатора защитного слоя с учетом изменения размера отверстий в гранулах катализатора, что оказывало значительное влияние на характер потока в реакторе [3]. На основе полученных CFD данных был предложен критерий для оценки качества распределения потока в насыпных слоях катализатора. Этот критерий основывается на показателе рассеивания объемной доли жидкой фазы (среднеквадратическом отклонении).

Результаты моделирования позволили выявить оптимальный размер отверстия в грануле катализатора, который обеспечивает наиболее эффективное распределение нефтяных фракций по сечению промышленного реактора гидроочистки ДТ. Более того, в ходе работы были получены данные о перепаде давления на загрузке катализатора защитного слоя в зависимости от

геометрии гранул, что является важным параметром для обеспечения стабильности и эффективности процесса. Также было установлено, что геометрия гранул существенно влияет на перепад давления в защитном слое: увеличение размера отверстий снижает гидравлическое сопротивление, но может негативно сказаться на равномерности распределения потока. То есть, выбор формы гранул является «компромиссом» между минимизацией гидравлических потерь и обеспечением равномерного распределения фаз.

Осуществленные исследования продемонстрировали критическую важность выбора формы катализаторов защитного слоя, поскольку равномерное распределение двухфазного потока оказывает существенное влияние на производительность промышленного реактора. Например, неравномерное распределение потока может привести к низкому уровню контакта реагентов с активными поверхностями катализатора и локальным перегревам, что приводит к снижению активности катализатора и, как следствие, ухудшению качества целевого продукта. Полученные научные выводы и методологические подходы, разработанные в ходе исследования, имеют широкое применение и могут быть успешно использованы для оптимизации состава и структуры сорбционно-каталитических материалов в различных технологических процессах. В частности, они применимы в нефтеперерабатывающей отрасли для процессов гидроочистки ДТ и гидрокрекинга вакуумного газойля, а также в химической технологии для проектирования трехфазных каталитических реакторов. Таким образом, проведенная CFD-оптимизация формы гранул катализатора защитного слоя представляет собой важный шаг к повышению эффективности и надежности промышленных процессов гидроочистки, обеспечивая сбалансированное распределение потоков и снижение гидравлических потерь в реакторе.

Список литературы

[1] Jurtz N., Kraume M., Wehinger G.D. Advances in fixed-bed reactor modeling using particle-resolved computational fluid dynamics (CFD) // Reviews in Chemical Engineering. 2018. Т. 35, № 2. С. 139-190.

[2] Klenov O.P., Noskov A.S. Influence of input conditions on the flow distribution in trickle bedreactors // Chemical Engineering Journal. 2020. Т. 382. С. 1-9.

[3] Macías M.J., Ancheyta J. Simulation of an isothermal hydrodesulfurization small reactor with different catalyst particle shapes // Catalysis Today. 2004. Т. 98, № 1-2. С. 243-252.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта No 23-19-00214.

ПБ-22

ФАКТОРЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ПОЛНОТУ СЖИГАНИЯ НИЗКОСОРТНОГО ТОПЛИВА

Мырзалиева С.К., Акильбекова Ш.К., Даулетбай А.Д.

РГП «Национальный Центр по комплексной переработке минерального сырья Республики Казахстан», Алматы, Республика Казахстан
saulekerchaiz@mail.ru
cadikova74@mail.ru
dauletbai-aizhan@mail.ru

В настоящее время все маломощные источники тепловой энергии имеют низкий коэффициент полезного действия, в них не используются новые технологии сжигания твердого топлива. В силу этого необходимо использовать экологически и экономически целесообразные инновационные технологии сжигания углей.

Перспективы использования твёрдого топлива, для энергоблоков, во многом зависят от возможности эффективно сжигать его. При этом есть два основных требования: сжигание должно быть полным, а значит, экономичным, и нужно, чтобы выбросы вредных веществ (в первую очередь оксидов азота и серы) были небольшими.

При сжигании низкосортных углей в топках образуется механический недожог, достигающий величины 45 %.

Непрерывный процесс горения имеет поточный характер. Этот поток разделяется на последовательные, подготовительные и основные стадии горения твердого топлива [1-2]:

1. подготовка топлива к вводу в топку (дробление, фракционирование) – стадия предназначена для лучшей организации огневого процесса в целях развития удельной суммарной поверхности, приходящейся на единицу объема топливно-воздушной смеси.

2. создание первичной гетерогенной топливно-воздушной смеси в слоевых топках – слой комкового топлива смешанных фракций, продуваемый воздухом.

3. газификация твердого топлива как последняя стадия измельчения до молекулярного состояния, т.е. до полной подготовки всей массы топлива к образованию с вторичным воздухом истинной (газообразной) горючей смеси и окончательному ее сгоранию.

4. образование истинной горючей смеси за счет продуктов газификации и вторичного воздуха, способной сразу вступить в окончательный, завершающий процесс горения. Названная зона наиболее высокотемпературная зона, даже если часть ее тепла отвлекается на наружные теплообменные процессы.

К дополнительным факторам, влияющим на длительность горения относятся [3-6]:

1. Калорийность угля и его характеристики – чем больше будет килокалорий в одном кг угля, тем больше тепловой энергии можно получить.
2. Фракция (размер) угля – чем крупнее будет уголь, тем выше коэффициент рыхлости загрузки, соответственно в камеру сгорания поместится значительно меньше угля, что приводит к сокращению времени горения на одной загрузке.
3. Удельный вес угля – разные марки угля имеют разный удельный вес соответственно в один и тот же объём можно загрузить разную массу.

Список литературы

[1] Каменецкий Б.Я. / Расчет теплообмена в топках котлов при слоевом сжигании топлива // Теплоэнергетика. 2008. № 5. С. 75-77.

[2] Каменецкий Б.Я. / Роль излучения слоя горящего топлива в топочном теплообмене // Тепломассообмен ММФ-92. Минск, 1992. Т. 2. С. 125–128.

[3] Волынкина Е.П., Пряничников Е.В. / Снижение выбросов загрязняющих веществ на угольных котельных со слоевой системой сжигания // Теплоэнергетика. 2002. № 2. С. 33-41. - 30 - Вестник Сибирского государственного индустриального университета № 2 (8), 2014.

[4] Характеристика продуктов сгорания выбрасываемых котельными в атмосферу. Энциклопедия теплоснабжения.

[5] Лейкин В.З./ Создание оборудования и отработка технологии подготовки топлива для сжигания и газификации в циркулирующем и стационарном кипящем слое // Теплоэнергетика. 2008. № 1. С. 71-80.

[6] Рябов Г.А., Фоломеев О.М., Шапошник Д.А. / Исследование систем улавливания и возврата золы на установках с циркулирующим кипящим слоем // Теплоэнергетика. 2002. № 8. С. 18-24.

ПБ-23

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРООЧИСТКИ ДИЗЕЛЬНОЙ ФРАКЦИИ С УЧЁТОМ ДИНАМИКИ ИЗМЕНЕНИЯ АКТИВНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА В РЕЗУЛЬТАТЕ СОРБЦИИ КРЕМНИЯ

Петров Р.В., Решетников С.И., Носков А.С.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук», Новосибирск, Россия
bic@catalysis.ru, petrov@catalysis.ru

Процесс гидроочистки дизельной фракции необходим для производства дизельного топлива, отвечающего современным требованиям по содержаниям различных компонентов и т.д. Одним из главных показателей является содержание серы, которая снижается до 10 ppm в продукте гидроочистки за счет протекания реакции гидрообессеривания. В течение периода эксплуатации активность катализатора снижается, что компенсируется увеличением температуры на входе в реактор. Причинами дезактивации являются образование коксовых отложений [1] и адсорбция каталитических ядов, например, кремния [2] на активных центрах, на которых протекает реакция гидрообессеривания. Динамика снижения активности катализатора зависит как от состава сырья и характеристик катализатора, так и от условий проведения процесса и определяет время эксплуатации катализатора.

Целью работы является разработка математической модели процесса гидроочистки дизельной фракции, учитывающей снижение активности катализатора за счет образования коксовых отложений и кремния.

Для описания изменения активности катализатора за счет образования коксовых отложений использовали схожую с предложенной в [1] формулу, отражающую влияние температуры через значение константы скорости и концентрацию веществ – предшественников коксовых отложений в зависимости от длины реактора и времени проведения процесса:

$$a_{\text{coke}}(z,t) = \exp\left(-k_{\text{d}}\left(T(z,t)\right)\cdot f\left(c(z,t)\right)\cdot t\right)$$

Динамика адсорбции кремния на активных центрах катализатора была рассмотрена ранее в [3], а для учета изменения активности в реакции гидрообессеривания использовали формулу:

$$a_{Si}(z,t) = \exp\left(-\frac{c_{Si}(z,t)}{c_{Si\text{-}max}}\right)$$

Для описания зависимости активности катализатора с учетом одновременного протекания независимых процессов образования коксовых отложений и адсорбции кремния использовали формулу:

$$a(z,t) = a_{coke}(z,t) \cdot a_{Si}(z,t)$$

Разработанная математическая модель процесса гидроочистки дизельной фракции позволяет рассчитывать содержание серы по слою катализатора при различных временах пробега с учетом дезактивации катализатора за счет образования коксовых отложений и адсорбции кремния. Модель может быть использована для расчета температуры, необходимой для достижения содержания серы 10 ppm в продукте гидроочистки, и расчета времени эксплуатации катализатора.

Список литературы

[1] Rodriguez E., Felix G., Ancheyta J., Trejo F. Modeling of hydrotreating catalyst deactivation for heavy oil hydrocarbons // Fuel. 2018. V. 225. P. 118–133.

[2] Chainet F., Lienemann C.P., Courtiade M., Ponthus J., Donard O.F.X. Silicon speciation by hyphenated techniques for environmental, biological and industrial issues: A review // Journal of Analytical Atomic Spectrometry. 2011. V. 26. P. 30–51.

[3] Golubev I.S., Dik P.P., Petrov R.V., Mik I.A., Bessonova N.V., Reshetnikov S.I., Noskov A.S. Dynamics of silicon sorption on the NiMo/Al_2O_3 guard bed catalyst during hydrotreating of diesel // Petroleum Chemistry. 2023. V. 63. P. 1203–1209.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта No 23-19-00214).

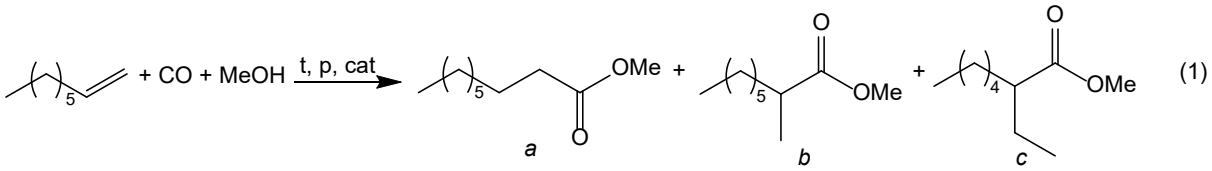
ПБ-24

ВЛИЯНИЕ ДИФОСФИНОВЫХ ПРОМОТОРОВ НА СКОРОСТЬ И СЕЛЕКТИВНОСТЬ МЕТОКСИКАРБОНИЛИРОВАНИЯ ОКТЕНА-1

Севостьянова Н.Т., Баташев С.А.

Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого, Тула, Россия, sevostyanova.nt@gmail.com

Алкоксикарбонилирование алкенов – одна из наиболее перспективных реакций зеленой химии. В промышленности реализуется синтез метилметакрилата по технологии Alpha компании Lucite, включающий стадию жидкофазного метоксикарбонилирования этилена в метилпропаноат [1, 2]. Эта реакция протекает с участием наиболее доступного алкена, не осложняется образованием изомерных сложных эфиров, а целевой продукт имеет низкую температуру кипения. Тем не менее, как показывает анализ работ последних десятилетий, интерес к алкоксикарбонилированию других алкенов не утихает [1, 2]. В частности, метоксикарбонилирование октена-1 приводит к образованию изомерных сложных эфиров (реакция (1)), среди которых наибольшую ценность представляет эфир *a* как полупродукт в фармацевтическом синтезе:



(1)

В алкоксикарбонилировании алкенов наиболее активны и селективны по линейным продуктам Pd-дифосфиновые каталитические системы, при использовании которых реакция может протекать в очень мягких условиях [1]. В данной работе в реакции (1), катализируемой системой $Pd(OAc)_2$ – п-толуолсульфокислота, были апробированы дифосфины (Рис.), проявившие высокую активность в модельной реакции метоксикарбонилирования циклогексена [3, 4]. Опыты проводили в среде толуола при 80 °С и P_{CO} = 2,1 МПа в реакторе из диамагнитной нержавеющей стали, снабженном магнитной мешалкой, пробоотборником и термопарой. Основной метод контроля – ГЖХ.

При варьировании концентрации дифосфинов и постоянстве прочих условий экспериментов реакция (1) протекала региоселективно по продукту *a*. Зависимости скорости образования продуктов *a, b, c* от концентрации дифосфинов проходили через максимумы при соотношении Pd:P=1:(1-4) (мол.).

При низких конверсиях октена-1 *n*-селективность достигала 86 %, в то время как в области конверсий 70–100 % *n*-селективность не превышала 80 %. Эти результаты можно объяснить в рамках гидридного механизма метоксикарбонилирования, протекающего с участием хелатных Pd-дифосфиновых комплексов и дополненного реакциями образования малоактивных многоядерных Pd-форм с дифосфиновыми мостиками и хелатных Pd-комплексов с двумя молекулами дифосфинов. Благодаря объемным дифосфиновым лигандам в каталитических комплексах карбонилирование связи C=C в молекуле октена-1 протекает главным образом по первому атому C. Наибольший выход продукта *a* был получен при использовании дифосфина 7, для которого ранее была установлена высокая активность в модельной реакции метоксикарбонилирования циклогексена [3]. Дальнейшие кинетические исследования реакции (1) с использованием дифосфина 7 позволят получить модель селективности реакции как основу для разработки ресурсосберегающей технологии синтеза продукта *a*.

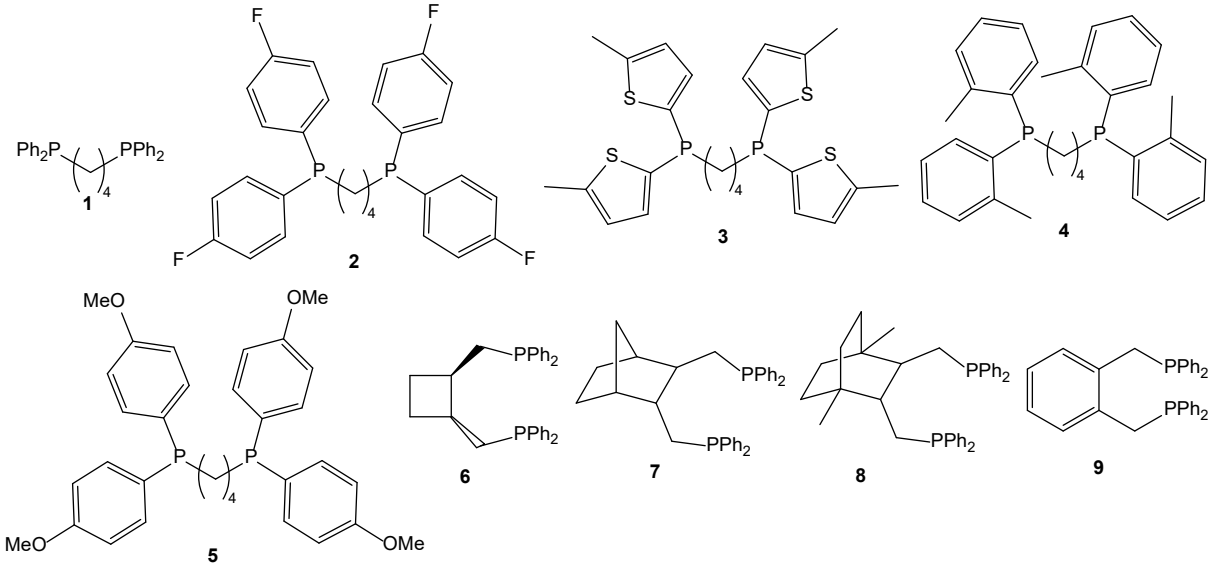


Рисунок. Используемые в реакции (1) дифосфиновые промоторы

Список литературы

[1] Sevostyanova N.T., Batashev S.A. // EurJOC. **2025**. V. *28*. e202401010.

[2] Севостьянова Н.Т., Баташев С.А. // Катализ в промышленности. **2023**. Т. 15. С. 37.

[3] Нифантьев И.Э. и др. // Кинетика и катализ. 2012. Т. 53. С. 483.

[4] Нифантьев И.Э. и др. Пат. РФ 2540079 C2. Опубл. 27.01.2015.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-20019, https://rscf.ru/project/25-23-20019/.

Авторы выражают благодарность проф. И.Э. Нифантьеву и сотр. (Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова) за синтезированные для работы дифосфины.

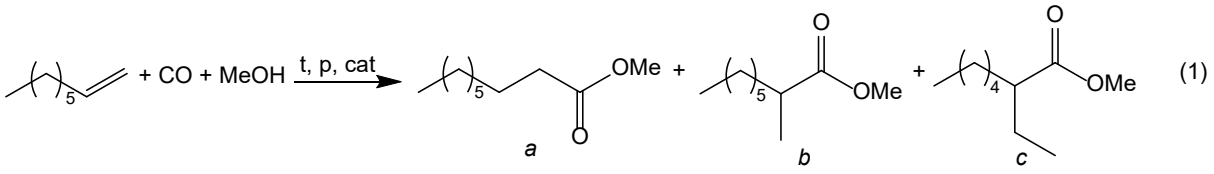
ПБ-25

ВЛИЯНИЕ РЕАГЕНТОВ НА СКОРОСТЬ И СЕЛЕКТИВНОСТЬ МЕТОКСИКАРБОНИЛИРОВАНИЯ ОКТЕНА-1

Севостьянова Н.Т., Баташев С.А.

Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого, Тула, Россия, sevostyanova.nt@gmail.com

Алкоксикарбонилирование алкенов спиртами и CO позволяет получать сложные эфиры одностадийным синтезом из доступных реагентов. Путем метоксикарбонилирования октена-1 (реакция (1)) можно получить метилнонаноат (продукт *a*) – полупродукт в синтезе действующего компонента противоревматических лекарственных средств. При использовании наиболее селективных Pd-фосфиновых каталитических систем реакция (1) осложняется образованием лишь изомерных сложных эфиров. Наибольшую селективность в алкоксикарбонилироовании проявляют каталитические системы с дифосфиновыми промоторами [1, 2]. Однако многие из них нестабильны (трет-бутил-замещенные дифосфины) или являются дорогостоящими. В то же время важным аспектом разработки промышленно важного процесса является использование доступных реагентов и катализаторов. В данной работе в реакции (1) использовали систему $Pd(OAc)_2$ – PPh_3 – п-толуолсульфокислота с одним из наиболее доступных и активных монофосфинов.



(1)

Кинетические исследования проводили в реакторе из диамагнитной нержавеющей стали, снабженном магнитной мешалкой, пробоотборником и термопарой. Реакцию (1) осуществляли в среде толуола при температуре 80 °C и давлении CO 2.1 МПа. В ходе каждого опыта отбирали пробы реакционной массы, которые анализировали методом ГЖХ. Были проведены две серии однофакторных экспериментов с варьированием концентрации октена-1 и метанола. По результатам экспериментов были получены кинетические кривые накопления продуктов *a, b,* и *c* и кривая суммарного накопления этих продуктов. С помощью программы Sigma Plot были получены соответствующие этим кривым сигмоидальные функции и установлены зависимости коэффициентов этих

функций от концентрации октена-1 и метанола. Ниже представлены уравнения интегральной селективности реакции (1) по метилнонаноату, найденные как отношение концентрации продукта *a* к сумме концентраций изомерных сложных эфиров:

$$S_a = \frac{0,71 \cdot C_{C_8H_{16}} + 2,6 \cdot 10^{-3}}{0,97 \cdot C_{C_8H_{16}} - 3 \cdot 10^{-5}} \cdot 100(\%),$$

где диапазон концентраций C_8H_{16} составил 0,02–0,1 М;

$$S_a = 0,8 \cdot \exp\left[0,283\left(\ln \frac{C_{MeOH}}{1,76} \right)^2 - 0,265\left(\ln \frac{C_{MeOH}}{1,95} \right)^2 \right] \cdot 100(\%),$$

где диапазон концентраций метанола составил 0,04–1,0 М.

Рассчитанные значения S_a находятся в хорошем соответствии с экспериментально найденными значениями по окончании реакции.

По тангенсам углов наклона начальных участков кривых накопления продукта *a* и суммарного накопления продуктов, следующих после короткого индукционного периода, были рассчитаны скорости образования продукта *a* (r_a) и суммы продуктов (r_{a+b+c}). Были получены линейные зависимости r_a и r_{a+b+c} от концентрации октена-1. Зависимости r_a и r_{a+b+c} от концентрации метанола проходили через максимумы.

Полученные зависимости r_a и r_{a+b+c} согласуются с полученными ранее данными для реакции метоксикарбонилирования циклогексена, катализируемой той же системой, и могут быть интерпретированы в рамках гидридного механизма [3]. Нисходящие «ветви» полученных экстремальных зависимостей парциальных скоростей от концентрации метанола, по-видимому, обусловлены снижением концентрации каталитических комплексов Pd вследствие специфической сольватации в условиях повышенных концентраций спирта. Полученные уравнения селективности при дополнении данными по влиянию других участников реакции на S_a составят модель селективности реакции (1).

Список литературы

[1] Sevostyanova N.T., Batashev S.A. // EurJOC. 2025. V. *28*. e202401010.

[2] Севостьянова Н.Т., Баташев С.А. // Катализ в промышленности. 2023. Т. 15. С. 37.

[3] Аверьянов В.А. и др. // Хим. физика. 2014. Т. 33. № 3. С. 19.

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-20019, https://rscf.ru/project/25-23-20019/.

РЕКЛАМА

Реолгрейд сервис

Лучшие решения для вашей лаборатории

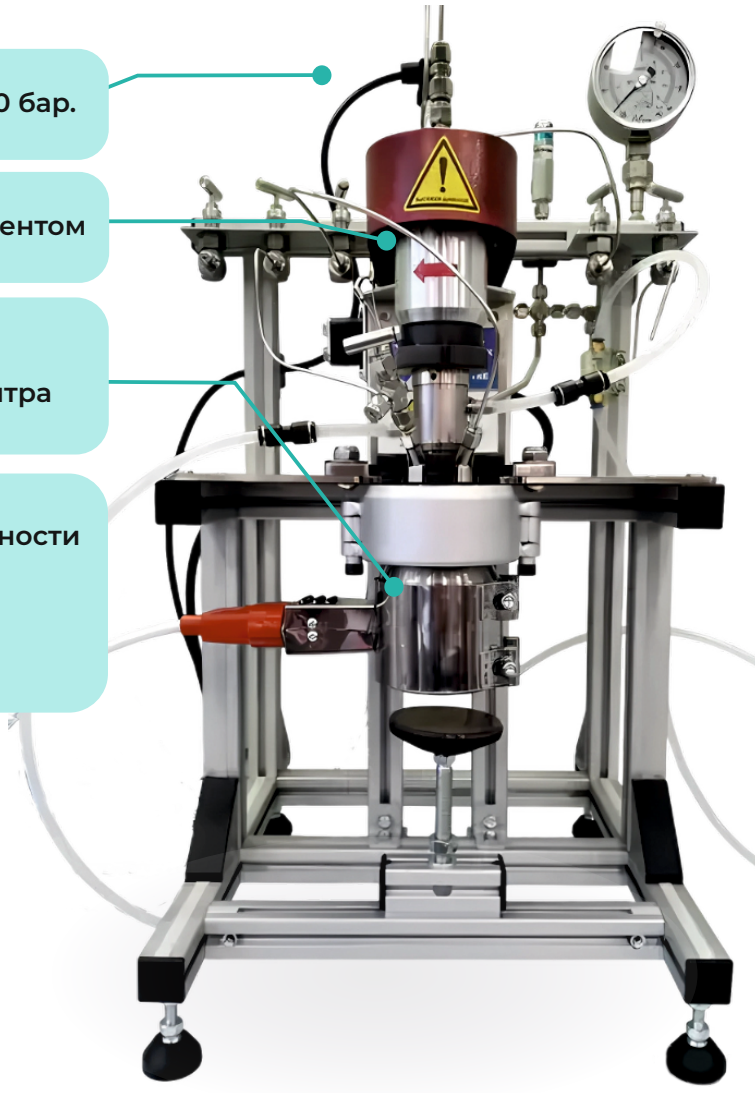
Разработка и производство автоклавных лабораторных реакторов*, исследовательских стендов и вспомогательного оборудования

*Для работы под давлением в области химии, материаловедения, геохимии.
С верхним или нижним перемешиванием, без перемешивания

Новинка!

Автоклавный исследовательский реактор для работы под давлением модификации АРИ-20Т

- Давление до 200 бар.
- Магнитный привод с высоким крутящим моментом
- Охлаждаемые или нагреваемые до 350°С реакционные сосуды объёмом от 0.1 до 1 литра
- Средства обеспечения безопасности
- Уплотнения различных типов
- Выносной пульт управления



Сделано в России

Наукоград Кольцово
Новосибирская область

тел. (383) 347-44-54
reolgrade@reolgrade.ru | reolgrade.ru

Список участников

AVCI Ahmet Kerim
Bogazici University
Istanbul, Turkey
E-mail: avciahme@bogazici.edu.tr

BABAYEVA Farida
Институт нефтехимических процессов
им. Ю.Г. Мамедалиева
Баку, Азербайджан
E-mail: feridan@rambler.ru

CASTILLO-ARAIZA Carlos O.
Autonomous Metropolitan University-Iztapalapa
Mexico City, Mexico
E-mail: coca@xanum.uam.mx

АБДУЛЛА Осман Бырмагамбетович
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: osabdulla@mai.ru

АБИЕВ Руфат Шовкетович
Санкт-Петербургский государственный
технологический институт
(технический университет)
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: abiev.rufat@gmail.com

АГАБЕКОВ Владимир Енокович
Институт химии новых материалов НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: camphene@gmail.com

АГРБА Алина Иосифовна
Нижегородский государственный технический
университет НГТУ им. Р.Е. Алексеева
Нижний Новгород, Россия
E-mail: grinwald@mts-nn.ru

АЛЕКСЕЕНКО Анастасия Анатольевна
Южный федеральный университет
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: an-an-alekseenko@yandex.ru

АЛЕКСЕЕНКО Данил Владимирович
ООО «ПРОМЕТЕЙ РД»
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: alekseenko-da@yandex.ru

АЛЕКСЕЕНКО Сергей Владимирович
Институт теплофизики
им. С.С. Кутателадзе СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: aleks@itp.nsc.ru

АЛЯБЬЕВ Андрей Степанович
ООО «Газпром нефтехим Салават»
Научно-технический центр
Салават, Республика Башкортостан,
Российская Федерация
E-mail: 87aas@snos.ru

АРТАМОНОВ Александр Александрович
Санкт-Петербургский государственный
технологический институт
(технический университет)
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: giperbol123@gmail.com

АРУТЮНОВ Владимир Сергеевич
ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
Москва, Россия
E-mail: v_arutyunov@mail.ru

АХУНДОВА Конул Мурват
Институт нефтехимических процессов
им. Ю.Г. Мамедалиева
Баку, Азербайджан
E-mail: konul.akhundova83@mail.ru

БАДМАЕВ Сухэ Дэмбрылович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: sukhe@catalysis.ru

БАЗЫЛЕВ Николай Борисович
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова
НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: chemreactor26@itmo.by

БАННОВ Александр Георгиевич
Новосибирский государственный технический
университет (технический университет)
Новосибирск, Россия
E-mail: bannov_a@mail.ru

БАРАНОВ Дмитрий Васильевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: dmitriy.bdv@gmail.com

БАРАНОВА Татьяна Анатольевна
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова
НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: bartat@tut.by

БАТАШЕВ Сергей Александрович
Тульский государственный педагогический
университет им. Л.Н. Толстого
Тула, Россия
E-mail: tulapharma@gmail.com

БАЯЗИТОВ Ринат Рахимович
ООО «НПП Нефтехим»
Краснодар, Россия
E-mail: rrbayazitov@nefthim.ru

БЕЛАН Алексей Федорович
ООО «Энергия Нефть»
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: afbelan@mail.ru

БЕСПАЛКО Юлия Николаевна
Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
Новосибирск, Россия
E-mail: bespalko@catalysis.ru

БОРОДИНКИНА Екатерина Николаевна
ООО «ГАЗПРОМНЕФТЬ-КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ»
Омск, Россия
E-mail: borodinkina.en@omsk.gazprom-neft.ru

БОЧАРНИКОВА Елена Николаевна
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томск, Россия
E-mail: bocharnikova.2010@mail.ru

БРУК Лев Григорьевич
Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова РТУ МИРЭА
Москва, Россия
E-mail: lgbruk@mail.ru

БУЛЫЧЕВ Николай Алексеевич
Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)
Москва, Россия
E-mail: nbulychev@mail.ru

БУРУХИНА Оксана Владиславовна
Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского
Саратов, Россия
E-mail: dioksanochka@mail.ru

ВАСИЛЬЕВ Леонард Леонидович
Институт тепло-и массообмена НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: lvasil@hmti.ac.by

ВЕДРОВ Николай Владимирович
ООО «Новомичуринский катализаторный завод»
Новомичуринск, Рязанской области, Россия
E-mail: mail@nkz-ooo.ru

ВЕРЖИЧИНСКАЯ Светлана Владимировна
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: verzhichinskaia.s.v@muctr.ru

ВЕРНИКОВСКАЯ Надежда Викторовна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: vernik@catalysis.ru

ВЕСЕЛИНОВИЧ Александр Миланович
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: aveselinovich@bk.ru

ВЛАСОВ Степан Алексеевич
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: s.vlasov1@g.nsu.ru

ВОЙТИК Ольга Леонидовна
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: voitik@itmo.by

ВОЛКОВ Артур Иванович
ПАО «Газпром нефть»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Volkov.AI@gazprom-neft.ru

ВОЛОВИКОВ Артем Юрьевич
ООО «АРСКА ТЕК»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: arska@arskatech.com

ВОРАКСО Иван Андреевич
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: vorakso.i.a@muctr.ru

ВОШКИН Андрей Алексеевич
Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН
Москва, Россия
E-mail: voshkin@igic.ras.ru

ВЯЛЬЦЕВ Александр Владимирович
Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова
Новочеркасск, Россия
E-mail: bgd-av@mail.ru

ГАНЮШКИН Дмитрий Вадимович
ГК «Энергосила»
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: Ganushkin@ensila.ru

ГАСПАРЯН Микаэл Давидович
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: migas56@yandex.ru

ГЛАЗОВ Никита Александрович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: glazov@catalysis.ru

ГОЛЯШОВА Ксения Евгеньевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: g.k.e.95@mail.ru

ГОНГОЛА Марко Иванович
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: markogongola@gmail.com

ГОРЛОВА Анна Михайловна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: gorlova@catalysis.ru

ГОСТЬКОВ Евгений Владимирович
ПАО «Газпром нефть»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Gostkov.EV@gazprom-neft.ru

ГРИНЧУК Павел Семёнович
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: gps@hmti.ac.by

ГУБАЙДУЛЛИН Ирек Марсович
Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН
Уфа, Республика Башкортостан,
Российская Федерация
E-mail: irekmars@mail.ru

ГУСЬКОВ Ростислав Дмитриевич
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: rostislav.guskov@yandex.ru

ДАВЫДОВИЧ Денис Юрьевич
Омский государственный технический университет
Омск, Россия
E-mail: d-davydovich@mail.ru

ДАНИЛОВА-ТРЕТЬЯК Светлана Михайловна
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: dts@hmti.ac.by

ДЖУСУПКАЛИЕВА Роза Ибраимовна
Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангир хана
Уральск, Республика Казахстан
E-mail: rozaid2@mail.ru

ДОЛУДА Валентин Юрьевич
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: doludav@yandex.ru

ДОМРАЧЕВ Илларион Владимирович
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Томск, Россия,
E-mail: larson42@yandex.ru

ДОМРАЧЕВА Любовь Васильевна
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Томск, Россия,
E-mail: lvdomracheva42@gmail.com

ДУБРОВСКИЙ Виталий Сергеевич
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: dubrovskiy456@mail.ru

ЕЛЕЦКИЙ Петр Михайлович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: yeletsky@catalysis.ru

ЕЛЫШЕВ Андрей Владимирович
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: a.v.elyshev@utmn.ru

ЕРМАКОВ Богдан Анатольевич
ПАО «Газпром нефть»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Ermakov.BA@gazprom-neft.ru

ЕФАНОВА Альвина Олеговна
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Томск, Россия
E-mail: aoe4@tpu.ru

ЕЧЕВСКИЙ Геннадий Викторович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: egv@academ.org

ЖИЖИНА Елена Георгиевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: zhizh@catalysis.ru

ЖИРЕНКОВ Сергей Сергеевич
ООО «НПП Нефтехим»
Краснодар, Россия
E-mail: info@nefthim.ru

ЗАГОРУЙКО Андрей Николаевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: zagor@catalysis.ru

ЗАГРЕБАЕВ Александр Дмитриевич
Южный федеральный университет
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: qv1psdc@mail.ru

ЗАЕВ Иван Александрович
ООО «КИНТЕХ ЛАБ»
Москва, Россия
E-mail: zaev@kintech.ru

ЗАЖИГАЛОВ Сергей Валерьевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: zazhigalov@gmail.com

ЗАКИРОВ Клим Евгеньевич
Институт нефтехимического синтеза
им. А.В. Топчиева РАН
Москва, Россия
E-mail: zak.klim228@gmail.com

ЗАМУЛИНА Татьяна Владимировна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: zam@catalysis.ru

ЗАРУБИН Павел Игоревич
Российский химико-технологический
университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: acetoxime@gmail.com

ЗАХОДЯЕВА Юлия Алексеевна
ФИЦ проблем химической физики и
медицинской химии РАН
Черноголовка, Московская обл., Россия
E-mail: yz@igic.ras.ru

ЗИБАРЕВА Инна Владимировна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: zibareva@catalysis.ru

ЗУБЕНКО Полина Артемовна
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: polinazyb@mail.ru

ЗУЕВ Иван Александрович
ООО «КСК Металлкомплект»
Тверь, Россия
E-mail: zyi777@yandex.ru

ИБАТОВ Ярослав Алексеевич
Российский химико-технологический
университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: ya.ibatov@mail.ru

ИВАНОВ Анатолий Владимирович
ООО «Реолгрейд Сервис»
Кольцово, Новосибирская область, Россия
E-mail: reolgrade@reolgrade.ru

ИВАШКИНА Елена Николаевна
Национальный исследовательский Томский
политехнический университет
Томск, Россия
E-mail: ivashkinaen@tpu.ru

ИВАЩЕНКО Сергей Олегович
АО «НИИК»
Дзержинск, Россия
E-mail: ivashchenko_so@niik.ru

ИСАЕВА Егана Сурет кызы
Институт нефтехимических процессов
им. Ю.Г. Мамедалиева
Баку, Азербайджан
E-mail: isayeva-y@mail.ru

КАБАРДИН Иван Константинович
Институт теплофизики
им. С.С. Кутателадзе СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: ivankabardin@gmail.com

КАДЫРОВ Тагир Равилевич
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: t.r.kadyrov@utmn.ru

КАЗАКОВ Максим Олеглвич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: kazakov@catalysis.ru

КАИЧЕВ Василий Васильевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: vvk@catalysis.ru

КАЛИНИН Владимир Иванович
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова
НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: vokal@dnp.itmo.by

КАРПОВА Татьяна Равильевна
Центр новых химических технологий ИК СО РАН
Омск, Россия
E-mail: ktr@ihcp.ru

КЛЕЙМЕНОВ Андрей Владимирович
ПАО «Газпром нефть»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Kleymenov.AV@gazprom-neft.ru

КЛИРОСОВ Дмитрий Евгеньевич
ООО «Акви Технолоджи»
Тюмень, Россия
E-mail: dya@aqwi.ru

КОВАЛЕВ Иван Вячеславович
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: kovalev.ivan.vyacheslavovich@gmail.com

КОВАЛЁВ Евгений Викторович
АО «СКТБ «Катализатор»
Новосибирск, Россия
E-mail: kovalev@catalyst.su

КОВАЛЁВА Светлана Анатольевна
Объединенный институт машиностроения НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: svetakov2021@gmail.com

КОЗЛОВ Денис Владимирович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: kdv@catalysis.ru

КОЗЛОВСКИЙ Роман Анатольевич
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: rakozlovskiy@mail.ru

КОЗНАЧЕЕВ Иван Алексеевич
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: ivkozn@hmti.ac.by

КОЛОБКОВ Владимир Владимирович
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: kolobkov.volodya@list.ru

КОНОНЕНКО Елизавета Сергеевна
Международный томографический центр СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: elizaveta.kononenko@tomo.nsc.ru

КОПЫТОВ Владислав Валерьевич
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: v.v.kopytov@yandex.ru

КОРНАКОВ Игорь Александрович
ООО «ГЕРОФАРМ»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Igor.Kornakov@geropharm.com

КОРОЛЕВ Александр Николаевич
МИРЭА – Российский технологический университет
Москва. Россия
E-mail: waterpolist2000@yandex.ru

КУЗНЕЦОВ Александр Евгеньевич
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: ae-kuz@yandex.ru

КУЗНЕЦОВ Владимир Львович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: kuznet@catalysis.ru

КУРМАШОВ Павел Борисович
Новосибирский государственный технический университет (НГТУ) НЭТИ
Новосибирск, Россия
E-mail: kurmaschov@gmail.com

ЛАВРЕНОВ Александр Валентинович
Центр новых химических технологий ИК СО РАН
Омск, Россия
E-mail: lavr44@gmail.com

ЛАВРЕНТЬЕВ Владимир Александрович
Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
Москва, Россия
E-mail: lavrentev@ips.ac.ru

ЛАГУСЕВА Елена Ивановна
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: lagusseva@yandex.ru

ЛАЙЛОВ Сергей Владимирович
Акционерное Общество «Федеральный Научно-производственный Центр «Алтай»
Бийск, Россия
E-mail: lailovsv@frpc-altay.ru

ЛАПОНОВ Сергей Владимирович
Уфимский государственный нефтяной технический университет
Стерлитамак, Республика Башкортостан, Российская Федерация
E-mail: Laponows92@mail.ru

ЛАРИНА Динара Ренатовна
АО «НИИК»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: larina_dr@niik.ru

ЛАШИНА Елена Александровна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: lashina@catalysis.ru

ЛОГУНОВА Светлана Сергеевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: logunova@catalysis.ru

ЛОПАТИН Сергей Алексеевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: lopserg.lsa@gmail.com

ЛЯХОВ Алексей Евгеньевич
ООО «Новомичуринский катализаторный завод»
Новомичуринск, Рязанской области, Россия
E-mail: mail@nkz-ooo.ru

МАКСИМОВ Антон Львович
Институт нефтехимического синтеза
им. А.В. Топчиева РАН
Москва, Россия
E-mail: director@ips.ac.ru

МАКУШЕВА Ирина Владимировна
Санкт-Петербургский государственный
технологический институт (технический
университет)
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: makusheva2012@yandex.ru

МАЛУНОВ Артур Игоревич
Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН
Уфа, Республика Башкортостан,
Российская Федерация
E-mail: malunovv@mail.ru

МАЛЬЦЕВ Андрей Владимирович
Южный федеральный университет
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: andre.mennesker56@gmail.com

МАЛЬЦЕВ Владислав Вячеславович
Национальный исследовательский Томский
политехнический
университет
Томск, Россия
E-mail: vvm63@tpu.ru

МАМЕДОВА Малахат Таги
Институт нефтехимических процессов
им. Ю.Г. Мамедалиева
Баку, Азербайджан
E-mail: memmedova-melahet@mail.ru

МАРКОВА Мария Евгеньевна
Тверской государственный технический
университет
Тверь, Россия
E-mail: mashulikmarkova@gmail.com

МАРКОВИЧ Дмитрий Маркович
Институт теплофизики
им. С.С. Кутателадзе СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: director@itp.nsc.ru

МАРТЫНЕНКО Владимир Васильевич
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова
НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: vlmart@itmo.by

МАТВЕЕВА Валентина Геннадьевна
Тверской государственный технический
университет
Тверь, Россия
E-mail: valen-matveeva@yandex.ru

МАТЮХИН Владимир Ильич
Уральский федеральный университет имени
первого Президента России Б.Н. Ельцина
Екатеринбург, Россия
E-mail: matyhin53@mail.ru

МЕЛЕШКИН Александр Дмитриевич
ПАО «Газпром нефть»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Meleshkin.AD@gazprom-neft.ru

МЕЛЕШКИН Антон Викторович
Новосибирский национальный
исследовательский государственный
университет
Новосибирск, Россия
E-mail: mav@itp.nsc.ru

МЕЛЬГУНОВА Елена Александровна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: melena@catalysis.ru

МИК Иван Александрович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск Россия
E-mail: mikluha.ia@gmail.com

МИНКИНА Валентина Григорьевна
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова
НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: minkina@dnp.itmo.by

МИХАЙЛОВ Яков Александрович
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: y.a.mikhajlov@utmn.ru

МОЛЬКОВ Илья Сергеевич
Дзержинский филиал ООО «НПП Нефтехим»
Дзержинск, Россия
E-mail: d-eng@nefthim.ru

МОСЕЕНКОВ Сергей Иванович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: moseenkov@catalysis.ru

МОССЭ Альфред Львович
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: mosse@itmo.by

МОТАЕВ Кирилл Анатольевич
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: k.a.motaev@utmn.ru

МУРАТОВА Наталья Сергеевна
Тамбовский государственный технический университет
Тамбов, Россия
E-mail: muratova.ns@tstu.ru

МЫРЗАЛИЕВА Сауле Керчаизовна
РГП «Национальный Центр по комплексной переработке минерального сырья Республики Казахстан»
Алматы, Республика Казахстан
E-mail: saulekerchaiz@mail.ru

НАЗАРОВА Галина Юрьевна
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Томск, Россия
E-mail: silko@tpu.ru

НАУМОВ Игорь Владимирович
Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия
E-mail: rz9ou@mail.ru

НЕЧИТАЙЛОВА Ирина Олеговна
Южный Федеральный Университет
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: inec@sfedu.ru

НИКИТИН Алексей Витальевич
ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
Москва, Россия
E-mail: ni_kit_in@rambler.ru

НИКОЛАЕВ Михаил Сергеевич
Институт теоретической и прикладной механики имени С.А. Христиановича СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: nikolaev@itam.nsc.ru

НИКОШВИЛИ Линда Жановна
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: nlinda@yandex.ru

НИКУЛИНА Ирина Евгеньевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: i.karmadonova@alumni.nsu.ru

НОСКОВ Александр Степанович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: noskov@catalysis.ru

ОВЧИННИКОВА Елена Викторовна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: evo@catalysis.ru

ОТНЕЛЬЧЕНКО Вадим Викторович
ФИЦ Проблем химической физики и Медицинской химии РАН
Черноголовка, Московская обл., Россия
E-mail: otnelchenko@icp.ac.ru

ПАЙ Зинаида Петровна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: zpai@catalysis.ru

ПАПЕРЖ Кирилл Олегович
Южный федеральный университет
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: kpaperzh@yandex.ru

ПАРАХИН Олег Афанасьевич
ООО «НПК «Синтез»
Барнаул, Россия
E-mail: office@cintez.org

ПАРМОН Валентин Николаевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: i@vparmon.ru

ПАХАРУКОВА Вера Павловна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: verapakharukova@yandex.ru

ПЕНЗИК Максим Владиславович
Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН
Иркутск, Россия
E-mail: penzik.maxim@yandex.ru

ПЕНЯЗЬКОВ Олег Глебович
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: penyaz@dnp.itmo.by

ПЕСКОВА Елизавета Евгеньевна
Национальный исследовательский Мордовский государственный университет
Саранск, Республика Мордовия, Российская Федерация
E-mail: e.e.peskova@mail.ru

ПЕТРИЕВ Илья Сергеевич
Кубанский государственный университет
Краснодар, Россия
E-mail: petriev_iliya@mail.ru

ПЕТРОВ Роман Владимирович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: petrov@catalysis.ru

ПОБОЛЬ Игорь Леонидович
Физико-технический институт НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: pobol.igor@gmail.com

ПОПОВ Михаил Петрович
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: misha.popov90@gmail.com

ПОТАПКИН Борис Васильевич
ООО «КИНТЕХ ЛАБ»
Москва, Россия
E-mail: potapkin@kintechlab.com

ПОТЕМКИН Дмитрий Олегович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: potema@catalysis.ru

ПЧЕЛИНЦЕВА Инна Вагизовна
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Томск, Россия
E-mail: ivnat21@mail.ru

РАБИНОВИЧ Оскар Соломонович
Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: orabi@hmti.ac.by

РЕШЕТНИКОВ Сергей Иванович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: reshet@catalysis.ru

РОГОЖНИКОВ Владимир Николаевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: rvn@catalysis.ru

РОДИКОВА Юлия Анатольевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: rodikova@catalysis.ru

РОМАДЕНКИНА Светлана Борисовна
ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»
Саратов, Россия
E-mail: romadenkina@yandex.ru

РОМАНОВА Вероника Вячеславовна
Институт аналитического приборостроения РАН
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: venjo@mail.ru

САВЕЛЬЕВА Анна Сергеевна
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томск, Россия
E-mail: blokhina_as@mail.ru

САВЧИН Василий Васильевич
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: sauchyn@itmo.by

САЛЬНИКОВ Антон Васильевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: salnikov@catalysis.ru

САТАЕВ Александр Александрович
АО «НИИК»
Дзержинск, Россия
E-mail: sataev_aa@niik.ru

СЕВОСТЬЯНОВА Надежда Тенгизовна
Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого
Тула, Россия
E-mail: sevostyanova.nt@gmail.com

СЕДОВ Игорь Владимирович
ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН
Черноголовка, Московская обл., Россия
E-mail: isedov@icp.ac.ru

СЕЛИЩЕВ Дмитрий Сергеевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: selishev@catalysis.ru

СИБАА Мохамд
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: m.sibaa@utmn.ru

СИДОРЕНКО Александр Юрьевич
Институт химии новых материалов НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: sidorenko@ichnm.by

СИДОРОВ Никита Эдуардович
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: ub_Nikita@mail.ru

СИМАКОВА Ирина Леонидовна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: simakova-home@mail.ru

СИНЁВ Михаил Юрьевич
ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
Москва, Россия
E-mail: mysinev@yandex.ru

СКРИПКИН Сергей Геннадьевич
Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
Новосибирск, Россия
E-mail: skripkin.s.g@gmail.com

СКУДИН Валерий Всеволодович
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
Москва, Россия
E-mail: skudin.v.v@muctr.ru

СЛИНЬКО Марина Михайловна
ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
Москва, Россия
E-mail: marinaslinko3@gmail.com

СМОВЖ Дмитрий Владимирович
Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: dsmovzh@gmail.com

СНЫТНИКОВ Валерий Николаевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: snyt@catalysis.ru

СНЫТНИКОВ Павел Валерьевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: pvsnyt@catalysis.ru

СТЕПАЧЁВА Антонина Анатольевна
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: a.a.stepacheva@mail.ru

СТРИЖАК Павел Александрович
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Томск, Россия
E-mail: pavelspa@tpu.ru

СУЛТАНОВ Булат Фаизович
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: b.f.sultanov@utmn.ru

СУЛТАНОВА Мадина Утимуратовна
Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
Москва, Россия
E-mail: sultanova@ips.ac.ru

СУЛЬМАН Александрина Михайловна
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: alexsulman@mail.ru

СУЛЬМАН Михаил Геннадьевич
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: sulmanmikhail@yandex.ru

ТАРАБАНЬКО Валерий Евгеньевич
Институт химии и химической технологии СО РАН,
ФИЦ «Красноярский научный центр» СО РАН
Красноярск, Россия
E-mail: veta@icct.ru

ТЕЛЯШЕВ Эльшад Гумерович
Уфимский государственный нефтяной технический университет
Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация
E-mail: gmchtp@mail.ru

ТИССЕН Екатерина Артуровна
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: e.a.tissen@utmn.ru

ТРАФИМОВ Александр Викторович
ПАО «Газпром нефть»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Trafimov.AV@gazprom-neft.ru

ТРУШЛЯКОВ Валерий Иванович
Омский государственный технический университет
Омск, Россия
E-mail: vatrushlyakov@yandex.ru

ТЯМИНА Ирина Юрьевна
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: sulman-science@yandex.ru

УСМАНОВА Арина Александровна
Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН
Уфа, Республика Башкортостан,
Российская Федерация
E-mail: aausmanova@yandex.ru

ФЕДОРЕЦ Александр Анатольевич
Тюменский государственный университет
Тюмень, Россия
E-mail: fedorets_alex@mail.ru

ФЕДОТОВ Константин Владимирович
ПАО «Газпром нефть»
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Fedotov.KV@gazprom-neft.ru

ФЛИД Виталий Рафаилович
РТУ МИРЭА, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова
Москва, Россия
E-mail: vitaly-flid@yandex.ru

ФУАД Марио Гамил Гамал
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: m.gamil@g.nsu.ru

ХАЙРУЛИН Сергей Рифович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: sergk@catalysis.ru

ХУДОЛЕЙ Андрей Леонидович
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: khudoley@hmti.ac.by

ЧЕМЕС Анастасия Александровна
Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова
Новочеркасск, Россия
E-mail: nastaukuc1@mail.ru

ЧЕРНЕНКО Андрей Юрьевич
ООО «СИБУР-ИННОВАЦИИ»
Казань, Республика Татарстан,
Российская Федерация
E-mail: chernenkoaniu@innovation.sibur.ru

ЧЕРНЫХ Мария Владимировна
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томск, Россия
E-mail: msadlivskaya@mail.ru

ЧУМАКОВА Наталья Алексеевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: chum@catalysis.ru

ЧУМАЧЕНКО Виктор Анатольевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: vachum@catalysis.ru

ШАБЕЛЬСКАЯ Нина Петровна
Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова
Новочеркасск, Россия
E-mail: nina_shabelskaya@mail.ru

ШАРЫЙ Сергей Петрович
Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий
Новосибирск, Россия
E-mail: shary@ict.nsc.ru

ШАРЫПОВ Олег Владимирович
Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: sharypov@itp.nsc.ru

ШЕБОЛТАСОВ Артем Геннадьевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск Россия
E-mail: asheb@catalysis.ru

ШИВЦОВ Данил Михайлович
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: danil@catalysis.ru

ШИРЯЛИН Илья Михайлович
Тверской государственный технический университет
Тверь, Россия
E-mail: shiryalini@mail.ru

ШКУРЕНОК Виолетта Андреевна
Центр новых химических технологий ИК СО РАН
Омск, Россия
E-mail: shkurenok@ihcp.ru

ШУБИНА Лариса Георгиевна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: shubina@catalysis.ru

ЩЕРБАКОВА Валентина Борисовна
Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси
Минск, Республика Беларусь
E-mail: shch@hmti.ac.by

ЩЕРБАКОВА-САНДУ Мария Петровна
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томск, Россия
E-mail: mpsandu94@gmail.com

ЮДИН Николай Николаевич
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томск, Россия
E-mail: rach3@yandex.ru

ЮДИНА Елена Станиславовна
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: yudina@catalysis.ru

ЯЗОВЦЕВА Ольга Сергеевна
Национальный исследовательский Мордовский государственный университет
Саранск, Республика Мордовия,
Российская Федерация
E-mail: kurinaos@gmail.com

ЯКОВЕНКО Роман Евгеньевич
Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова
Новочеркасск, Россия
E-mail: jakovenko39@gmail.com

ЯКОВЛЕВ Вадим Анатольевич
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Новосибирск, Россия
E-mail: yakovlev@catalysis.ru

ЯНГЛЯЕВ Ильнур Радикович
Национальный исследовательский Мордовский государственный университет
Саранск, Республика Мордовия,
Российская Федерация
E-mail: ilnur.yanglyaev@mail.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ 7

ПЛ-1 **Академик РАН, д.х.н., профессор Пармон Валентин Николаевич,** Болотов В.А.
Почетная пленарная лекция, посвященная основателю конференции, член-корреспонденту РАН, д.х.н., профессору Михаилу Гавриловичу Слинько
ПРОВЕДЕНИЕ ЭНДОТЕРМИЧЕСКИХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В РЕАКТОРАХ С БЕССТЕНОЧНЫМ НАГРЕВОМ КАТАЛИЗАТОРОВ: ОПЫТ ИНСТИТУТА КАТАЛИЗА ИМ. Г.К. БОРЕСКОВА СО РАН 9

ПЛ-2 **Академик РАН, д.ф.-м.н., профессор Алексеенко Сергей Владимирович**
РАЗВИТИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ В УСЛОВИЯХ ИЗМЕНЕНИЯ КЛИМАТА И РАЗРУШЕНИЯ ОЗОНОВОГО СЛОЯ ЗЕМЛИ 11

ПЛ-3 **Д.ф.-м.н. Рабинович Оскар Соломонович,** Кузнецов В.Л., Мосеенков С.И., Малиновский А.И., Лях М.Ю.
КАТАЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В РЕАКТОРАХ С ПСЕВДООЖИЖЕННЫМ СЛОЕМ: МОДЕЛИ ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА 13

ПЛ-4 **Член-корр. РАН, д.т.н., профессор Вошкин Андрей Алексеевич**
ИННОВАЦИОННЫЕ РЕШЕНИЯ В ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ ЭКСТРАКЦИИ 15

ПЛ-5 **Professor Ahmet Kerim Avci**
EFFICIENT AND GREENER CATALYTIC REACTORS AND PROCESSES VIA INTENSIFICATION 16

КЛЮЧЕВЫЕ ЛЕКЦИИ 17

КЛ-1 **Член-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор Стрижак Павел Александрович,** Шлегель Н.Е., Школа М.В.
ГАЗОГИДРАТНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ 19

КЛ-2 **Д.х.н. Решетников Сергей Иванович**
МЕТОДЫ ЗАЩИТЫ КАТАЛИЗАТОРОВ В ПРОЦЕССАХ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ 21

КЛ-3 **Д.х.н., профессор Козловский Роман Анатольевич,** Козловский И.А., Сучков Ю.П.
УПРАВЛЕНИЕ СЕЛЕКТИВНОСТЬЮ В ПРОМЫШЛЕННЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ ОКСИЭТИЛИРОВАНИЯ 23

КЛ-4 **Д.т.н., профессор Теляшев Эльшад Гумерович**
НЕКАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В НЕФТЕПЕРЕРАБОТКЕ 24

КЛ-5 **Professor Carlos O. Castillo-Araiza**
BRIDGING SCALES DURING THE MULTISCALE MODELING OF TRANSPORT PHENOMENA IN A WALL-COOLED PACKED-BED CATALYTIC REACTOR 25

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ
СЕКЦИЯ I.
РАЗВИТИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОСНОВ ПРОЦЕССОВ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ 27

УД-I-1 **Слинько М.М.,** Семендяева Н.Л.
ДВА РАЗНЫХ МЕХАНИЗМА КОЛЕБАНИЙ В ОДНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ЭТИЛЕНА НА Ni 29

УД-I-2 **Лашина Е.А.,** Славинская Е.М., Боронин А.И.
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНО-ПРОГРАММИРУЕМОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ Pt/CeO_2 КАТАЛИЗАТОРОВ ВОДОРОДОМ И МЕТАНОМ 31

УД-I-3 Чумаков Г.А., **Чумакова Н.А.**
КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ГЕТЕРОГЕННОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ СО СТРАННЫМ АТРАКТОРОМ 33

УД-I-4 **Язовцева О.С.,** Пескова Е.Е., Митрюхин И.В.
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО РЕЖИМА НЕСТАЦИОНАРНОГО ХИМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА 35

УД-I-5 **Николаев М.С.,** Картаев Е.В., Ващенко С.П., Ковалев О.Б.
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИКИ В ТРЕХСТРУЙНОМ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УГЛАХ ВВОДА ГАЗА-ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ.....37

УД-I-6 **Пескова Е.Е.,** Снытников В.Н.
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛО-МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА В ТРУБЕ КРУГЛОГО СЕЧЕНИЯ 39

УД-I-7 **Шарый С.П.**
ВОССТАНОВЛЕНИЕ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПО НЕТОЧНЫМ ДАННЫМ С ИНТЕРВАЛЬНОЙ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТЬЮ 41

УД-I-8 **Мотаев К.А.,** Михайлов Я.А., Жованик И.А., Загоруйко А.Н., Елышев А.В.
ОПТИМИЗАЦИЯ СТЕКЛОВОЛОКОННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ПРОЦЕССА МЕТАНИРОВАНИЯ ОКСИДОВ УГЛЕРОДА ПРИ ПОМОЩИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ.....43

УД-I-9 Макаров А.С., **Скудин В.В.,** Тарасенко М.А.
ГИПОТЕЗА ОБ АКТИВИРОВАННОМ МАССОПЕРЕНОСЕ НА МЕМБРАННОМ КАТАЛИЗАТОРЕ.....45

УД-I-10 **Абиев Р.Ш.**
ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ПУЛЬСАЦИОННЫХ АППАРАТОВ.....47

УД-I-11 **Наумов И.В.,** Скрипкин С.Г., Шарифуллин Б.Р.
АДАПТИВНОЕ ВРАЩЕНИЕ КАК СПОСОБ ИНТЕНСИФИКАЦИИ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В ВИХРЕВЫХ РЕАКТОРАХ 48

УД-I-12 **Романова В.В.,** Абиев Р.Ш.
МАССОПЕРЕНОС В ДВУХФАЗНОЙ СИСТЕМЕ ЖИДКОСТЬ-ЖИДКОСТЬ ПРИ СНАРЯДНОМ РЕЖИМЕ ТЕЧЕНИЯ В МИКРОРЕАКТОРЕ.....50

УД-I-13 **Скрипкин С.Г.**, Суслов Д.А., Наумов И.В.
НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ВИХРЕВЫЕ СТРУКТУРЫ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В РЕАКТОРАХ С ДИСКОВОЙ МЕШАЛКОЙ.....52

УД-I-14 **Синев М.Ю.,** Гордиенко Ю.А., Ломоносов В.И., Васютин П.Р., Любимов Е.Ю., Меняйло С.Е.
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ «АДСОРБЕНТ – АДСОРБАТ» ДИНАМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ПРОЦЕССАМ РАЗДЕЛЕНИЯ СМЕСЕЙ ЛЁГКИХ ГАЗОВ 54

УД-I-15 **Вораксо И.А.,** Растунова И.Л., Чеботов А.Ю., Ефимова И.О.
ХИМИЧЕСКИЙ ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН МЕЖДУ УГЛЕКИСЛЫМ ГАЗОМ И ВОДОЙ НА ГЕТЕРОГЕННОМ КАТАЛИЗАТОРЕ В УСЛОВИЯХ ПРОТИВОТОКА 56

УД-I-16 **Мелешкин А.В.,** Князьков В.А., Климов Б.А., Чеверда В.В.
ГАЗОГИДРАТНЫЙ МЕТОД КОНЦЕНТРАЦИИ ИОНОВ ЛИТИЯ.....58

УД-I-17 **Щербакова В.Б.,** Гринчук П.С., Кияшко М.В., Холод В.М.
ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРОШКОВОГО ГРАФИТА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СЖИМАЮЩИХ НАПРЯЖЕНИЙ 60

УД-I-18 **Кабардин И.К.,** Меледин В.Г., Рахманов В.В., Двойнишников С.В., Зубанов К.С., Гордиенко М.Р., Какаулин С.В., Янчат А.Т., Зуев В.О.
РАЗРАБОТКА ОПТИЧЕСКИХ И УЛЬТРАЗВУКОВЫХ МЕТОДОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ДИСПЕРСНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ДЛЯ ВЕРИФИКАЦИИ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ КРУПНОТОННАЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ 62

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ
СЕКЦИЯ II.
РАЗРАБОТКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СХЕМ РЕАКЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ.....65

УД-II-1 Сальников А.В., **Хайрулин С.Р.**
КАТАЛИТИЧЕСКИЕ РЕАКТОРА РАЗЛИЧНОЙ КОНФИГУРАЦИИ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ПРЕВРАЩЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА В ЭЛЕМЕНТАРНУЮ СЕРУ 67

УД-II-2 **Савчин В.В.,** Моссэ А.Л.
ЭЛЕКТРОДУГОВЫЕ ПЛАЗМЕННЫЕ РЕАКТОРЫ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ....69

УД-II-3 **Пензик М.В.**, Котельникова Д.С., Козлов А.Н.
ПИРОЛИЗ ЛИГНИНА С ПОМОЩЬЮ РЕАКТОРА ИНДУКЦИОННОГО НАГРЕВА....71

УД-II-4 **Кузнецов А.Е.**
ГИБРИДНЫЕ БИОРЕАКТОРЫ....73

УД-II-5 **Булычев Н.А.**
ПЛАЗМЕННЫЙ РАЗРЯД В ЖИДКОСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КАВИТАЦИИ КАК МЕТОД СИНТЕЗА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ....75

УД-II-6 **Загоруйко А.Н.**
СТРУКТУРИРОВАННЫЕ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ КАК ОСНОВА ДЛЯ НОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОКИСЛЕНИЯ ДИОКСИДА СЕРЫ....77

УД-II-7 **Заев И.А.,** Зведенюк Л.Б., Ивчик Л.Ф., Кедало Е.М., Книжник А.А., Лебедев А.В., Соколов А.А., Хорьков В.А., Потапкин Б.В., Воронин А.В., Иванов Д.В., Усачев В.Б.
УНИВЕРСАЛЬНАЯ РАСЧЕТНАЯ МОДЕЛЬ РЕАКТОРОВ ПАРОВОЙ И ПАРОКИСЛОРОДНОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА....79

УД-II-8 Трушляков В.И., **Давыдович Д.Ю.**
РАЗРАБОТКА МОБИЛЬНОЙ УТИЛИЗАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ДВУХСТАДИЙНОГО ПРОЦЕССА ПИРОЛИЗА....81

УД-II-9 **Голяшова К.Е.,** Зажигалов С.В., Загоруйко А.Н.
ПРОЦЕСС УПРАВЛЯЕМОГО КОНДИЦИОНИРОВАНИЯ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ УГОЛЬНЫХ ТЭЦ ТРИОКСИДОМ СЕРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ....83

УД-II-10 **Верниковская Н.В.,** Чумаченко В.А., Носков А.С.
ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ПИРОЛИЗА ЭТАНА С УЧЕТОМ ОТЛОЖЕНИЯ КОКСА....85

УД-II-11 **Абдулла О.Б.,** Загоруйко А.Н., Зажигалов С.В., Елышев А.В.
ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРООЧИСТКИ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ....87

УД-II-12 **Беспалко Ю.Н.,** Еремеев Н.Ф., Садыков В.А.
ПОЛУЧЕНИЕ ВОДОРОДА В КАТАЛИТИЧЕСКОМ МЕМБРАННОМ РЕАКТОРЕ....89

УД-II-13 **Петриев И.С.,** Пушанкина П.Д., Хачатрян А.Ш., Иванин С.Н., Папежук М.В., Симонов А.И.
ПАРОВОЙ РИФОРМИНГ МЕТАНА, МЕТАНОЛА В МЕМБРАННОМ РЕАКТОРЕ СО СВЕРХПРОНИЦАЕМЫМИ ПАЛЛАДИЕВЫМИ МЕМБРАНАМИ: КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ НА ПОВЕРХНОСТИ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР....91

УД-II-14 **Чемес А.А.**, Нарочный Г.Б., Савостьянов А.П., Яковенко Р.Е.
МАСШТАБИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ СИНТЕТИЧЕСКОГО ЦЕРЕЗИНА ИЗ ПРИРОДНОГО ГАЗА....93

УД-II-15 **Снытников В.Н.,** Пескова Е.Е.
ЛАЗЕРНАЯ НЕОКИСЛИТЕЛЬНАЯ КОНВЕРСИЯ МЕТАНА В ВОДОРОД И УГЛЕВОДОРОДЫ....95

УД-II-16 **Федорец А.А.,** Домбровский Л.А., Носоновский М.И., Скорб Е.В.
ЛЕВИТИРУЮЩИЕ КАПЛИ-МИКРОРЕАКТОРЫ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ 2D-АЭРОЗОЛЯ....97

УД-II-17 **Мосеенков С.И.,** Заворин А.В., Кузнецов В.Л.
ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ МНОГОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В РЕАКТОРАХ С ПСЕВДООЖИЖЕННЫМ СЛОЕМ....99

УД-II-18 **Васильев Л.Л.,** Журавлёв А.С.
ПАССИВНОЕ ТЕРМОРЕГУЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ ХРАНЕНИЯ ВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА В ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТАХ....101

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ
СЕКЦИЯ III.
ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКТОРЫ И ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ЦЕЛЕВЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ 103

УД-III-1 **Селищев Д.С.,** Фазлиев Т.Р., Селищева С.А., Люлюкин М.Н., Першин А.А., Козлов Д.В., Яковлев В.А.
ПРИМЕНЕНИЕ ПЕРЕДОВЫХ ОКИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ ОЧИСТКИ ЛИВНЕВЫХ СТОКОВ АЭРОПОРТОВ ОТ ПРИМЕСЕЙ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ 105

УД-III-2 **Кононенко Е.С.,** Сковпин И.В., Буруева Д.Б., Рогожников В.Н., Шефер К.И., Саланов А.Н., Коптюг И.В.
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛЫХ СФЕР ИЗ AL_2O_3 В КАЧЕСТВЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ КАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ OPERANDO ИССЛЕДОВАНИЙ ГЕТЕРОГЕННОГО ГИДРИРОВАНИЯ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ 107

УД-III-3 **Загребаев А.Д.,** Нечитайлова И.О., Еид М.Э.А., Терещенко А.А., Эгиль Н.В., Молодцов Д.Ю., Гуда А.А.
МИКРОФЛЮИДНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В СИНТЕЗЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ОРГАНИЧЕСКИХ СУБСТРАТОВ: УСКОРЕНИЕ, МАСШТАБИРОВАНИЕ И АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ НА ОСНОВЕ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И IN SITU МОНИТОРИНГА 109

УД-III-4 **Симакова И.Л.,** Мурзин Д.Ю.
ДИЗАЙН СТРУКТУРИРОВАННЫХ NI/H-BETA КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ОДНОСТАДИЙНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО ЦИТРАЛЯ В МЕНТОЛ В НЕПРЕРЫВНОМ РЕЖИМЕ 111

УД-III-5 **Брук Л.Г.,** Лебедев И.В., Марцинкевич Е.М., Флид В.Р.
КЛАССИФИКАЦИЯ СОВМЕЩЁННЫХ И СОПРЯЖЁННЫХ ПРОЦЕССОВ. СОПРЯЖЁННЫЙ ПРОЦЕСС КОНДЕНСАЦИИ-ГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛЭТИЛКЕТОНА В 5-МЕТИЛ-3-ГЕПТАНОН НА ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ 113

УД-III-6 **Флид В.Р.,** Замалютин В.В.
ГЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ И ИЗОМЕРИЗАЦИЯ СОЕДИНЕНИЙ НОРБОРНЕНОВОГО РЯДА: СТЕРЕОХИМИЯ, КИНЕТИКА, МЕХАНИЗМ 115

УД-III-7 **Тарабанько В.Е.,** Кайгородов К.Л., Смирнова М.А., Челбина Ю.В., Коваленко А.Ю., Корсаков А.В.
ВОЗМОЖНО ЛИ ОКИСЛЕНИЕ НАТИВНОГО ЛИГНИНА ДРЕВЕСИНЫ В ВАНИЛИН В КИНЕТИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ? 117

УД-III-8 **Бочарникова Е.Н.,** Чайковская О.Н., Филатов И.Е., Соломонов В.И., Макарова А.С.
ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ ТРАНСФОРМАЦИИ ВОДНОГО РАСТВОРА ПАРАЦЕТАМОЛА ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ НАНОСЕКУНДНОГО ИМПУЛЬСНОГО ПУЧКА ЭЛЕКТРОНОВ 119

УД-III-9 **Пай З.П.,** Хлебникова Т.Б.
КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ЖИДКОФАЗНОГО ОКИСЛЕНИЯ ПЕРОКСИДОМ ВОДОРОДА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ 121

УД-III-10 Рувинский П.С., Родина В.О., Максимова О.А., Одинцов Д.С., Коренев В.В., Кругляков В.Ю., Корнаухов Р.Е., **Яковлев В.А.**
РАЗРАБОТКА ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЧИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ НИТРАТНО-АММИАЧНЫМ СПОСОБОМ ИЗ ТРИГИДРАТА ГЛИНОЗЕМА 123

УД-III-11 **Паперж К.О.,** Гутерман В.Е., Канцыпа И.В., Зайцева Э.А., Худолей А.В.
СИСТЕМА КОНТРОЛЯ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ ПЛАТИНЫ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА В ЖИДКОЙ СРЕДЕ 125

УД-III-12 Манаенков О.В., Гаврилова Е.П., Кислица О.В., Матвеева В.Г., **Сульман М.Г.**
ТВЁРДЫЙ КИСЛОТНЫЙ ПОЛИМЕРНЫЙ КАТАЛИЗАТОР ДЛЯ СИНТЕЗА ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ 127

УД-III-13 Agabekov V.E., **Sidorenko A.Yu.**
NOVEL CATALYTIC SYSTEMS FOR CASCADE REACTION OF TERPENOIDS 129

УД-III-14 **Матвеева В.Г.,** Сульман А.М., Тихонов Б.Б., Лисичкин Д.Р., Гребенникова О.В., Молчанов В.П., Соколова А.В., Сидоров А.И.
ДИЗАЙН КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДЛЯ КАСКАДНЫХ ПРОЦЕССОВ В КОНВЕРСИИ ЦЕЛЛЮЛОЗОСОДЕРЖАЩЕЙ БИОМАССЫ 131

УД-III-15 **Yeletsky P.M.,** Borodina O.A., Mozyleva M.A., Lebedeva M.V., Yakovlev V.A.
DESIGN OF PINE NUT SHELL DERIVED ACTIVATED CARBONS USING PHOSPHORIC ACID ACTIVATION TECHNIQUE FOR NON-AQUEOUS ELECTROLYTE BASED SUPERCAPACITORS 133

УД-III-16 Исьёмин Р.Л., Кузьмин С.Н., Михалев А.В., Климов Д.В., **Муратова Н.С.,** Милованов О.Ю.
ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ БИОУГЛЯ ИЗ КОЖУРЫ КАРТОФЕЛЯ МЕТОДОМ ТОРРЕФИКАЦИИ В КИПЯЩЕМ СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА В СРЕДЕ ПЕРЕГРЕТОГО ВОДЯНОГО ПАРА 135

УД-III-17 **Шивцов Д.М.,** Сайгареев Р.А., Афонникова С.Д., Бауман Ю.И., Шубин Ю.В., Мишаков И.В.
ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ [NiFeCuCo]M (M = W, Mo) ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР 137

УД-III-18 **Баннов А.Г.,** Курмашов П.Б.
СИНТЕЗ КАТАЛИЗАТОРОВ РАЗЛОЖЕНИЯ МЕТАНА МЕТОДОМ ГОРЕНИЯ РАСТВОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЛИЦИНА В КАЧЕСТВЕ ТОПЛИВА 139

УД-III-19 **Смовж Д.В.,** Сорокин Д.В., Гареев Т.И., Богомолова А.И., Зайцев О.В., Нуриахметов З.Н.
CVD СИНТЕЗ ГРАФЕНА И СОЗДАНИЕ КОМПОЗИТНЫХ СТРУКТУР НА ЕГО ОСНОВЕ 140

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ
СЕКЦИЯ IV.
НОВЫЕ РЕАКТОРЫ И ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЙ В ТОПЛИВНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СФЕРЕ 143

УД-IV-1 **Карпова Т.Р.,** Лавренов А.В., Моисеенко М.А.
ПРИРОДНЫЙ ГАЗ КАК ИСТОЧНИК ЛЕГКИХ АЛКЕНОВ: РОЛЬ ТЕХНОЛОГИЙ МЕТАТЕЗИСА 145

УД-IV-2 **Арутюнов В.С.,** Савченко В.И., Седов И.В., Никитин А.В., Озерский А.В.
НЕКАТАЛИТИЧЕСКАЯ КОНВЕРСИЯ ЛЕГКИХ АЛКАНОВ 147

УД-IV-3 **Ечевский Г.В.**
ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИИ БИЦИКЛАР 149

УД-IV-4 **Ивашкина Е.Н.,** Долганова И.О., Долганов И.М., Чузлов В.А., Назарова Г.Ю., Боев А.С.
ОПЫТ РАЗРАБОТКИ И ПРИМЕНЕНИЯ СТРОГИХ ИНЖЕНЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАБОТЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ В ТЕХНОЛОГИЯХ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ И НЕФТЕХИМИИ 151

УД-IV-5 **Шкуренок В.А.,** Яблокова С.С., Лавренов А.В.
КИНЕТИКА ИЗОМЕРИЗАЦИИ ГЕПТАНА НА КАТАЛИЗАТОРЕ Pt/WO_3-ZrO_2 153

УД-IV-6 **Губайдуллин И.М.,** Урлуков А.С., Усков С.И., Потемкин Д.И., Хашпер А.Л.
ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ УГЛЕВОДОРОДОВ НА РОДИЙ-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРАХ 155

УД-IV-7 **Закиров К.Е.,** Старожицкая А.В., Магомедова М.В., Дементьева О.С.
МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ОДНОСТАДИЙНОГО СИНТЕЗА ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ИЗ CO_2 157

УД-IV-8 **Глазов Н.А.**
ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СЛОЖНЫХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ МНОГОМЕРНЫМИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯМИ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ СЛОЖНЫХ СОСТАВОВ 159

УД-IV-9 **Казаков М.О.,** Петров Р.В., Дик П.П., Носков А.С.
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРОЦЕССА ГИДРОКРЕКИНГА НА ОСНОВАНИИ ПИЛОТНЫХ ИСПЫТАНИЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ 161

УД-IV-10 **Султанова М.У.**, Самойлов В.О., Рамазанов Д.Н., Максимов А.Л.
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ НАФТЕНОВОГО ЖИДКОГО ОРГАНИЧЕСКОГО НОСИТЕЛЯ ВОДОРОДА В ПРИСУТСТВИИ Pt/C КАТАЛИЗАТОРА 163

УД-IV-11 **Яковенко Р.Е.,** Нарочный Г.Б. Савостьянов А.П.
ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ПРОЦЕССА ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ В ТРУБЧАТОМ РЕАКТОРЕ СИНТЕЗА ФИШЕРА-ТРОПША ЗА СЧЁТ УПРАВЛЕНИЯ ЦИРКУЛЯЦИЕЙ СИНТЕЗ-ГАЗА 165

УД-IV-12 **Снытников П.В.,** Рогожников В.Н., Потемкин Д.И., Немудрый А.П., Сивак А.В.
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ГЕНЕРАТОРЫ «ТОПАЗ»: ОТ РАЗРАБОТКИ ДО СЕРИЙНОГО ПРОИЗВОДСТВА 167

УД-IV-13 **Никитин А.В.,** Зимин Я.С., Отнельченко В.В., Фокин И.Г., Седов И.В., Арутюнов В.С.
ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ УГЛЕКИСЛОТНАЯ КОНВЕРСИЯ МЕТАНА В УСЛОВИЯХ МАТРИЧНОГО РИФОРМИНГА 169

УД-IV-14 **Никулина И.Е.,** Горлова А.М., Петров И.Ю., Потемкин Д.И.
СОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКАЯ ПАРОВАЯ КОНВЕРСИЯ СО В ПРИСУТСТВИИ МОДИФИЦИРОВАННОГО MgO ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОЧИСТОГО ВОДОРОДА 171

УД-IV-15 Никулина И.Е., Горлова А.М., Урлуков А.С., Шигаров А.Б., **Потемкин Д.И.**
ОСОБЕННОСТИ РАЗРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГАЗОХИМИИ 173

УД-IV-16 **Рогожников В.Н.,** Потемкин Д.И., Снытников П.В., Шефер К.И., Шигаров А.Б., Шилов В.А., Бурматова М.А., Кузнецова А.Д., Печенкин А.А., Урлуков А.С.
СТРУКТУРИРОВАННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ПАРЦИАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ ПРИРОДНОГО ГАЗА ДЛЯ СИНТЕЗА МЕТАНОЛА 175

УД-IV-17 **Бадмаев С.Д.,** Кузнецова А.Д., Собянин В.А., Снытников П.В.
РЕФОРМЕР ВОЗДУШНОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНОЛА В ВОДОРОДСОДЕРЖАЩИЙ ГАЗ ДЛЯ ПИТАНИЯ ТОТЭ 177

УД-IV-18 **Калинин В.И.,** Шабуня С.И., Мартыненко В.В., Минкина В.Г.
КОМПАКТНЫЙ РЕАКТОР ЧАСТИЧНОГО ОКИСЛЕНИЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬЮ ПО ЭНДОГАЗУ ДО 10 $м^3$/ч ДЛЯ СОЗДАНИЯ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЙ АТМОСФЕРЫ 178

УД-IV-19 **Попов М.П.,** Власов С.А., Гонгола М.И., Фуад М.Г.Г., Гуськов Р.Д., Ковалев И.В., Чижик С.А., Немудрый А.П.
ДИЗАЙН АРХИТЕКТУРЫ МИКРОТРУБЧАТЫХ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ АДДИТИВНОГО ФОРМИРОВАНИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ 180

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ с УСТНОЙ ФЛЭШ-ПРЕЗЕНТАЦИЕЙ **(СД-1 – СД-3)** 181

СД-1 **Бочарникова Е.Н.,** Чайковская О.Н.
ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ В МОЛОЧНОЙ СЫВОРОТКЕ ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ УФ-ИСТОЧНИКАМИ В ФОТОРЕАКТОРЕ 183

СД-2 Кунарева А.А., Бахвалова Е.С., Сидоров А.И., Быков А.В., **Никошвили Л.Ж.**
ВЛИЯНИЕ СПОСОБА ПЕРЕМЕШИВАНИЯ И ПРИРОДЫ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ПОВЕДЕНИЕ ПАЛЛАДИЙ СОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ ГИДРИРОВАНИЯ АЛКИНОЛОВ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ ВОДОРОДА 185

СД-3 **Матвеева В.Г.,** Никошвили Л.Ж., Лисичкин Д.Р., Григорьев М.Е., Манаенков О.В., Тямина И.Ю., Каичев В.В.
БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ РАСТИТЕЛЬНОЙ БИОМАССЫ В ПЕРИОДИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ 187

СД-4 **Fouad M.,** Tropin E., Guskov R., Kovalev I., Gongola M., Popov M., Nemudry A.
EQUILIBRIUM AND KINETIC PARAMETERS OF OXYGEN EXCHANGE IN MIXED IONIC ELECTRONIC CONDUCTING PEROVSKITE-RELATED OXIDE $La_2NiO_{4+\delta}$ 189

СД-5 **Алексеенко А.А.,** Беленов С.В., Павлец А.С., Алексеенко Д.В., Астравух Я.В., Криводубский Д.П., Баян Ю.А., Гутерман В.Е.
ПЛАТИНОСОДЕРЖАЩИЕ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ВОДОРОДО-ВОЗДУШНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ 191

СД-6 **Артамонов А.А.,** Абиев Р.Ш.
ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НОВОГО АППАРАТА НА ОСНОВЕ ВИХРЕВЫХ КОНТАКТНЫХ УСТРОЙСТВ 193

СД-7 **Баранов Д.В.**, Лопатин С.А.
СРАВНЕНИЕ КОНВЕРСИЙ ТОЛУОЛА НА СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ С ПЛАТИНОЙ И ПАЛЛАДИЕМ В КАЧЕСТВЕ АКТИВНЫХ КОМПОНЕНТОВ 195

СД-8 **Беспалко Ю.Н.,** Ханна С.А., Еремеев Н.Ф., Садыков В.А.
КАТАЛИЗАТОРЫ УГЛЕКИСЛОТНОЙ КОНВЕРСИИ ЭТАНОЛА НА ОСНОВЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ОКСИДОВ 197

СД-9 **Бурухина О.В.,** Кривоносов А.А., Ромаденкина С.Б., Кузьмина Р.И., Аврамов М.В.
КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТРЕНАЖЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ 199

СД-10 Веселовская Ж.В., Шешковас А.Ж., Селищев Д.С., **Козлов Д.В.**
СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К СОРБЦИОННОМУ УЛАВЛИВАНИЮ CO_2 ИЗ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ 201

СД-11 **Власов С.А.,** Гонгола М.И., Попов М.П., Немудрый А.П.
ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ И ТЕРМОДИНАМИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА В КОБАЛЬТИТЕ ЛАНТАНА-СТРОНЦИЯ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА, ДОПИРОВАННОГО НИОБИЕМ 203

СД-12 **Войтик О.Л.,** Делендик К.И., Коляго Н.В.
ВЫСОКОПРОЧНЫЕ НИКЕЛЕВЫЕ ЯЧЕИСТО-ПОРИСТЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ 205

СД-13 **Гонгола М.И.,** Попов М.П., Немудрый А.П.
ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{1-x}Mo_xO_{3-\delta}$ 207

СД-14 **Горлова А.М.,** Бушуев В.О., Рогожников В.Н., Потемкин Д.И**.**
БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ Pt-СОДЕРЖАЩИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ РЕАКЦИИ ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ CO 208

СД-15 **Гуськов Р.Д.,** Попов М.П., Ковалев И.В., Гонгола М.И., Фуад М., Немудрый А.П.
ОКСИДЫ КОБАЛЬТИТА СТРОНЦИЯ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА: ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ ВЫСОКОВАЛЕНТНЫМИ КАТИОНАМИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА 210

СД-16 **Джусупкалиева Р.И.,** Пугачева Е.В., Быстрова И.М., Борщ В.Н., Помогайло С.И., Рухов А.В.
ГЛУБОКОЕ ОКИСЛЕНИЕ ПРОПАНА И ОКСИДА УГЛЕРОДА, КАТАЛИЗИРУЕМОЕ НАНОКОМПОЗИТАМИ НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТ-МАРГАНЦА, НАНЕСЕННЫХ НА ПРИРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ: ОПОКУ И ДИАТОМИТ 212

СД-17 **Домрачев И.В.**, Лыткина Д.Н., Курзина И.А.
БИОСТЕКЛО SiO_2-CaO С МОДИФИЦИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ 214

СД-18 **Домрачева Л.В.**, Щербакова-Санду М.П., Курзина И.А.
ПОЛУЧЕНИЕ ГЛЮКОНОВОЙ И ГЛЮКАРОВОЙ КИСЛОТ НА Ni-Co-Fe ЭЛЕКТРОДЕ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ 216

СД-19 **Ефанова А.О.,** Киргина М.В.
РЕАЛИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ НИЗКОЗАСТЫВАЮЩЕГО ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЕПРЕССОРНЫХ ПРИСАДОК И УТЯЖЕЛЯЮЩИХ КОМПОНЕНТОВ 218

СД-20 **Жижина Е.Г.,** Родикова Ю.А.
ГОМОГЕННЫЕ ПРОЦЕССЫ НА ОСНОВЕ V-СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОПОЛИКИСЛОТ: ВОЗДУШНЫЙ РЕАКТОР ДЛЯ РЕГЕНЕРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРА 220

СД-21 **Зубенко П.А.,** Григорьев М.В., Тиссен Е.А., Русейкина А.В., Харитонцев В.Б., Елышев А.В.
ПИРОЛИЗ ПОЛИЭТИЛЕНА В ПРИСУТСТВИИ ГЛИНИСТЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ,
МОДИФИЦИРОВАННЫХ CeO_2 и NiO 222

СД-22 **Зуев И.А.,** Соловьёва В.С., Лагусева Е.И.
РЕАКТОРНЫЕ УСТРОЙСТВА ДЛЯ РЕАКЦИОННОГО ФОРМОВАНИЯ
ЖИРНОАРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИАМИДОВ 224

СД-23 **Кадыров Т.Р.,** Азарапин Н.О., Елышев А.В., Загоруйко А.Н.
АДСОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ПАРОВОГО РИФОРМИНГА
МЕТАНА ДЛЯ ОДНОСТАДИЙНОГО ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА 225

СД-24 **Лопатин С.А.,** Елышев А.В., Загоруйко А.Н.
МАСШТАБИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПАРОУГЛЕКИСЛОТНОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА
С ПОМОШЬЮ МЕТОДОВ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ 227

СД-25 **Каичев В.В.,** Пахарукова В.П., Горбунова А.С., Шутилов А.А., Чернов А.Н.,
Колтунов К.Ю., Соболев В.И.
ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ ОКСИДА ГАЛЛИЯ НА ЕГО КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА В
ДЕГИДРИРОВАНИИ ПРОПАНА В ПРОПИЛЕН 229

СД-26 **Ковалев И.В.,** Попов М.П., Немудрый А.П.
ИЗУЧЕНИЕ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ FDM 3D ПЕЧАТИ 231

СД-27 **Колобков В.В.,** Соловьёва В.С., Лагусева Е.И.
ПЕРЕРАБОТКА ТЯЖЕЛОКИПЯЩИХ ОТХОДОВ ПРОИЗВОДСТВА КАПРОЛАКТАМА 233

СД-28 **Корнаков И.А.,** Гречко Д.А., Мухина Т.В., Яровикова М.С., Хасаншина З.Р**.,**
Сальников С.М., Сальникова А.М., Шипачева М.М.
ПОДХОД К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ПРОФИЛЯ АЭРАЦИИ И ПЕРЕМЕШИВАНИЯ
В ПРОМЫШЛЕННОМ БИОРЕАКТОРЕ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО МАСШТАБИРОВАНИЯ
ЛАБОРАТОРНОЙ ТЕХНОЛОГИИ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ РЕКОМБИНАТНОЙ *E.coli* 234

СД-29 **Курмашов П.Б.,** Баннов А.Г.
СИНТЕЗ КАТАЛИЗАТОРОВ МЕТОДОМ ГОРЕНИЯ РАСТВОРОВ И ЕГО МАСШТАБИРОВАНИЕ 236

СД-30 **Лапонов С.В.,** Шулаев Н.С.
ОСОБЕННОСТЬ ПРОЦЕССОВ ЭМУЛЬГИРОВАНИЯ В РОТОРНО-ДИСКОВЫХ РЕАКТОРАХ 238

СД-31 **Макушева И.В.**, Абиев Р.Ш.
ГИДРОДИНАМИКА И КАЧЕСТВО МИКРОСМЕШЕНИЯ В МИКРОРЕАКТОРАХ: СРАВНЕНИЕ
ИНТЕНСИВНО ЗАКРУЧЕННЫХ ПОТОКОВ И ЗАТОПЛЕННЫХ СТАЛКИВАЮЩИХСЯ СТРУЙ 240

СД-32 **Малунов А.И.,** Коледина К.Ф., Серебренников Д.В., Забиров А.Р., Яковенко Р.Е.,
Губайдуллин И.М., Аглиуллин М.Р.
ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ НИЗКОЗАСТЫВАЮЩИХ ДИЗЕЛЬНЫХ ТОПЛИВ
НА КАТАЛИЗАТОРАХ ТИПА SAPO-11 242

СД-33 **Мальцев В.В.,** Назарова Г.Ю., Ивашкина Е.Н.
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА СМЕСЕВОГО СЫРЬЯ
ПРИ ВОВЛЕЧЕНИИ В ПЕРЕРАБОТКУ ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ ТЯЖЕЛОГО
ГАЗОЙЛЯ КОКСОВАНИЯ И ОСТАТКА ГИДРОКРЕКИНГА 243

СД-34 **Маркова М.Е.,** Емельянова С.Д., Филатова А.Е., Степачёва А.А., Сульман М.Г.
СОВМЕСТНАЯ КОНВЕРСИЯ СЕРУ- И КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ СУБСТРАТОВ
В ПРИСУТСТВИИ МАГНИТООТДЕЛЯЕМЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ 245

СД-35 **Маркова М.Е.,** Емельянова С.Д., Крылов Д.О., Степачёва А.А., Матвеева В.Г., Сульман М.Г.
ВЛИЯНИЕ МЕТОДА НАНЕСЕНИЯ АКТИВНОГО МЕТАЛЛА НА СТРУКТУРУ
И КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ СИСТЕМ НИКЕЛЬ-ШУНГИТ 247

СД-36 **Мельгунова Е.А.,** Аюпов А.Б.
РАЗРАБОТКА МЕТОДА РАСЧЁТА УДЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ И ПОРИСТОСТИ КАТАЛИЗАТОРОВ БЕЗ ВМЕШАТЕЛЬСТВА ОПЕРАТОРА НА ОСНОВЕ НЕЙРОСЕТЕВОГО ПОДХОДА....249

СД-37 **Михайлов Я.А.,** Матигоров А.В., Лопатин С.А., Елышев А.В.
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РАЗЛИЧНЫХ ФОРМ УКЛАДКИ СТЕКЛОТКАННОГО КАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ ПРОЦЕССА МЕТАНИРОВАНИЯ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА 251

СД-38 Мотаев К.А., **Копытов В.В.,** Петришена А.С., Елышев А.В.
ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПАРОВОГО РИФОРМИНГА МЕТАНА ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДА СЛУЧАЙНОГО ЛЕСА 253

СД-39 Нечитайлова И.О., Панкова Ю.А., **Загребаев А.Д.,** Еид М.Э.А., Молодцов Д.Ю., Панков И.В., Солдатов А.В., Алексеенко А.А., Гуда А.А.
ПРИМЕНЕНИЕ МИКРОФЛЮИДНОЙ УСТАНОВКИ С ПОВЫШЕННЫМ ДАВЛЕНИЕМ ДЛЯ СИНТЕЗА ПЛАТИНОВЫХ НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ 255

СД-40 **Овчинникова Е.В.,** Борисова Е.С., Петров Р.В., Чумаченко В.А., Носков А.С.
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ н-БУТАНА В БУТАДИЕН-1,3 НА АЛЮМОХРОМОВОМ КАТАЛИЗАТОРЕ 257

СД-41 **Пахарукова В.П.,** Харченко Н.А., Стонкус О.А., Сараев А.А., Горлова А.М., Рогожников В.Н., Петров И.Ю., Потемкин Д.И.
ВЛИЯНИЕ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНОЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНУЮ ОРГАНИЗАЦИЮ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КАТАЛИЗАТОРОВ $Ni/Ce_{0.75}Zr_{0.25}O_2$ ДЛЯ МЕТАНИРОВАНИЯ CO_2....259

СД-42 **Пчелинцева И.В.,** Ивашкина Е.Н., Чернякова Е.С., Родевич М.В.
МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ ПРОМЫШЛЕННОЙ УСТАНОВКИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО РИФОРМИНГА БЕНЗИНОВ ПРИ ВОВЛЕЧЕНИИ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ СЫРЬЕВЫХ ПОТОКОВ....261

СД-43 **Родикова Ю.А.,** Медведева Т.Б., Громов Н.В., Жижина Е.Г.
СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДОВ СИНТЕЗА V-СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОПОЛИСОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ОДНОСТАДИЙНЫХ ПРОЦЕССАХ ПЕРЕРАБОТКИ КОМПОНЕНТОВ БИОМАССЫ 263

СД-44 **Ромаденкина С.Б.,** Кривоносов А.А., Бурухина О.В., Кузьмина Р.И., Ершов Е.С.
ОБУЧАЮЩИЙ КОМПЬЮТЕРНЫЙ ТРЕНАЖЕРНЫЙ КОМПЛЕКС РЕАКТОРНОГО БЛОКА ПРЕВРАЩЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ....265

СД-45 **Савельева А.С.,** Понизовная Д.А, Таратайко А.В., Мамонтов Г.В.
БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ Pt-Ag КАТАЛИЗАТОРЫ, НАНЕСЕННЫЕ НА Ce-Fe ОКСИДНЫЕ НОСИТЕЛИ, ДЛЯ НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ 267

СД-46 Кленов О.П., Хайрулин С.Р., **Сальников А.В.,** Ганюшкин Д.В., Белан А.Ф.
МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТОРА ПРЯМОГО КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА ПО ТЕХНОЛОГИИ ДИРОКС® В КИПЯЩЕМ СЛОЕ ДЛЯ УСТАНОВКИ ПОДГОТОВКИ НЕФТИ НА КОМАНДИРШОРСКОМ МЕСТОРОЖДЕНИИ ПАО «ЛУКОЙЛ»....269

СД-47 **Сибаа Мохамд,** Харитонцев В.Б., Матигоров А.В., Загоруйко А.Н., Елышев А.В.
Ru-СОДЕРЖАЩИЕ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПРОЦЕССА ГИДРОГЕНОЛИЗА ПРОПАНА....271

СД-48 **Симакова И.Л.**
ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ПОВЕДЕНИЕ НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА БЕТА-ЦЕОЛИТЕ В РЕАКЦИИ ПРЕВРАЩЕНИЯ ЦИТРАЛЯ....273

СД-49 **Симакова И.Л.**
СРАВНЕНИЕ АКТИВНОСТИ Pt И Pt-Sn КАТАЛИЗАТОРОВ В СИНТЕЗЕ ГЕРАНИОЛА/НЕРОЛА ИЗ ЦИТРАЛЯ....275

СД-50 **Зажигалов С.В.,** Сибаа М., Елышев А.В., Загоруйко А.Н.
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОТЕРМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ГИДРОГЕНОЛИЗА ПРОПАНА....277

СД-51 **Сидоров Н.Э.**, Абиев Р.Ш.
МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ РЕАКТОРА С ЦЕНТРОБЕЖНО-ПУЛЬСАЦИОННЫМИ МЕШАЛКАМИ....279

СД-52 **Степачёва А.А.,** Маркова М.Е., Акинчиц М.В., Шашуев А.А., Сульман М.Г.
СИСТЕМЫ БИОУГОЛЬ – ДИОКСИД КРЕМНИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НОСИТЕЛИ КАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ....281

СД-53 **Султанов Б.Ф.,** Андреев О.В., Загоруйко А.Н., Елышев А.В.
СТРУКТУРИРОВАННЫЕ СТЕКЛОВОЛОКНИСТЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО СИНТЕЗА ОЛЕФИНОВ В РЕАКЦИИ ФИШЕРА-ТРОПША....283

СД-54 **Сульман А.М.,** Гребенникова О.В., Молчанов В.П., Балакшина Д.В., Матвеева В.Г.
ЭФФЕКТИВНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НАНОБИОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ ЦЕЛЛЮЛАЗЫ....285

СД-55 **Тиссен Е.А.,** Харитонцев В.Б., Елышев А.В., Потемкин Д.И.
ИССЛЕДОВАНИЕ ЦЕОЛИТНОГО КАТАЛИЗАТОРА HMOR, МОДИФИЦИРОВАННОГО ОКСИДАМИ НИКЕЛЯ, ЛАНТАНА И САМАРИЯ, В ПРОЦЕССЕ ПИРОЛИЗА ПОЛИЭТИЛЕНА....287

СД-56 **Усманова А.А.,** Коледина К.Ф., Коржова Л.Ф., Кирсанов В.Ю., Губайдуллин И.М.
КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ГОМОКОНДЕСАЦИИ АЦЕТОНА В ИЗОФОРОН И 3,5-КСИЛЕНОЛ....289

СД-57 Цветков Д.Ю., Курагин А.А., Маркова М.Е., Бахвалова Е.С., Сидоров А.И., Лакина Н.В., Сульман М.Г., **Долуда В.Ю.**
ТРАНСФОРМАЦИЯ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА В ФОРМАЛЬДЕГИД И ЕГО ПРОИЗВОДНЫЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ....291

СД-58 **Черных М.В.,** Грабченко М.В., Мамонтов Г.В.
ДИЗАЙН БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ Ag-Ir/CeO_2-Fe_2O_3 СИСТЕМ ДЛЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО КАТАЛИЗА....293

СД-59 Шеболтасов А.Г., Верниковская Н.В., Андреев Д.В., Грибовский А.Г., **Чумаченко В.А.**
МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОИНТЕГРИРОВАННЫХ ПРОЦЕССОВ РИФОРМИНГА И ПОЛНОГО ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНОЛА В МИКРОСТРУКТУРИРОВАННОМ РЕАКТОРЕ....295

СД-60 **Ширялин И.М.,** Бондарь А.А., Лагусева Е.И.
РЕЦИКЛИНГ ПОЛИЭФИРНЫХ СТЕКЛОКОМПОЗИТОВ: НОВЫЕ ПОДХОДЫ....297

СД-61 **Щербакова-Санду М.П.,** Гулевич С.А., Сараев А.А.
ПОВЕРХНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПАЛЛАДИЙ-ВИСМУТОВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА....298

СД-62 **Юдин Н.Н.,** Подзывалов С.Н., Зиновьев М.М., Кузнецов В.С., Слюнько Е.С., Лысенко А.Б., Кальсин А.Ю., Власов Д.В., Худолей А.Л.
ФИЗИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ОПТИЧЕСКОГО ПРОБОЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ $ZnGeP_2$ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ С ДЛИНОЙ ВОЛНЫ ~ 2,1 мкм....300

СД-63 **Янгляев И.Р.,** Язовцева О.С., Губайдуллин И.М.
ГИПЕРБОЛИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕСТАЦИОНАРНОГО ПРОЦЕССА В СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА....302

ПУБЛИКАЦИЯ В ЭЛЕКТРОННОМ СБОРНИКЕ ТЕЗИСОВ....305

ПБ-1 **Агрба А.И.**, Гринвальд И.И., Капустин Р.В.
КОМБИНИРОВАННАЯ СВЧ-ПЛАЗМОХИМИЧЕСКАЯ СИСТЕМА СИНТЕЗА ОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ НА ОСНОВЕ КОНВЕРСИИ МЕТАНА И АКТИВАЦИИ ВОДЫ....307

ПБ-2 **Ахундова К.М.,** Юнусов С.Г., Ибрагимова М.Дж., Заманова Л.С., Ибрагимова З.М., Маммадов А.М.
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПАО МАСЛЯНЫХ ФРАКЦИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ АЛЮМИНИЙ ХЛОРОРГАНИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ 309

ПБ-3 **Бабаева Ф.А.,** Ахмедова Р.Г., Абасов С.И.
МЕХАНИЗМ АКТИВАЦИИ МЕТАНА НА M,ReO_x/Al_2O_3 КАТАЛИЗАТОРАХ 311

ПБ-4 Бухаркина Т.В., **Вержичинская С.В.,** Горбунов М.А., Баскакова А.В.
ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ КАК ВОЗМОЖНОСТЬ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ОКИСЛЕНИИ АЛКИЛАРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ 313

ПБ-5 **Веселинович А.М.,** Подпорина Д.А., Воронов М.С., Козловский Р.А., Сапунов В.Н., Сучков Ю.П.
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСШИХ АЛКИЛМЕТАКРИЛАТОВ НА ОСНОВЕ ВЫСШИХ ЖИРНЫХ СПИРТОВ 315

ПБ-6 **Вяльцев А.В.,** Сундукова Н.Г., Шабельская Н.П.
ИЗУЧЕНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ФЕРРИТ КОБАЛЬТА (II) / БИОЧАР 317

ПБ-7 **Гаспарян М.Д.,** Грунский В.Н., Мочалов Ю.С., Сальникова О.Ю., Дубко А.И., Савчиц С.М., Обухов Е.О.
УСТАНОВКА ДЛЯ КОМПЛЕКСНОГО УЛАВЛИВАНИЯ ЛЕТУЧИХ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА И НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ОКСИДОВ АЗОТА 319

ПБ-8 **Дубровский В.С.**, Козловский И.А., Капнина О.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННО-КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ БИОЭТАНОЛА В ПРИСУТСТВИИ КАТАЛИЗАТОРА НТК-4 321

ПБ-9 **Зарубин П.И.,** Сапунов В.Н., Луганский А.И.
МОДИФИКАЦИЯ БИТУМНОГО ВЯЖУЩЕГО МАЛЕИНОВЫМ АНГИДРИДОМ И ПОЛИОЛЕФИНАМИ 323

ПБ-10 **Зибарева И.В.,** Альперин Б.Л.
ДВАДЦАТЬ ПЯТЬ КОНФЕРЕНЦИЙ «ХимРеактор»: БИБЛИОМЕТРИЧЕСКАЯ СТАТИСТИКА ЗА 60 ЛЕТ 325

ПБ-11 **Ибатов Я.А.,** Качаева А.С., Горбунова С.А., Воронов М.С., Сапунов В.Н., Сучков Ю.П., Староверов Д.В.
ОСОБЕННОСТИ ОСНОВНО-КАТАЛИТИЧЕСКОГО АЛКОГОЛИЗА МЕТИЛОВОГО ЭФИРА КАПРОНОВОЙ КИСЛОТЫ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЕМ 327

ПБ-12 Князева А.Г., **Поболь И.Л.**
ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В 3D ТЕХНОЛОГИЯХ 329

ПБ-13 **Ковалева С.А.,** Григорьева Т.Ф., Веремей И.С., Разумов Н.Г., Девяткина Е.Т., Восмериков С.В., Ридель Н.С., Ляхов Н.З.
МЕХАНОХИМИЧЕСКИЙ *IN SITU* СИНТЕЗ КАРБИДА ТИТАНА В МАТРИЦЕ ТИТАНА 330

ПБ-14 **Ковалева С.А.,** Григорьева Т.Ф., Жорник В.И., Веремей И.С., Девяткина Е.Т., Восмериков С.В.
СТРУКТУРА И ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ *IN SITU* МЕХАНОСИНТЕЗИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ TiC/30Cu 332

ПБ-15 **Королев А.Н.**, Николаев А.И., Пешнев Б.В., Антонюк С.Н.
СРАВНЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КАВИТАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ В ГИДРОДИНАМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ И АППАРАТЕ ВИХРЕВОГО СЛОЯ 334

ПБ-16 **Лаврентьев В.А.,** Порукова Ю.И., Самойлов В.О., Максимов А.Л.
СРАВНЕНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ Cu/Cr_2O_4 И МЕДНЫХ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ ГИДРОГЕНОЛИЗА ГЛИЦЕРИНА 336

ПБ-17 **Лайлов С.В.,** Василишин М.С., Карпов А.Г., Иванов О.С.
ЦЕНТРОБЕЖНЫЙ МАССООБМЕННЫЙ АППАРАТ В ПРОИЗВОДСТВЕ ПРИСАДКИ К ДИЗЕЛЬНОМУ ТОПЛИВУ 338

ПБ-18 **Мамедова М.Т.**, Абасов С.И., Искендерова А.А., Зарбалиев Р.Р., Сулейманова Т.И., Насибова А.Р.
ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ ДЕГИДРИРОВАНИЕ ЭТИЛБЕНЗОЛА В СТИРОЛ В ПРИСУТСТВИИ CO_2 НА КАТАЛИЗАТОРАХ 1%ZrO_2,2%MgO/Al_2O_3 340

ПБ-19 **Назарова Г.Ю.,** Самсонов И.А., Ивашкина Е.Н., Антонов А.В.
ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМА РАБОТЫ РЕАКТОРНО-РЕГЕНЕРАТОРНОГО БЛОКА ПРОЦЕССА КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА В УСЛОВИЯХ РАСШИРЕНИЯ РЕСУРСОВ СЫРЬЯ 342

ПБ-20 Мамедова М.Т., **Исаева Е.С.,** Иманова А.А., Насирова Ф.М., Челебова К.С.
ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ГАЗОВОГО БЕНЗИНА И ЕГО СМЕСИ С ПОПУТНЫМИ ГАЗАМИ В ВЫСОКООКТАНОВЫЕ КОМПОНЕНТЫ БЕНЗИНА 344

ПБ-21 **Мик И.А.,** Кленов О.П., Дик П.П., Голубев И.С., Петров Р.В., Решетников С.И., Носков А.С.
CFD-ОПТИМИЗАЦИЯ ФОРМЫ ГРАНУЛ КАТАЛИЗАТОРА В ЗАЩИТНОМ СЛОЕ РЕАКТОРА ГИДРООЧИСТКИ 346

ПБ-22 **Мырзалиева С.К.,** Акильбекова Ш.К., Даулетбай А.Д.
ФАКТОРЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ПОЛНОТУ СЖИГАНИЯ НИЗКОСОРТНОГО ТОПЛИВА 348

ПБ-23 **Петров Р.В.,** Решетников С.И., Носков А.С.
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРООЧИСТКИ ДИЗЕЛЬНОЙ ФРАКЦИИ С УЧЁТОМ ДИНАМИКИ ИЗМЕНЕНИЯ АКТИВНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА В РЕЗУЛЬТАТЕ СОРБЦИИ КРЕМНИЯ 350

ПБ-24 **Севостьянова Н.Т.,** Баташев С.А.
ВЛИЯНИЕ ДИФОСФИНОВЫХ ПРОМОТОРОВ НА СКОРОСТЬ И СЕЛЕКТИВНОСТЬ МЕТОКСИКАРБОНИЛИРОВАНИЯ ОКТЕНА-1 352

ПБ-25 Севостьянова Н.Т., **Баташев С.А.**
ВЛИЯНИЕ РЕАГЕНТОВ НА СКОРОСТЬ И СЕЛЕКТИВНОСТЬ МЕТОКСИКАРБОНИЛИРОВАНИЯ ОКТЕНА-1 354

РЕКЛАМА 357

СПИСОК УЧАСТНИКОВ 361

СОДЕРЖАНИЕ 373

Научное издание

XXVI МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ХИМИЧЕСКИМ РЕАКТОРАМ
ХимРеактор-26

Под редакцией: член-корр. РАН, д.т.н., профессора Носкова Александра Степановича,
д.т.н. Загоруйко Андрея Николаевича

Тезисы подвергнуты мягкой редакторской правке,
ответственность за содержание тезисов остаётся за авторами

Составитель: Т.В. Замулина
Компьютерная обработка: Н.А. Цыганкова, Т.О. Барсуков
Обложка: Е.К. Казакова, Е.В. Бобаткова

Издатель:
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук»
630090, Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 5, ИК СО РАН
http://catalysis.ru
E-mail: bic@catalysis.ru Тел. (383) 330-67-71

Электронная версия:
Издательский отдел Института катализа СО РАН
E-mail: pub@catalysis.ru Тел. (383) 326-97-15
Объём: 10 МБ. Подписано к размещению: 20.10.2025.

Адрес размещения:
http://catalysis.ru/resources/institute/Publishing/Report/2025/CR-26_2025.pdf

Системные требования: i486; Adobe® Reader® (чтение формата PDF)
ISBN 978-5-906376-65-7