

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра «Химическая технология переработки нефти и газа»

Лаборатория «Перспективные технологии переработки возобновляемого
органического сырья и аккумуляирования водорода»

**ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНЫЙ СИМПОЗИУМ С МЕЖДУНАРОДНЫМ
УЧАСТИЕМ**

**«СОВРЕМЕННЫЕ ВЫЗОВЫ, СТОЯЩИЕ ПЕРЕД ХИМИЕЙ,
НЕФТЕХИМИЕЙ И НЕФТЕПЕРЕРАБОТКОЙ»**

САМАРА
27 сентября 2019

ПРОГРАММА

27 сентября

9-50 10-00	Открытие симпозиума
10-00 11-00	 Веревкин Сергей Петрович PhD. Prof., Department of Physical Chemistry, University Rostock, Germany « Liquid Organic Hydrogen Carriers: an upcoming alternative to conventional technologies. Thermochemical studies » <i>Аннотация:</i> Organic heteroaromatics as liquid hydrogen storage has been considered as an auspicious alternative to conventional technologies. Due to the very low density of H₂, practical storage and recovery of H₂ has been a challenge in utilizing H₂ as an alternative fuel. An auspicious alternative to conventional approach to hydrogen storage for fuel-cell vehicles is to use organic compounds that have a high capacity to bind hydrogen covalently. Storage and release of the hydrogen is achieved by hydrogenation and dehydrogenation of the organic compounds, and these reactions are done in the presence of a catalyst. For transportation applications, the H₂ storage (hydrogenation) would be done off-board the vehicle. A system based on the catalytic hydrogenation/dehydrogenation reactions of N-substituted aromatics are the most promising as the new class of the liquid organic hydrogen carriers (LOHC). Enthalpies of formation of the different LOHC as well as their fully hydrogenated derivatives were measured by using combustion calorimetry. Vaporization enthalpies for these compounds were derived from vapour pressure temperature dependence measured by transpiration. Enthalpies of formation of the gaseous LOHC were derived and validated with the high-level quantum chemical calculation. Vapor pressures of the liquid LOHC at practically relevant temperature 400 K were assessed from the new experimental data. It has turned out that these vapor pressures were low enough to fulfill the basic requirement for an LOHC. A challenging part of the project has been thermodynamic analysis and selection of liquid organic heteroaromatics for hydrogen storage as an auspicious alternative to conventional technologies.
11-00 11-40	 Мебель Александр Моисеевич к.х.н., главный научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории «Физика и химия горения» ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», г. Самара «Механизмы образования полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) и сажи в горении» <i>Аннотация:</i> В презентации будут рассмотрены результаты квантово-химических расчетов поверхностей потенциальной энергии в сочетании с расчетами констант скоростей реакций методом РРКМ-Кинетического Уравнения, проведенными с целью раскрытия механизмов реакций роста полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) при температурах и давлениях, присущих пламенам горения, а также богатым углеродом околозвездным и межзвездным средам. Мы опишем наши недавние работы, направленные на разработку всеобъемлющего механизма роста ПАУ, и рассмотрим возможные пути образования ПАУ с тремя и четырьмя кольцами, а также механизмы отрыв водорода - добавление ацетилена (НАСА) и отрыв водорода - добавление винилацетилена (НАВА) для роста более крупных ПАУ. Результаты расчетов будут сопоставлены с экспериментальными данными групп Р. Кайзера (Гавайский университет в Маноа) и М. Ахмеда (Национальная лаборатория им. Лоуренса Беркли), использующих пиролизический химический реактор с идентификацией продуктов с помощью фотоионизационной масс-спектрометрии с использованием квазинепрерывного перестраиваемого вакуумного ультрафиолетового света от синхротрона в LBNL. Будет обсуждаться взаимодополняющий характер механизмов НАСА и НАВА и их роль в создании двумерных наноструктур графенового типа и трехмерных углеродистых наноструктур, включающих звенья кораннулена, содержащие пятичленные кольца. Кроме того, мы рассмотрим и обсудим возможные механизмы возникновения частиц углерода (сажи) посредством химической димеризации молекул ПАУ.
11-40 12-00	Кофе-брейк

12-00 12-40	 Гаркушин Иван Кириллович д.х.н., профессор, заведующий кафедрой «Общая и неорганическая химия» ФГБОУ ВО «СамГТУ» «Аккумуляция тепла» <i>Аннотация:</i> В докладе будут рассмотрены следующие вопросы: - аккумуляция энергии ветра, солнечной энергии, энергии приливов и отливов; - аккумуляция тепла в системах теплоснабжения и терморегулирования; - теплоаккумулирующие материалы.
12-40 13-00	 Портнова Светлана Валерьевна к.х.н., доцент кафедры «Технология органического и нефтехимического синтеза» ФГБОУ ВО «СамГТУ», г. Самара «Исследование термодинамических характеристик сорбции и испарения соединений, получаемых на основе возобновляемого природного сырья - сложных эфиров гидроксикарбоновых кислот» <i>Аннотация:</i> Создание новых энергоэффективных и ресурсосберегающих технологий - актуальная тенденция развития современной химической промышленности. Одним из направлений развития в данной области является поиск новых веществ и материалов на основе возобновляемых природных источников. Значительное количество современных исследований посвящено вопросам получения гидроксикарбоновых кислот, содержащих одну или две карбоксильные группы, из природных источников с помощью биотехнологий. Особый интерес к данным кислотам обусловлен возможностью получения на их основе биоразлагаемых полимеров для медицины и пищевой промышленности. Интересными объектами для изучения являются сложные эфиры, используемые в технологии выделения и очистки, соответствующих гидроксикарбоновых кислот. В работе рассматриваются результаты систематического изучения термодинамических характеристик сорбции, испарения, теплоемкость жидкости сложных эфиров гидроксикарбоновых кислот, содержащих одну или две карбоксильные группы (гликолевая, молочная, яблочная) и спиртов C₁-C₅ нормального строения.
13-00 14-00	Обед
14-00 14-40	 Буланова Анджела Владимировна д.х.н., профессор кафедры «Физическая химия и хроматография» ФГАОУ ВО "Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева", г. Самара «Адсорбенты и катализаторы гидрирования на основе мезопористых структурированных материалов, допированных диспрозием и модифицированных атомами некоторых переходных металлов» <i>Аннотация:</i> Рассмотрена методика синтеза мезоструктурированных материалов (МСМ), обеспечивающая оптимальные параметры поверхности при использовании их в качестве адсорбентов и носителей для катализаторов. Оценены адсорбционные и каталитические свойства МСМ, допированных диспрозием и модифицированных атомами переходных металлов, в реакциях гидрирования бензола и его производных
14-40- 15-00	Riko Siewert PhD student, Department of Physical Chemistry, University Rostock, Germany «Thermodynamic analysis for the optimization of the synthesis of Guerbet alcohols»
15-00 16-20	Доклады молодежной секции. <i>Продолжительность доклада до 15 мин. +5 мин. вопросы</i>
16-20 18-00	<i>Свободное время+ Ужин</i>
18-00	Культурная программа