

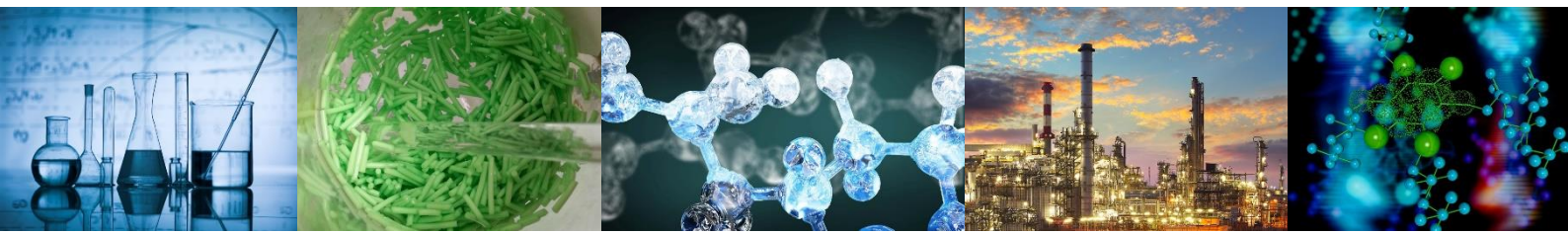
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ САМАРСКОЙ ОБЛАСТИ  
САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
Лаборатория «Перспективные технологии переработки возобновляемого  
органического сырья и аккумуляирования водорода»  
Кафедра «Химическая технология переработки нефти и газа»

*ШКОЛА-СЕМИНАР*

**«Физико-химические методы анализа в химии и  
химической технологии»**

**ПРОГРАММА**

*САМАРА*  
27-28 сентября 2018



**27 сентября**

9:50 Открытие Школы-семинара

### **Мастер-классы ведущих ученых**

10:00- **Константин Игоревич Маслаков**

11:10 *(к.ф.-м.н., старший научный сотрудник кафедры физической химии, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)*

#### **«Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия для исследования катализаторов»**

На занятии участники познакомятся с физическими основами метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Будут обсуждаться возможности метода для количественного анализа и определения химического состояния элементов на поверхности катализаторов. На практических примерах продемонстрируются основные проблемы, возникающие при получении, обработке и интерпретации РФЭС спектров.

11:10-  
12:20

**Евгений Александрович Паукштис**

*(д.х.н., с.н.с., главный научный сотрудник лаборатории спектральных методов, Институт катализа им. Г.К. Борескова, г. Новосибирск)*

#### **«Применение ИК-Фурье спектроскопии для исследования кислотности катализаторов нефтепереработки»**

Метод инфракрасной спектроскопии поверхности и адсорбированных молекул был одним из ключевых при изучении природы каталитического действия катализаторов нефтепереработки еще с конца 40-х годов прошлого века. На основании данных полученных этим методом обнаружены Льюисовские и Бренстедовские кислотные центры на поверхности оксидов, алюмосиликатов и цеолитов.

Основой применения метода является метод спектральных зондов, хорошо развитый в настоящее время и использующийся для измерения природы, концентрации и силы кислотных центров. Изучение катализаторов, содержащих металлы платиновой группы.

Особенности и современное оборудование, а также методики изучения кислотности поверхности в начале 21 века. Спектроскопия диффузного отражения.

Практические результаты применения ИК-Фурье спектроскопии для исследования катализаторов переработки нефтяного сырья.

Перспективы развития метода ИК-Фурье спектроскопии для исследования и совершенствования катализаторов нефтепереработки.

12:20-13:40 **Обед**

13:40- **Павел Анатольевич Никульшин**  
14:50 Заместитель генерального директора по науке ВНИИ НП, г. Москва. д.х.н.  
Руководитель направлений «Разработка новых и совершенствование существующих катализаторов гидропроцессов». Признанный специалист в области гидроочистки.

**«Особенности переработки возобновляемого органического сырья. Высокий потенциал триметаллических каталитических систем»**

Будут рассмотрены актуальные вопросы переработки возобновляемого органического сырья, основные способы вовлечения такого сырья в современную схему нефтепереработки, требования к катализаторам и технологии для эффективного преобразования нефтяного и органического сырья в товарные нефтепродукты.

14:50- **Гульнара Маратовна Шайдуллина**  
16:00 (к.х.н., руководитель направления «Хроматография и масс-спектрометрия», LECO Russia Separation Science, г. Москва)

**«Двумерная газовая хроматография с масс-спектрометрией высокого разрешения для решения задач нефтепереработки и нефтехимии»**

Современные аналитические инструменты дают возможность на новом уровне решать задачи, стоящие перед нефтехимией и нефтепереработкой. Полученные результаты демонстрируют, что увеличение хроматографической емкости системы благодаря принципу двумерной хроматографии, получение исчерпывающей информации из масс-спектров высокого разрешения благодаря высокоскоростным времяпролетным масс-анализаторам, ускорение обработки полученных результатов благодаря применению специализированного программного обеспечения для визуализации больших объемов данных оказываются уникальными преимуществами при анализе сложных многокомпонентных объектов, какими являются нефть и продукты ее переработки.

*16:00-16:20 Перерыв*

16:20- **Практикум**  
18:00 **«Основные этапы планирования научного исследования»**  
*Доктор Павел Анатольевич Никульшин*

28 сентября

## Мастер-классы ведущих ученых

10:00-11:30 **Сергей Петрович Веревкин**  
(PhD. Prof., Department of Physical Chemistry, University Rostock, Germany)

### **«In-Silico assisted strategy for evaluation and prediction of thermodynamic properties of pure molecular and ionic compounds»**

Science and engineering require accurate thermodynamic property information. As a rule, modern databases only collect available data from the literature. What about a quality of these data? Are they consistent and reliable? Structure-Property relations are very helpful in this context to get insight in to the consistency of the available numbers. Short overview of numerous thermochemical techniques maintained at the University of Rostock will be given. Combination of the experimental and the high-level first-principles method seems to be the best way for critical evaluation of thermodynamic data for energetic molecular compounds as well as for ionic liquids. The talk will be given at a level suitable for most chemists.

11:30-13:00 **Арам Лусегенович Бугаев**  
(PhD, младший научный сотрудник МИЦ «Интеллектуальные материалы», Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону)

### **«Спектроскопия рентгеновского поглощения XANES и EXAFS для *in situ* и *operando* исследования активных центров в катализаторах»**

Спектроскопия рентгеновского поглощения - это мощный инструмент для исследования атомной и электронной структуры вещества, широко применяемый в различных областях, в том числе и в катализе. Метод позволяет исследовать вещества в различных агрегатных состояниях и не требует наличия в материале дальнего порядка. Использование современных источников синхротронного излучения позволяет проводить измерения в режиме *in situ* и *operando*, с целью получения фундаментальных взаимосвязей между структурой и каталитической активностью. В докладе будет приведен ряд примеров исследования активных центров металлов в нанокатализаторах, наиболее широко отражающий современные возможности спектроскопии рентгеновского поглощения.

13:00-14:30 **Обед**

14:30-16:00 Экскурсия по Лаборатории «Перспективные технологии переработки возобновляемого органического сырья и аккумулялирования водорода» и кафедре «ХТПНГ»



При поддержке



Правительство Российской Федерация,  
постановление № 220, грант 14.Z50.31.0038



Министерство Образования и Науки Самарской Области



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Самарский государственный технический университет»