

УДК 54
ББК 24я43
Л75

Л75 **ЛОМОНОСОВСКИЕ ЧТЕНИЯ. СЕКЦИЯ «ХИ-
МИЯ».** – Москва 2020 – Мб. [Электронное издание]

ISBN 978-5-00171-534-4

ISBN 978-5-00171-534-4

УДК 54
ББК 24я43

© Авторы, 2020



ЛОМОНОСОВСКИЕ ЧТЕНИЯ СЕКЦИЯ «ХИМИЯ»

Типография «РПК Медиа холдинг»
115093, Москва, Партийный пер., д. 1, к.58
Тел.: (495) 205-37-25, (812) 642-82-08
Подписано к использованию 27.10.2020.
Объем Мбайт. Электрон. текстовые данные. Заказ 780.
**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИ-
ВЕРСИТЕТ**
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ



ЛОМОНОСОВСКИЕ ЧТЕНИЯ

СЕКЦИЯ «ХИМИЯ»

26 и 30 октября 2020 г.

ПРОГРАММА ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Москва 2020 год

**ПРОГРАММА
СЕКЦИЯ ХИМИЯ**

Очно-заочная сессия

26 октября 2020 г., 09.30

Химический факультет, ауд. 337

9.30 – 10.00 *Каталитический синтез кумола на иерархических цеолитах со структурой MWW.*

м.н.с. Шкуропатов А.В.

10.00 – 10.30 *Новые экспериментальные подходы к определению структуры и локализации активных центров в высококремнистых цеолитах методом спектроскопии ЯМР твёрдого тела.*

в.н.с., к.х.н. Колягин Ю.Г. м.н.с. Засухин Д. С.,
к.х.н. Якимов А. В., г.н.с., проф., д.х.н. Иванова И. И

10.30 – 11.00 *Сульфатированные мезопористые материалы как катализаторы окисления модельных серосодержащих соединений нефтяного происхождения.*

н.с., к.х.н. Поликарпова П.Д., Шлёнова А.О., доц.,
к.х.н. Акопян А.В.

11.00 – 11.30 *Кобальтовые катализаторы, нанесённые на углеродные нанотрубки, для процесса Фишера-Тропша.*

с.н.с., к.х.н. Черняк С.А.

11.30 – 12.00 *Направленный синтез ароматических карбоксилатов лантанидов для создания люминесцентных материалов на их основе.*

с.н.с., д.х.н. Уточникова В.В.

12.00 – 12.30 *Спектроскопия ^{31}P ЯМР ВМУ адсорбированных молекул алкилфосфиноксидов для исследования кислотности цеолитных катализаторов.*

м.н.с. Засухин Д.С., Костюков И.А.

30 октября 2020 г., 09.30

Химический факультет, ауд. 337

9.30 – 10.00 Современные вычислительные методы моделирования механизмов ферментативных реакций и их ингибирования.

в.н.с., д.х.н. Хренова М.Г., г.н.с., д.ф.-м.н. Григоренко Б.Л., м.н.с., к.х.н. Кулакова А.М., проф., д.х.н. Немухин А.В.

10.00 – 10.30 Развитие методологии хромато-масс-спектрометрического анализа для выявления продуктов трансформации отравляющих веществ в биологических объектах и объектах окружающей среды.

в.н.с., д.х.н., Родин И. А.

10.30 – 11.00 Механизмы формирования и каталитического действия активных центров цеолитных молекулярных сит, как основа создания высокоэффективных катализаторов.

г.н.с., проф., д.х.н. Иванова И.И.

11.00 – 11.30 ***Фотонно-кристаллические структуры на основе анодных оксидов алюминия и титана.***

н.с., к.х.н. Кушнир С.Е., Комарова Т.Ю., Садыков А.И., н.с., к.х.н. Саполетова Н.А., н.с., к.х.н. Росляков И.В., в.н.с., к.х.н. Напольский К.С.

11.30 – 12.00 ***Нуклеиново-белковое узнавание: на пути к аптамерам – «химическим антителам»***

проф., д.х.н. Копылов А.М., доц., к.х.н. Завьялова Е.Г. проф., д.х.н. Головин А.В.

12.00 – 12.30 ***Низко- температурная теплоемкость и термодинамические свойства 2-метилфурана.***

асп. Ильин Д. Ю., в.н.с., доц., к.х.н. Дружинина А.И., в.н.с., доц., д.х.н. Дорофеева О.В.

12.30 – 13.00 ***Функциональные материалы на основе фталоцианинов и их аналогов: направленный синтез и применение.***

проф., д.х.н. Томилова Л.Г., н.с., к.х.н. Дубинина Т.В.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ СТРУКТУРЫ И ЛОКАЛИЗАЦИИ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ В ВЫСОКОКРЕМНИСТЫХ ЦЕОЛИТАХ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР ТВЁРДОГО ТЕЛА

Колягин Ю.Г.^{1,2}, Засухин Д. С.¹, Якимов А. В.¹, Иванова И.
И.^{1,2}

¹*Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова*

²*Институт нефтехимического синтеза имени
А.В.Топчиева РАН*

Спектроскопия ЯМР твёрдого тела является ключевым методом в изучении структуры цеолитов и цеолитоподобных материалов. В данной работе, на примере цеолитов Si-BEA и Sn-BEA, продемонстрированы возможности по использованию 1D и 2D спектроскопии ЯМР для установления локализации атомов в структуре. Эта информация имеет огромное значения как для понимания работы этих материалов в катализе, так и при разработке новых методик направленного синтеза и модифицирования цеолитов.

Использование модифицированной методики 2D INADEQUATE на ядрах ^{29}Si с введением дополнительных блоков «композитного рефокусирования» (compozite refocusing) и «постоянного времени детектирования» (constant time) для

цеолита Si-BEA позволило однозначно отнести сигналы в спектре ^{29}Si ЯМР ВМУ к соответствующим кристаллографическим позициям в структуре BEA. На основе этой информации, впервые, удалось количественно определить содержание трёх различных полиморфов (А, В и С) в исследуемом образце цеолита методом спектроскопии ЯМР.

Другим примером, является использование детектирования на основе последовательности Кара-Парселла-Мейбума-Гилла в спектрах ЯМР ВМУ на ядрах ^{119}Sn для изучения оловосодержащих высококремнистых цеолитов. Это подход позволил сократить время регистрации спектра более чем в 1000 раз и, таким образом, сделал возможным использование спектроскопии ЯМР для образцов с природным содержанием изотопов Sn. Сочетание КПМГ-детектирования с методиками ^{119}Sn 2D MAT и ^1H - ^{119}Sn REDOR позволило установить структуру активных центров, а также их локализацию в соответствующих кристаллографических позициях структуры BEA.

Проведенные исследования показали, что использование сложных спектральных ЯМР методик на ядрах ^{29}Si и ^{119}Sn позволяет получить детальную информацию о структуре и локализации активных центров в цеолитных материалах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 20-13-00203).