

## ТЕРМОДИНАМИКА И КИНЕТИКА ГИДРИРОВАНИЯ-ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ И АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Пимерзин А.А.,<sup>а</sup> Веревкин С.П.,<sup>а,б</sup> Пимерзин Ал.А.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Самарский государственный технический университет, Самара, Россия  
e-mail: pimerzin.aa@samgtu.ru

<sup>б</sup> Институт химии, Университет г Росток, Германия

Бурное развитие возобновляемой энергетики создает серьезные предпосылки к постепенному замещению традиционных энергоносителей возобновляемой энергией (ВЭ). Перспективы использования альтернативных источников энергии непосредственно связаны с поиском эффективных способов накопления, хранения и высвобождения ВЭ. Успешное решение этой проблемы диктует применение нового энергоносителя – водорода. Одной из наиболее эффективных технологий хранения и последующего использования ВЭ является применение органических соединений, способных аккумулировать водород, обратимо образуя с ним химические связи. Таким образом, цикл «аккумуляция – генерирование водорода», реализуемый с помощью органических жидких носителей водорода (ЖНВ), может повторяться многократно.

В качестве перспективных органических ЖНВ хорошо зарекомендовали себя ароматические соединения и азотсодержащие гетероциклы. Как правило, химические реакции гидрирования-дегидрирования (ГИД-ДГИД) для этих классов соединений являются обратимыми и протекают в присутствии катализаторов. Очевидно, что выбор предпочтительных ЖНВ должен основываться на термодинамическом анализе системы, состоящей из двух форм субстратов – насыщенной и ненасыщенной водородом.

В настоящей работе обобщены результаты исследований термодинамики и кинетики реакций ГИД-ДГИД ароматических и азотсодержащих соединений, выполненных в лаборатории перспективных технологий Самарского государственного технического университета и литературные данные из этой области. Информация по химическому равновесию реакций гидрирования-дегидрирования сопоставлена с надежными термохимическими сведениями и теоретическими расчетами с применением композитных квантово-химических методов. Показана хорошая согласованность результатов. Выработаны надежные подходы прогнозирования термодинамических характеристик реакций ГИД-ДГИД неизученных соединений, представляющих интерес в качестве перспективных ЖНВ. Полученные результаты обсуждены с точки зрения концепции «структура-свойство».

*Исследования выполнены при поддержке Правительства Российской Федерации, постановление № 220 от 9 апреля 2009, грант 14.Z50.31.0038*