

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U002523

Державний реєстраційний номер: 0119U101755

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-02-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Дослідження кінетики піролізу лігнінових компонент лігноцелюлози на поверхні нанорозмірних матеріалів з метою отримання сполук ароматичного ряду

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, м. Київ, 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444229632

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 120.000
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Створення способів спрямованого каталітичного піролізу біомаси з метою одержання функціональних хіральних та ароматичних сполук

Назва роботи англійською:

Creation of methods for the directed catalytic pyrolysis of biomass in order to obtain functional chiral and aromatic compounds

Реферат українською:

На основі даних in situ FT-IR спектроскопії, ТПД МС та квантово-хімічних розрахунків встановлено, що у взаємодії з поверхнею каталізатора беруть участь як карбоксильна група, так і групи ароматичного кільця (ОН-, ОСН₃-). Встановлено структуру поверхневих комплексів досліджених модельних сполук лігніну, діапазони та продукти їх термоперетворень. Розраховано кінетичні параметри (Т_{макс}, n, E_а, p₀ та ΔS_а) утворення основних продуктів піролізу (4-вінілгваякол, гваякол, фенол, крезол, нафталін, метилнафталін, толуол, бензол, тощо) та запропоновано ймовірні механізми їх утворення. Виявилося, що основні процеси каталітичного піролізу досліджених модельних сполук лігніну характеризуються негативними змінами ентропії активації. Це свідчить про те, що термічні перетворення відбуваються через високовпорядковані перехідні стани на поверхні каталізатора.

Реферат англійською:

Based on the data of in situ FT-IR spectroscopy, TPD MS, and quantum chemical calculations, it was established that both the carboxyl group and aromatic ring groups (OH-, OCH₃-) participate in the interaction with the catalyst surface. The structure of the surface complexes of the investigated model compounds of lignin, the ranges and products of their thermal transformations were established. The kinetic parameters (T_{max}, n, E_a, p₀ and ΔS_a) of the formation of the main pyrolysis products (4-vinylguaiacol, guaiacol, phenol, cresol, naphthalene, methylnaphthalene, toluene, benzene, etc.) were calculated and probable mechanisms of their formation were proposed. It turned out that the main processes of catalytic pyrolysis of the studied model compounds of lignin are characterized by negative changes in the entropy of activation. This indicates that thermal transformations occur through highly ordered transition states on the catalyst surface.

Індекс УДК: 544, 544.47; 66.092-977; 547-326

Коди тематичних рубрик: 31.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Картель Микола Тимофійович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

IX. Бібліографічний опис

Kulik, T.; Nastasiienko, N.; Palianytsia, B.; Ilchenko, M.; Larsson, M. Catalytic Pyrolysis of Lignin Model Compound (Ferulic Acid) over Alumina: Surface Complexes, Kinetics and Mechanisms. Catalysts 2021, 11(12), 1508, 1-24. This article belongs to the section "Biomass Catalysis" and to the Special Issue "Catalytic Fast Pyrolysis for Biofuels and Sustainable Chemicals". (IF=4.146).

Nastasiienko, N., Kulik, T., Palianytsia, B., Laskin, J., Cherniavska, T., Kartel, M. and Larsson, M. Catalytic Pyrolysis of Lignin Model Compounds (Pyrocatechol, Guaiacol, Vanillic and Ferulic Acids) over Nanoceria Catalyst for Biomass Conversion. Applied Sciences, 2021, 11(16), 7205, 1-26. (IF=2. 679)

Nastasiienko, N.; Kulik, T.; Palianytsia, B.; Larsson, M.; Cherniavska, T.; Kartel, M. Decarboxylation of p-Coumaric Acid during Pyrolysis on the Nanoceria Surface. Colloids Interfaces, 2021, 5, 48, 1-12. Open Access

Т.В. Кулик, Н.С. Настасієнко, Б.Б. Паляниця, К.С. Кулик, М.Т. Картель. Каталітичний піроліз лігноцелюлозної біомаси та її модельних фенольних компонентів на поверхні нанорозмірних оксидів. с. 241-254. // Нові функціональні речовини і матеріали хімічного виробництва / НАН України; Наукова рада цільової програми наукових досліджень НАН України «Нові функціональні речовини і матеріали хімічного виробництва». — Київ: Академперіодика, 2021. — 332 с.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Картель Микола Тимофійович

д. х. н., 02.00.04

Перелік осіб-виконавців

Кулик Тетяна Володимирівна
(д.х.н.)

Настасієнко Наталія Сергіївна
(к. х. н., 01.04.18)

Паляниця Борис Борисович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Дацюк Андрій Михайлович

Телефон

+38 (044) 422-96-32

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна