Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U007453

Державний реєстраційний номер: 0113U002858

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-11-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вивчення кінетики розкладу пероксиду гідрогену, окиснення DBE і CH повітрям у присутності наданих російською стороною комплексів 3d металів (8-10 зразків), в т.ч. відповідних бінарних сумішей. Участь у Міжнародній Конференції "Organometallic and Coordination Chemistry: Fundamental and Applied Aspects", Нижній Новгород, Росія

Початок етапу: 06.2013

Закінчення етапу: 09.2013

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (048) 766-20-44: факс 048 765-96-02

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державне агентство з питань електронного урядування України

Код за ЄДРПОУ: 37471818

Місцезнаходження: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2071730

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 52 - договір з вітчизняною організацією (органами місцевої ради, фондом, асоціацією, концерном тощо)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 40

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Гомо- і гетерометалічні інтермедіати та продукти взаємодії моно- та біядерних піразолатних комплексів 3d металів з відповідними карбоксилатами, як каталізатори (моделі каталізаторів) утворення та перетворень гідропероксидів

Назва роботи англійською:

Homo- and heterometallic intermediates and products of 3d metals mono- and binuclear pyrazolate complexes intraction with the corresponding carboxylates, as catalysts (models of catalysts) of hydroperoxides formation and transformations.

Реферат українською:

Досліджено кінетику розкладу гідропероксида циклогексену в присутності гомо- і гетеролігандних півалатних комплексів кобальту(II) з нуклеарністю 1-4: [CoPiv2]n, n = 1,2; [Co2(Piv)2L2(Hdmpz)4](otf)2(thf)n, L = OH2, MeCN, n = 1,2; Co4LnPiv6(ROH)6, R=Et, Pr, L=OH, OMe, n=2,4). Встановлено слідуючий ряд каталітичної активності комплексів залежно від нуклеарності: Co1<Co2<Co3<Co4. Реакція задовільно описується рівнянням другого порядку, порядок реакції по каталізатору складає від 0,4 до 0,9. У присутності комплексів складу CoL2(Hdmpz)2 (L = OOCPh, (CF3)2pz); Con(dmpz)m(Hdmpz)2L2 (L = Piv, OAc, n = 2,3, m = 2,4); Cun(Piv)n(Hdmpz)mL (L = MeCN, (MeOH)2); (Piv)Cu((CF3)2pz)2(Piv)Cu(PivH·NEt3) і Cu3(OH)(pz)3(Piv)(PivOH NEt3)(Hpz)(PivH) в змішаному розчиннику (DBE:діоксан), залежність швидкості розкладу H2O2 від концентрації DBE проходить через максимум. Комплекси Cu менш активні, чим Co. При об'ємному відношенні DBE:діоксан = 1 : 1, біядерний комплекс Co(II) проявляє більшу каталітичну активність порівняно з триядерним комплексом, а піразолатний комплекс складу Co((CF3)2pz)2(Hdmpz)2 активніший, ніж бензоатний комплекс Co(OOCPh)2(Hdmpz)2. У діоксані і його суміші з DBE більшу активність в розкладі H2O2 проявляє біядерний комплекс кобальту(II), тоді як в змішаних розчинниках (діоксан:циклогексан, циклогексен) активніший відповідний триядерний комплекс.Установлено, що основним продуктом окиснення суміші DBE і комплексу складу (CoII)3(OOCBut)6(NEt3)2 в розчині CH2Cl2-бензол (4:1) є гексаядерний комплекс складу [(CoIII)6(?4-O)2(?3-O)2(?-OOCBut)9(OH)2(HOOCBut)](HNEt3)·0.5DBE·0.5C6H6,

Реферат англійською:

Kinetics of the cyclohexene hydroperoxide decomposition at the presence of homo- and heteroligands pivalate complexes of cobalt with nuclearity 1-4: [CoPiv2]n, n = 1,2; [Co2(Piv)2L2(Hdmpz)4](otf)2(thf)n, L = OH2, MeCN, n = 1,2; Co4LnPiv6(ROH)6, R=Et, Pr, L=OH, OMe, n=2,4) is investigated. The row of catalytic activity depending on nuclearity is determined: Co1<Co2 <Co3 <Co4. Reaction is described by the equation of the second order, the reaction order on the catalyst makes from 0,4 to 0,9. In the presence of complexes CoL2(Hdmpz)2 (L = OOCPh, (CF3)2pz); Con(dmpz)m(Hdmpz)2L2 (L = Piv, OAc, n = 2,3, m = 2,4); Cun(Piv)n(Hdmpz)mL, (L = MeCN, (MeOH)2); (Piv)Cu((CF3)2pz)2(Piv)Cu(PivH·NEt3) and Cu3(OH)(pz)3(Piv)(PivOH·NEt3)(Hpz)(PivH) in the mixed solvent (DBE:dioxane), dependence of H2O2 decomposition rate on DBE concentration passes through a maximum. Complexes Cu are less active, than Co. At volume ratio DBE:dioxane = 1:1, the binuclear complex Co(II) shows the greater catalytic activity compared with trinuclear complex and pyrazolate complex Co((CF3)2pz)2(Hdmpz)2 is more active, than benzoate complex Co(OOCPh)2(Hdmpz)2. The binuclear complex Co(II) shows the greater catalytic activity in H2O2 decomposition in dioxane and its mixes with DBE, whereas corresponding trinuclear complex is more active in the mixed solvents (dioxane: cyclohexene, cylohexane). It is established, that the basic product of DBE oxidation with the complex (CoII)3(OOCBut)6(NEt3)2 in a solution CH2Cl2-benzene (4:1) is hexanuclear complex [(CoIII)6(?4-O)2(?3-O)2(?-OOCBut)9(OH)2(HOOCBut)](HNEt3)·0.5DBE·0.5C6H6,

Індекс УДК: 547, 547.098+542.943+547.26.265+547.36.361+547.514.46

Коди тематичних рубрик:31.21

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Камалов Герберт Леонович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Кінетика розкладу гідропероксида циклогексену в присутності гомо- і гетеролігандних півалатних комплексів кобальту(II) з нуклеарністю 1-4: [CoPiv2]n, n = 1,2; [Co2(Piv)2L2(Hdmpz)4](otf)2(thf)n, L = OH2, MeCN, n = 1,2; Co4LnPiv6(ROH)6, R=Et, Pr, L=OH, OMe, n=2,4); кінетика розкладу H2O2 в змішаному розчиннику (DBE:діоксан) у присутності комплексів складу: CoL2(Hdmpz)2 (L = OOCPh, (CF3)2pz); Con(dmpz)m(Hdmpz)2L2 (L = Piv, OAc, n = 2,3; m = 2,4); Cun(Piv)n(Hdmpz)mL (L = MeCN, (MeOH)2); (Piv)Cu((CF3)2pz)2(Piv)Cu(PivH·NEt3) і Cu3(OH)(pz)3(Piv)(PivOH·NEt3)(Hpz)(PivH); результати окиснення киснем повітря суміші дибензилового етеру і комплексу складу (CoII)3(OOCBut)6(NEt3)2 в розчині діхлорметан-бензол

Назва НТП англійською: Kinetics of the cyclohexene hydroperoxide decomposition at the presence of homo- and heteroligands pivalate complexes of cobalt with nuclearity 1-4: [CoPiv2]n, n = 1,2; [Co2(Piv)2L2(Hdmpz)4](otf)2(thf)n, L = OH2, MeCN, n = 1,2; Co4LnPiv6(ROH)6, R=Et, Pr, L=OH, OMe, n=2,4); kinetics of the H2O2 decomposition in the mixed solvent (DBE:dioxane) in the presence of complexes: CoL2(Hdmpz)2 (L = OOCPh, (CF3)2pz); Con (dmpz) m (Hdmpz) 2L2 (L = Piv, OAc, n = 2,3, m = 2,4); Cun (Piv) n (Hdmpz)mL (L = MeCN, (MeOH)2); (Piv)Cu((CF3)2pz)2(Piv)Cu(PivH·NEt3) and Cu3(OH)(pz)3(Piv)(PivOH·NEt3)(Hpz)(PivH); results of dibenzyl ether and complex (CoII)3(OOCBut)6(NEt3)2 oxidation by air oxygen in a solution of dichloromethane-benzene

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Хімічна промисловість

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Встановлено, що основним продуктом окиснення киснем повітря при кімнатній температурі суміші дибензилового етеру (DBE) і комплексу складу (CoII)3(?-OOCBut)6(NEt3)2 в розчині діхлорметан-бензол (4:1) є гексаядерний комплекс складу [(CoIII)6(μ4-O)2(μ3-O)2(μ-OOCBut)9(OH)2(HOOCBut)](HNEt3)·0.5DBE·0.5C6H6, металоостов якого, за даними РСА, містить псевдокубановий фрагмент [Co4(μ4-O)2(μ3-O)2], пов'язаний з двома "периферійними" іонами Co(III). Досліджено кінетику розкладу гідропероксида циклогексену в приусності гомо- і гетеролігандних півалатних комплексів кобальту(II) з нуклеарністю 1-4. Встановлено слідуючий ряд каталітичної активності комплексів залежно від нуклеарності: Co1<Co2<Co3<Co4. Реакція задовільно описується рівнянням другого порядку, порядок реакції по каталізатору складає від 0,4 до 0,9. У присутності вивчених комплексів, в змішаному розчиннику (DBE:діоксан), залежність швидкості розкладу H2O2 від концентрації DBE проходить через максимум, збільшуючись приблизно в 2 рази. Комплекси купруму мен

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає замовник

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Хімічна галузь

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Нефедов С.Е., Кушан Е.В., Яковлева М.А., Чихичин Д.Г., Коцеруба В.А., Левченко О.А., Камалов Г.Л. Биядерные комплексы с геометрией "китайского фонарика" - интермедиаты жидкофазного окисления дибензилового эфира кислородом воздуха в присутствии карбоксилатов меди(II). Коорд. химия. - 2012., Т. 38, № 3. С. 233-240.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Камалов Г.Л.

Коцеруба В.А.

Левченко О.О

Чіхічін Д.Г.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

