

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U006224

Державний реєстраційний номер: 0111U009943

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-02-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Вивчення трансфазно-каталітичного нітрування аренів із застосуванням в якості полярної фази водної ортофосфорної кислоти. Оптимізація умов виділення з коксохімічної сировини індивідуальних продуктів (карбазол, індол тощо)

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2013

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 3116830, 3116830

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР:

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1546.5

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження каталітичних реакцій вуглеводнів та інших продуктів коксохімії з метою пошуку нових шляхів їх застосування

Назва роботи англійською:

Studies of the catalytic reactions of hydrocarbons and other cokechemistry products for the search of new ways of their use

Реферат українською:

Об'єкт дослідження : реакції трансфазного нітрування поліциклічних аренів в системі водна ортофосфорна кислота / нітрит натрію - бензол і процеси трансфазного вилучення карбазолу, індолу тощо з коксохімічних фракцій. Мета роботи: виявлення оптимальних умов ефективного проведення трансфазно-каталітичного нітрування поліциклічних аренів низької, середньої та великої реакційної здатності в новій нітруючій системі водна ортофосфорна кислота - бензол, з'ясування кінетичних особливостей, механізму, складу продуктів, топології реакцій; пошук шляхів оптимізації виділення корисних речовин з коксохімічних фракцій. Методи досліджень : кінетичні методи, газо-рідинна хроматографія (ГРХ), спектроскопія. Виміряно некаталітичні і каталітичні швидкості трансфазного нітрування поліциклічних аренів в системах 86 %, 67 % і 44 % фосфорна кислота / нітрит натрію - бензол. Початкові порядки реакції щодо реагенту знайдено перші, щодо ароматичного субстрату як перші, так і нульові. На основі сучасних макрокінетичних уявлень схарактеризовано топологію досліджених процесів. Конкурентними методами отримано субстратні відношення аренів. Доведено, що діючою формою реагенту є гідратований нітрозоній $\text{NO}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$, субстрат активується у катіон-радикал. За ефективністю трансфазно-каталітичного отримання нітроаренів досліджені системи не поступаються системам із нітратною чи то сірчаною кислотою, вивченим раніше, а то й перевищують їх. Механізми реакцій в системах із фосфорною або сірчаною кислотами уявляються тотожними. Перші досліді щодо трьохфазних систем і нових комбінованих підходів проведення нітрування показали ефективність та інтересну перспективу. Встановлено каталітичну дію четвертинних онієвих солей у системі рідина-тверда фаза для реакції одержання карбазоляту калію. Наведено порівняльну характеристику з краун-етерами. Випробувано антраценову фракцію в якості альтернативної сировини для вилучення антрацену і карбазолу. Встановлено умови попередньої обробки антраценової фракції.

Реферат англійською:

Object of research : phase transfer nitration reactions of polycyclic arenes in system phosphoric acid / sodium nitrite - benzene and processes of phase transfer separation of carbazole, indole, and another components of cokechemistry fractions. Purposes of research: finding of optimal conditions for effective implementation of phase transfer nitration of polycyclic arenes with low, middle, and high reactivities into the novel nitrating systems aqueous phosphoric acid / sodium nitrite - benzene, study of kinetic peculiarities, mechanism, product compositions, topology of reactions; search of optimal areas for separation of components of cokechemistry fractions. Research methods: kinetic methods, gas-liquid chromatography , spectroscopy. The uncatalytic and catalytic rates of phase transfer nitration of polycyclic arenes in systems 86 %, 67 %, and 44 % phosphoric acid / sodium nitrite - benzene were determinated. The initial reaction orders concerning reagent have been found as the first ones, and those concerning aromatic substrate both first and zero. The topology of studied processes was characterized on basis of modern macrokinetics conceptions. Substrate relationships for arenes have been obtained by concurrent methods. It was indicated that active form of reagent is monohydrate of nitrosonium $\text{NO}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$, substrate activates to cation radical. The investigated systems as to the effectivity of phase transfer catalytic obtainment of nitroarenes don't be worse than the ones with nitric or sulfuric acids, but and do outdo theirs. Reaction mechanisms in systems with phosphoric acid or sulfuric acid present as identical. The first

experiments at three-phase systems and at new combined approaches to nitration showed their effectivity and interesting perspective. The catalytic operation of quaternary onium salts in systems solid - liquid for reaction of obtaining of potassium carbasolate determined. The comparative behaviour with crown ether was adduced. Anthracene fraction have been tested as alternative raw material for separation of anthracene and carbasole. Conditions concerning the preliminary processing of anthracene fraction were determined.

Індекс УДК: 544, 541.127 : 541.128 : 541.19 : 547.21

Коди тематичних рубрик: 31.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лобачов Володимир Леонідович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нова трансфазно-каталітична система: водна H_3PO_4 - NaNO_2 (або $\text{NO} + \text{NO}_2$) - C_6H_6 для нітрування аренів

Назва НТП англійською: New phase transfer catalytic system: water H_3PO_4 - NaNO_2 (or $\text{NO} + \text{NO}_2$) - C_6H_6 for nitration of arenes

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Запропоновано нову ефективну трансфазно-каталітичну систему водна H_3PO_4 - NO_2 - C_6H_6 для введення нітрогрупи в ароматичне кільце поліароматичних сполук. Перевагами її в порівнянні із системами з водною H_2SO_4 , що традиційно використовуються, є більш високі каталітичні ефекти та швидкості реакції.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Не визначено

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Підприємства коксохімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): Не визначено

Додаткова інформація: За договорами

IX. Бібліографічний опис

1. Межфазный катализ для коксохимии [Текст] / А.П. Зарайский, И.Б. Фролова, Л.И. Величко, Н.М. Аникеева, Т.И. Швецова // Вопр. химии и хим. технолог. -2012. - № 6. - С. 85-88; 2. Расширение сырьевой базы для каталитического метода выделения антрацена и карбазола из коксохимического сырья [Текст] / И. Б. Фролова, А. П. Зарайский, Н. М. Аникеева, Т. И. Швецова // Сб. тр. XXI Междунар. науч.-практ. конф.

"Инновационные пути решения актуальных проблем базовых отраслей, экологии, энерго- и ресурсосбережения " : в 3 т., Щелкино (АР Крым), 3 - 7 июня 2013 г. - Х. : "НТМТ", 2013. - Т. 1. - С. 262 - 264.

Х. Заклучні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович

Перелік осіб-виконавців

Анікеева Н. М

Безбожна Т. В.

Волкова Л. К.

Дятленко Л.М.

Зарайський А. П.

Зубрицький М. Ю.

Краснякова Т. В.

Литвиненко С. Л.

Мерзликіна М. А.

Мітченко С.А.

Редько А. М.

Рудаков Є. С.

Фролова І. Б.

Хазіпов О. В.

Швецова Т. І.

Янатєва Н. С.

Відповідальний за підготовку

облікових документів

Телефон

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

