Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U007621

Державний реєстраційний номер: 0109U001090

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-03-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Зіставити кінетику та основні маршрути трансформації моногідропероксидів (ГП) ДБЕ і ЦГ (у відповідних оксидатах) в інертній атмосфері та у присутності повітря, коли має місце конкуренція між молекулами O2 і ГП за "координаційні місця" комплексу-каталізатору.

Початок етапу: 01.2012

Закінчення етапу: 12.2012

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): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 817.745

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив складу та структури комплексів 3d металів з N-, O- та S-вмисними гетеро- і макрогетероциклічними полідентатними лігандами на утворення та розрив пероксо-зв'язків (O-O) в умовах каталітичного рідинофазного окислення органічних субстратів

Назва роботи англійською:

The influence of composition and structure of 3d metal complexes with N-, O- and S-containing hetero- and macrocyclic polydentate ligands on peroxo-bonds (O-O) formation and decomposition in catalytic liquid-phase oxidation of organic substrates

Реферат українською:

Досліджені особливості кінетики розкладу пероксиду гідрогена (H2O2) у присутності комплексів складу : Cu(Hdmpz)2((CF3)2pz)2 (1), Co((CF3)2pz)2(Hdmpz)2 (2), PhenCu(Hdmpz)2(OOCCF3)2 (3), (OOCBut)Cu(μ3-O)((μ-dmpz)2CoIII(Dipy)(μ-OH)CoIII(OOCMe)(Hdmpz) (4) і еквімолярна суміш металлокомплексів [(Dipy)Cu(OOCMe)2 + Co2(μ-dmpz)2(Hdmpz)2(OOCBut)2] (5). Зіставлені каталітичні властивості цих комплексів, а також визначені порядки реакції по H2O2 і каталізатору, ефективні енергії активації. Сформовано базу даних (більше 100 сполук) про каталітичні властивості комплексів 3d металів в рідиннофазному окиненні дибензилового етеру (ДБЕ) киснем повітря (швидкості накопичення продуктів, селективності по ним, конверсія ДБЕ). Побудовано адекватні 2D QSPR PLS-моделі зв'язку структура-властивість, що мають високу прогнозуючу здатність. Виявлено структурні чинники, що сприяють або перешкоджають прояву зазначених властивостей дослідженими металокомплексамі. З використанням продуктів бромування і нитрозирования 2 -(2-оксо-2-арилэтилиден) -2,3-дигидропиримидин- 4(1H) -онов отримані ряд нових бигетероарильных похідних пиримидинового ряду - 2 -(2-амино-4-арилтиазол-5-ил) -пиримидин- 4(3H) -онов і 6-метил- 2 -(1-R-5-фенил-1H-3-оксиимидазол-4-ил) пиримидин- 4(3H) -онов.

Реферат англійською:

The kinetics of hydrogen peroxide decomposition (H2O2) in the presence of the following complexes: Cu(Hdmpz)2((CF3)2pz)2 (1), Co((CF3)2pz)2(Hdmpz)2 (2), PhenCu(Hdmpz)2(OOCCF3)2 (3), (OOCBut)Cu(μ3-O)((μ-dmpz)2CoIII(Dipy)(μ-OH)CoIII(OOCMe)(Hdmpz) (4) and equimolar mixture [(Dipy)Cu(OOCMe)2 + Co2(μ-dmpz)2(Hdmpz)2(OOCBut)2] (5) was investigated. Catalytic properties of these complexes were compared. Reaction orders to H2O2 and catalyst, the effective activation energy were determined. The database (over 100 compounds) of the catalytic properties of 3d metals in the liquid-phase oxidation of dibenzyl ether (DBE) by air oxygen. Adequate 2D QSPR PLS-model Structure-property with high predictive ability was constructed. Structural factors that facilitate or hinder the expression of the above properties studied of metal complexes were identified. Series of new bigeteroaryl derivatives - 2-(2-amino-4-arylthiazol-5-yl)-pyrimidin-4(1H)-ones and 6-methyl-2(1-R-5-phenyl-1H-3-oxyimidazol-4-yl)-pyrimidin-4(1H)-ones - was obtained using products of bromination and nitrosation of 2-(2-oxo-2-aryletyliden)-2,3-dihydropyrimidin-4(1H)-ones.

Індекс УДК: 542.8:544.14;542.8:539.19, 547.098+542.943+547.26.265+547.7.8

Коди тематичних рубрик: 31.15.15

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 пероксиду гідрогена у присутності піразолатних металокомплексів Cu та Co. Синтез бигетероарильных похідних піримидинового ряду - 2 -(2-амино-4-арилтиазол-5-ил) -пиримидин- 4(3H) -онов і 6-метил- 2 -(1-R-5-фенил-1H-3-оксиимидазол-4-ил) пиримидин- 4(3H) -онов. База даних про каталітичні властивості комплексів 3d металів в рідиннофазному окиненні дибензилового етеру і адекватні 2D QSPR PLS-моделі зв'язку структура-властивість, що мають високу прогнозуючу здатність

Назва НТП англійською: The kinetics of hydrogen peroxide decomposition in the presence of pyrazolate complexes of Co and Cu. Series of new bigeteroaryl derivatives - 2-(2-amino-4-arylthiazol-5-yl)-pyrimidin-4(1H)-ones and 6-methyl-2(1-R-5-phenyl-1H-3-oxyimidazol-4-yl)-pyrimidin-4(1H)-ones. The database of the catalytic properties of 3d metals in the liquid-phase oxidation of dibenzyl ether (DBE) by air oxygen. Adequate 2D QSPR PLS-model Structure-property with high predictive ability

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Зіставлені каталітичні властивості комплексів складу Cu(Hdmpz)2((CF3)2pz)2 (1), Co((CF3)2pz)2(Hdmpz)2 (2), PhenCu(Hdmpz)2(OOCCF3)2 (3), (OOCBut)Cu(μ3-O)((μ-dmpz)2CoIII(Dipy)(μ-OH)CoIII(OOCMe)(Hdmpz) (4) і [(Dipy)Cu(OOCMe)2 + Co2(μ-dmpz)2(Hdmpz)2(OOCBut)2] (5), а також визначені порядки реакції по H2O2 і каталізатору, ефективні енергії активації. Виявлено, що у водно-диоксанових розчинах питома каталазна активність ацетату Cu(II) у шість разів нище, ніж у ацетату Co(II). Разом з тим, в аналогічних умовах, комплекси складу [?-4,5-(F3C)2pz]2M(4,5-(H3C)2pzH)2 [де pzH - піразол, M = Cu (комплекс I) і Co (комплекс II)] помітно активніше відповідних ацетатів ? комплекс I на порядок, а комплекс II в п'ять разів. Константа швидкості розкладання пероксиду гідрогену у присутності комплексу I більше ніж на три порядки нижче такої для комплексу II. Заміщення у комплексі I ?-піразолатних лігандів на ?-фенантролін та два трифторметил ацетатні приводить до росту каталазної активності відповідного комплексу III на два п

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства хімічної галузі

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 обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

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

Іванов Ю.Е.

Грищук Лідія Володимирівна
(к. х. н.)

Д.Є.Степанов

Камалов Г.Л.

Коваль А.В.

Коцеруба В.А.

Краєвська Н.С.

Левченко О.А.

Чіхічін Д.Г.

Яволовський А.О.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності