

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005740

Державний реєстраційний номер: 0120U104981

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Визначення впливу структурно-розмірних та кислотно-основних характеристик ієрархічних цеолітів, композитів на їх основі та нанесених металевих каталізаторів на їх активність і селективність в однореакторних каскадних процесах та реакціях тонкого органічного синтезу

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417213

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 31, м. Київ, 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445251190

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

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): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1245.100

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові ефективні цеолітні каталізатори екологічно безпечних процесів перетворення відновлювальної сировини в цінні органічні сполуки

Назва роботи англійською:

New effective zeolite catalysts for environmentally friendly processes of the conversion of renewable raw materials into valuable organic compounds

Реферат українською:

Вперше досліджено каталітичні властивості матеріалів MWW з регульованими текстурними характеристиками (тримірний MCM-22 і шаруваті MCM-36, MCM-56 матеріали) та різним відношенням Si/Al (12 – 35), а також комерційного цеоліту beta, у реакції Прінса–Фріделя–Крафтса між альдегідом (бутаналь або бензальдегід), 3-бутен-1 олом і анізолом. З'ясовано, що не тільки висока концентрація кислотних центрів, але і їх підвищена доступність є ключовими факторами, що забезпечують підвищену активність мікро-мезопористого MCM-36 (конверсія – 82 %, селективність за 4-арилтетрагідропіранами – 50 %) за умови використання об'ємного альдегіду (бензальдегіду) як субстрату. Встановлено, що найбільший вихід α -валеролактону (74 % за 24 год) в каскадному процесі перетворення фурфуролу за атмосферного тиску та 117 °C досягається в присутності цеоліту Zr-Al-USY (Zr/Al = 2,6) з оптимальним відношенням кислотних центрів Бренстеда та Льюїса (0,1), яке необхідне для перебігу реакцій перетворення фурфуролу в 2-пентилфурфуриловий етер та 2-пентиллевулінату в α -валеролактон за участю кислотних центрів Льюїса та перетворення 2-пентилфурфурилового етеру в 2-пентиллевулінат на кислотних центрах Бренстеда. Досліджено основні, кислотні та адсорбційні характеристики титаносилікатних цеолітів різних структурних типів, нанокompatитів на основі ієрархічних цеолітів, пористих оксидів металів або мезопористих матеріалів, а також їх каталітичні властивості в реакції синтезу циклічних карбонатів із стиrolу під тиском CO₂. Вперше показано, що найвищий вихід (до 98%) цільового продукту досягається на Cs-формах ієрархічних цеолітів BEA, титаносилікатних цеолітах MTW і темплатвмісних BEA з погашеними кислотними центрами Бренстеда.

Реферат англійською:

For the first time, the catalytic properties of MWW materials with adjustable texture characteristics (three-dimensional MCM-22 and layered MCM-36, MCM-56 materials) and different Si/Al ratios (12 – 35), as well as commercial beta zeolite, in the Prins–Friedel–Crafts reaction between aldehyde (butanal or benzaldehyde), 3-butene-1-ol and anisole were investigated. It was found that not only the high concentration of acid sites, but also their increased accessibility are the key factors that provide increased activity of micro-mesoporous MCM-36 (conversion – 82%, selectivity towards 4-aryltetrahydropyrans – 50%) when using bulk aldehyde (benzaldehyde) as a substrate. It was found that the highest yield of α -valerolactone (74% in 24 h) in the cascade process of furfural transformation at atmospheric pressure and 117 °C is achieved in the presence of zeolite Zr-Al-USY (Zr/Al = 2.6) with the optimal Brønsted to Lewis acid sites ratio (0.1), which is necessary for the reactions of conversion of furfural to 2-pentylfurfuryl ether and 2-pentyllevulinate into α -valerolactone with the participation of Lewis acid sites and conversion of 2-pentylfurfuryl ether into 2-2-pentyllevulinate over Brønsted acid sites. Basic, acidic and adsorption characteristics of titanosilicate zeolites of various structural types, nanocomposites based on hierarchical zeolites, porous metal oxides or mesoporous materials, as well as their catalytic properties in the reaction of the synthesis of cyclic carbonates from styrene under CO₂ pressure, were studied. It was shown for the first time that the highest yield (up to 98%) of the desired product is achieved over Cs-forms of hierarchical BEA zeolites, titanosilicate MTW zeolites and template-containing BEA with quenched Brønsted acid sites.

Індекс УДК: 544 , 541.14

Коди тематичних рубрик:31.15.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Щербань Наталія Дмитрівна

Науковий ступінь: к. х. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

N.D. Shcherban, R.Yu. Barakov, S.A. Sergiienko, K. Eränen, J. Wärnå, D.Yu. Murzin. Furfural oxidation with hydrogen peroxide over ZSM-5 based micro-mesoporous aluminosilicates // Cat. Lett., 2022, 152, 2920–2932.

M.M. Kurmach, K.M. Konysheva, P.S. Yaremov, O.V. Shvets, V.M. Fetiukhin, N.D. Shcherban. Hierarchical zeolites as efficient catalysts for dehydration of substituted indanols // J. Solid State Chem., 2022, 309, 122942.

R. Barakov, N. Shcherban, O. Petrov, J. Lang, M. Shamzhy, M. Opanasenko, J. Cejka. MWW-type zeolite nanostructures for a one-pot three-component Prins–Friedel–Crafts reaction // Inorg. Chem. Front., 2022, 9(6), 1244–1257.

I.D. Kopa, R.Yu. Barakov, S.O. Sotnik, N.D. Shcherban. Furfural acetalization with ethanol over conventional and hierarchical beta zeolites // Materials Today: Proceedings, 2022, 62(15), 7686–7690.

O. Shvets, M. Kurmach, P. Yaremov, N. Shcherban. Hierarchical zeolite materials with basic properties as active catalysts in cycloaddition of carbon dioxide to epoxides reaction // Materials Today: Proceedings, 2022, 62(15), 7677–7680.

R. Barakov, N. Shcherban, P. Mäki-Arvela, P. Yaremov, I. Bezverkhyy, D. Yu. Murzin. Hierarchical beta zeolites as catalysts in α -pinene oxide isomerization // ACS Sust. Chem. Eng., 2022, 10(20), 6642–6656.

N. Shcherban, R. Barakov, B. Lasne, P. Mäki-Arvela, M. Shamzhy, I. Bezverkhyy, J. Wärnå, D.Yu. Murzin. Florol synthesis via Prins cyclization over hierarchical beta zeolites // Molecular Catalysis, 2022, 531, 112683.

M.M. Kurmach, K.M. Konysheva, O.P. Pertko, P.S. Yaremov, Y.G. Voloshyna, O.V. Shvets. Catalytic Properties of Nickel-Containing Hierarchical Zeolites in the Reaction of n-Hexane Hydroisomerization // Theoretical and Experimental Chemistry, 2023, 58, 427–434.

O.V. Shvets, M.M. Kurmach, P.S. Yaremov, N.D. Shcherban. Zeolite nanocomposites with variable acid and basic properties – effective catalysts for fine chemical synthesis and industrial reaction // Applied Nanoscience, 2023. <https://doi.org/10.1007/s13204-023-02955-7>.

R. Barakov, N. Shcherban, O. Petrov, D.N. Rainer, M. Kubů, J. Čejka, M. Shamzhy, M. Opanasenko. Optimization of Zr-Al-USY and Zr-Al-Beta zeolites catalysts for a one-pot cascade transformation of furfural to α -valerolactone // Catalysis Today, 2024, 426, 114406.

M. E. Martínez-Klimov, O. Yevdokimova, P. Mäki-Arvela, J. Cueto, N. Shcherban, Z. Vajglová, K. Eränen, D. Yu. Murzin. Hydrodeoxygenation of Isoeugenol in Continuous Mode Using Bifunctional Pt-Beta 25-Binder Catalysts for Renewable Jet Fuel Production // Sustainable Energy & Fuels, 2024, 8(1), 90–102.

N. D. Shcherban, E. Kholkina, S. Sergiienko, A. V. Kovalevsky, I. Bezverkhyy, D. Yu. Murzin. Carboxymethylation of Cinnamyl Alcohol with Dimethyl Carbonate over Graphitic Carbon Nitrides // ChemPlusChem., 2023, e202300600.

М.М. Курмач, Д.В. Кирилюк, А.О. Самотой, С.О. Сотнік, П.С. Яремов, О.В. Швець, Н.Д. Щербань. Каталітичні властивості ієрархічних цеолітів CsAlTi-BEA в реакції утворення циклічного карбонату із стиrolу під тиском CO₂ // Теорет. Експерим. Хімія, 2023, 59, 5.

Спосіб селективної дегідратації заміщених 4-бромо-2,3-дигідро-1Н-інден-1-олів з утворенням відповідних інденів. О.В.Швець, М.М.Курмач, К.М. Конишева. Пат. 152085 Україна, C07C 23/24, № u202200111; Заявл. 12.01.2022; Опубл. 26.10.2022, Бюл. № 43 - 6 с.

Спосіб одержання каталізатора селективного окиснення дигідрокарвону. Бараков Р. Ю., Сотнік С. О., Яремов П. С., Щербань Н. Д. Пат. 154048 Україна, № u202300715; Заявл. 23.02.2023; Опубл. 04.10.2023, Бюл. № 40.

Спосіб одержання циклічних лактонів з кетонів з використанням ієрархічних цеолітів. Курмач М. М., Швець О. В., Самотой А. О., Яремов П. С., Сотнік С. О., Щербань Н. Д. Пат. 154049 Україна, № u202300716; Заявл. 23.02.2023; Опубл. 04.10.2023, Бюл. № 40.

Спосіб селективного одержання циклічних карбонатів з органічних оксиранів та діоксиду вуглецю. Курмач М. М., Швець О. В., Конишева К. М., Фетюхін В. М., Щербань Н. Д. № a202200866; Заявл. 24.02.2022; Опубл. 13.09.2023, бюл. № 37/2023.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кошечко Вячеслав Григорович
д. х. н., 02.00.04

Перелік осіб-виконавців

Курмач Михайло Миколайович
(к. х. н., н.с, 02.00.04)

Швець Олексій Васильович
(к.х.н., с.н.с., 02.00.04)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Щербань Н.Д.

Телефон

+38 (096) 758-93-52

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна