

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U000163

Державний реєстраційний номер: 0118U005309

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-01-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Створення нанокомпозитних матеріалів на основі координаційних полімерів - нового покоління каталізаторів для синтезу біологічно-активних карбонових кислот

Початок етапу: 10.2018

Закінчення етапу: 12.2018

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 НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417213

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0445251190

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 150
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Створення нанокompозитних матеріалів на основі координаційних полімерів - нового покоління каталізаторів для синтезу біологічно-активних карбонових кислот

Назва роботи англійською:

Creation of nanocomposite materials on the basis of coordination polymers as a new generation of catalysts for the synthesis of biologically active carboxylic acids

Реферат українською:

Знайдено умови формування наноструктурованого пористого координаційного полімеру (ПКП) $\text{Cu}_3(\text{btc})_2$ (традиційна назва HKUST; $\text{btc}^{3-} = 1,3,5\text{-бензолтрикарбоксилат}$) з середнім розміром частинок від 50 до 60 нм у присутності речовин, що обмежують ріст кристалів, а також мікророзмірних частинок з середнім розміром до 500 мкм. Показано, що нанорозмірний і мікророзмірний ПКП $\text{Cu}_3(\text{btc})_2$ каталізують процес окиснення бензоїну і заміщених бензоїнів перекисом водню з утворенням відповідних бензойних кислот. Встановлено, що вихід бензойної кислоти та середня швидкість такого процесу в залежності від початкової концентрації бензоїну проходить через максимум, що можна пояснити блокуванням доступу субстрату до каталітично активних центрів каталізатору в результаті адсорбції бензоїну. Розмір молекул заміщених бензоїнів не впливає на швидкість реакції їх окиснення, що пояснюється перебігом реакції на "зовнішній поверхні" наноструктурованого ПКП. Розроблено методи створення композитів наночастинок $\text{Cu}_3(\text{btc})_2$ на пористих носіях - аеросилі (силікагель) і перліті. Показано, що частинки ПКП не змиваються з композитів при промиванні органічними розчинниками. Пропускання реакційних сумішей, що містять бензоїн і перекис водню, через шари таких композитів (заповнені колонки) за кімнатної температури дозволяє досягти окиснення бензоїну з високим виходом до бензойної кислоти, при цьому також утворюється 2-карбокси-1,4-бензохінон. Більш глибоке окиснення бензоїну у присутності композиту пояснюється більшим співвідношенням кількості каталізатор/субстрат. Встановлено, що окиснення циклического спирту - 1,2,3,4-тетрагідронафталін-1-олу - веде до утворення лише кетону (1,2,3,4-тетрагідронафталін-1-ону).

Реферат англійською:

Conditions for the formation of nanostructured porous coordination polymer (PCP) $\text{Cu}_3(\text{btc})_2$ (traditional name HKUST; $\text{btc}^{3-} = 1,3,5\text{-benzol-tricarboxylate}$) with average particle size from 50 to 60 nm in the presence of substances limiting crystal growth are found, and also microscopic particles with an average size of up to 500 microns. It is shown that nanosized and microparticulate control $\text{Cu}_3(\text{btc})_2$ catalyzes the process of oxidation of benzoin and substituted benzoin with hydrogen peroxide to form the corresponding benzoic acids. It has been found that the yield of benzoic acid and the average rate of such a process, depending on the initial concentration of benzoin, passes through the maximum, which can be explained by blocking the access of the substrate to catalytically active catalyst centers by adsorption of benzoin. The size of the substituted benzoin molecules does not affect the rate of reaction of their oxidation, which is explained by the reaction of the reaction to the "outer surface" of the nanostructured control panel. Methods of creating composites of nanoparticles $\text{Cu}_3(\text{btc})_2$ on porous carriers - aerosols (silica gel) and perlite. It was shown that PCP particles are not washed away from the composites when they are washed with organic solvents. The passage of reactive mixtures containing benzoin and hydrogen peroxide through the layers of such composites (filled columns) at room temperature allows for the oxidation of benzoin with a high yield to benzoic acid, thereby also forming 2-carboxy-1,4-benzoquinone. Deeper oxidation of benzoin in the presence of a composite is due to the higher ratio of catalyst / substrate. It was found that oxidation of cyclic alcohol - 1,2,3,4-tetrahydronaphthalene-1-ol - leads to the formation of only ketone (1,2,3,4-tetrahydronaphthalene-1-one).

Індекс УДК: 544.45;544.42/.43;544.47;544.46, 544.72,544.478-03, 54.478.01, 544.478.023.5, 544.478.41, 544.478.42

Коди тематичних рубрик:31.15.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Колотілов Сергій Володимирович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: с.д.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Наноккомпозитні матеріали на основі наночастинок карбоксилатних пористих координаційних полімерів міді(II) з силікагелем та спіненим перлітом

Назва НТП англійською: Nanocomposite materials based on nanoparticles of Cu(II) carboxilate porous coordination polymers with silicagel and expanded perlite

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки в галузі інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено методики одержання наноккомпозитних матеріалів на основі наночастинок карбоксилатних пористих координаційних полімерів (ПКП) міді(II) з силікагелем та спіненим перлітом – каталізаторів реакцій окиснення органічних спиртів до карбонових кислот перекисом водню

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: хімічна промисловість

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кошечко Вячеслав Григорович

д. х. н., 02.00.04

Перелік осіб-виконавців

Іваниця М.О.

Курмач М.М.

Литвиненко А.С

Сацька Ю.А.

Яремов П.С.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

