Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U001732

Державний реєстраційний номер: 0118U003623

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Вивчення V і Co нано-каталізаторів, так само і VO-Fe і Co-Fe- ацетилацетонатів у процесі окислення толуолу, ксилолів, циклогексану, ізо-євгенолу, гваяколу, з застосуванням O2 і H2O2 у метиловому і ізопропіловому спиртах і ацетонітрилі при 40-100C і 1-20 атм, промотоване UA та THICA.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): ВІДДІЛЕННЯ ФІЗИКО - ХІМІЇ ГОРЮЧИХ КОПАЛИН ІНСТИТУТУ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ ІМ. Л.М. ЛИТВИНЕНКА НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

Код за ЄДРПОУ: 03772476

Місцезнаходження: вул. Наукова, 3 а, м. Львів, Львівська обл., 79053, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322635174

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, буд. 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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.): 804.509

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Окиснення вуглеводнів та їх кисневмісних похідних киснем та пероксидом водню до практично-важливих напівпродуктів промотоване біо-інспірованими активаторами.

Назва роботи англійською:

The oxidation of hydrocarbons and their oxygen-containing oxygen and hydrogen peroxide derivatives to practically important intermediates is evidenced by bio-inspired activators.

Реферат українською:

В результаті проведених досліджень: (і) вивчено вплив активатора (оксалатна кислота, ОА) на кінетику окислення циклогексану H2O2, каталізоване VO(acac)2, та механізм процесу. Останній підпорядкований дисоціації ОА, а також її солі VO(oxalate), що утворюється при взаємодії ОА з вихідним VO(acac)2. Це призводить до зниження загального електричного опору 1/G реакційного середовища і є суттю активуючого впливу даної добавки. Як слідує з даних електронної спектроскопії та циклічної вольтаметрії, разом із зміною 1/G, заміщення лігандів слабкого поля (acac) в VO(acac)2 на ліганди поля середньої сили (оксалат) посилює зв'язок катіон-ліганд та попереджає незворотнє окислення каталізатору. У відсутності ОА, 1/G був у декілька разів вищий ніж у випадку ОА + VO(acac)2. Остання особливість корелює із значно вищою продуктивністю процесу у присутності ОА. Експериментальні та DFT розрахунки основних квантово-хімічних параметрів (розщеплення d-d-рівнів в каталізаторі, величина щілини HOMO-LUMO, енергія Гіббса) показали, що ефективність процесу пов'язана з модифікацією зовнішньо-сферних електронних оболонок метало-комплексів, що може приводити до утворення метал-пероксочастинок VO(□2-O2). З іншої сторони, оксалат аніони, окрім зменшення 1/G можуть полегшувати взаємодію H2O2 з катіонами металу каталізатора. В сумі це призводить до зростання ефективності процесу; (іі) досліджено вплив специфічної, неспецифічної сольватація, структурних факторів, а також параметрів перехідного стану на константи швидкості окиснення нітрогеновмісних сполук пероксикислотами. Результати науково–дослідної роботи опубліковані в 4 статтях вітчизняних і зарубіжних журналів та представлені на 4 вітчизняних і міжнародних конференціях.

Реферат англійською:

As a result of research: (i) the influence of activator (oxalic acid, OA) at the kinetics of cyclohexane oxidation by H2O2 catalyzed with VO(acac)2 and process mechanism was studied. The last one is stipulated by OA as well as the salt of the later with initial VO(acac)2 (VO(oxalate)) dissociation. That leads to decreasing the overall electric resistance 1/G of the reaction mixture and is the essence of OA activating impact. As follows from the electronic spectroscopy and cyclic voltammetry, together with 1/G alteration, the replacement of the weak field ligands (acac) of VO(acac)2 by the middle field ones (oxalates) strengthens the cation-ligand bonds and prevents the irreversible catalyst oxidation. In the absence of OA, the 1/G value was several times higher than in OA + VO(acac)2 case. The last feature correlate well with noticeably higher process efficiency in presence of OA. Experimental data and DFT calculation of the main quantum-chemical parameters (catalyst d-d-levels splitting, HOMO-LUMO gap, Gibbs energy) revealed that the process efficiency relates with modification of metalocomplex outer-sphere electronic shelves and may lead to generation of metalperoxo species VO(□2-O2). On the other hand, oxalate-anions, besides decreasing of 1/G, may facilitate H2O2 interaction with catalyst cations. Ultimately, that results in process productivity increasing; (ii) the impact of specific and unspecific solvation, structural factors as well as intermediate state parameters at the rate constants of oxidation of nitrogen-contained compounds by peroxoacids was investigated. The results of these studies were published in 4 papers of national and international journals and presented at 4 national and international Conferences.

Індекс УДК: 544, 544.472

Коди тематичних рубрик:31.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Покуца Олександр Петрович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Дослідження впливу провідності G середовища, каталізаторів та активаторів (оксалатна кислота, VO(acac)2) на механізм утворення та вихід цільових продуктів окислення циклогексану, вплив сольватації, структурних факторів на окислення нітрогенвмісних сполук пероксокислотами.

Назва НТП англійською: The influence of conductivity G of the reaction medium, catalysts and activators (oxalic acid, VO (acac)2) on the mechanism of formation and yield of targetted oxidation products of cyclohexane oxidation, as well as the impact of solvation, structural factors on the oxidation of nitrogen-containing compounds by peroxyacids were studied.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: хімічні і нафтохімічні виробництва

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Вивчено вплив активатора (оксалатна кислота, ОА) на кінетику окислення циклогексану H2O2, каталізоване VO(acac)2, та механізм процесу. Останній підпорядкований дисоціації ОА та також її солі VO(oxalate), що утворюється при взаємодії ОА з вихідним VO(acac)2. Це призводить до зниження загального електричного опору 1/G реакційного середовища і є суттю активуючого впливу даної добавки. У відсутності ОА, 1/G був у декілька разів вищий ніж у випадку ОА + VO(acac)2. Остання особливість корелює із значно вищою продуктивністю процесу у присутності ОА. Експериментальні та DFT розрахунки основних квантово-хімічних параметрів показали, що ефективність процесу пов'язана з модифікацією зовнішньо-сферних електронних оболонок метало-комплексів, що може приводити до утворення метал-пероксочастинок VO(η2-O2). З іншої сторони, оксалат аніони, окрім зменшення 1/G, можуть полегшувати взаємодію H2O2 з катіонами металу каталізатора. В сумі це призводить до зростання ефективності процесу. Досліджено також вплив специфічної, неспецифічної сольватації, структурних факторів, а також параметрів перехідного стану на константи швидкості окиснення нітрогеновмісних сполук пероксикислотами.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Збільшення обсягів виробництва, Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів, Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: хімічні і нафтохімічні виробництва

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

1. Pokutsa A., Zaborovsky A., Bloniarz P., Paczeŝniak T., Maksym D., Muzart J. Cyclohexane oxidation: relationships of the process efficiency with electrical conductance, electronic and cyclic voltammetry spectra of the reaction mixture. // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2021. 132:123–137 – https://doi.org/10.1007/s11144-020-01913-6

2. Pokutsa A., Ohkubo K., Zaborovski A., Bloniarz P. UV–induced oxygenation of toluene enhanced by Co(acac)2/9-mesityl-10-methylacridinium ion/N–hydroxyphthalimide tandem // «Asia–Pacific Journal of Chemical Engineering». 2021. https://doi.org/10.1002/apj.2714.

3. Дутка В. С., Мідяна Г. Г., Дутка Ю. В., Пальчикова О. Я. Окиснення акридину пероксикислотами в різних органічних розчинниках // «Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна». 2021. – вип. 62. – С. 330 – 339.

4. Дутка В. С., Мідяна Г. Г., Дутка Ю. В., Пальчикова О. Я. Окиснення нітрогеновмісних сполук пероксикислотами в різних органічних розчинниках // «Збірник наукових праць НТШ». 2021. т. LXVI. С / 28.

5. Pokutsa A., Maksym D., Zaborovsky A., Bloniarz P., Pacześniak T., Muzart J. Can the results of a chemical process be beneficial to a purpose of clinical medicine? // Book of abstracts of the 2 nd International Conference on Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis RKMC 2021. – 20–22 May, 2021, Budapest, Hungary. – P. 119–120.

6. Дутка В. С., Мідяна Г. Г., Дутка Ю. В. Особливості N-окиснення азотовмісних спо- лук пероксикислотами // Збірник тез доповідей V Всеукраїнської наукової конференції «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи». – 15 квітня 2021 р., м. Житомир, Україна. – С. 258–259.

7. Dutka V. S., Kovalskyi Ya. P., Midiana G. G. Infuence of surface nature of disperse inorganic oxides on the processes of vinyl monomers radical polymerization // Book of abstracts of the Ukrainian Conference with International Participation Chemistry «Physics and Technology of Surface devoted to the35th anniversary of the Chuiko Institute of Surface Chemistry of NAS of Ukraine». – 26 – 27 May, 2021, Kyiv, Ukraine. – P. 61.

8. Дутка В. С., Мідяна Г. Г., Ковальський Я. П. Розклад аліфатичних пероксикислот в різних органічних розчинниках за наявності йонів металів // Збірник тез доповідей XVIII наукової конференції «Львівські хімічні читання – 2021», присвяченої 360-річчю Львівського національного університету. – 31 травня – 2 червня 2021 року, Львів, Україна. – С. Ф. 6.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мідяна Галина Григорівна
к. х. н.

Перелік осіб-виконавців

Дутка Володимир Степанович
(д. х. н., 02.00.04)

Заборовський Андрій Богданович
(02.00.04)

Максим Дарія Степанівна
(02.00.04)

Мідяна Галина Григорівна
(к.х.н., 02.00.04)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Заборовський Андрій Богданович

Телефон

+38 (032) 263-51-74

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

