

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U102431

Державний реєстраційний номер: 0119U101755

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження кінетики піролізу вуглеводних компонент лігноцелюлози на поверхні нанорозмірних матеріалів з метою отримання функціональних хіральных сполук

Початок етапу: 04.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, м. Київ, Київська обл., 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444229632

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 120
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Створення способів спрямованого каталітичного піролізу біомаси з метою одержання функціональних хіральних та ароматичних сполук

Назва роботи англійською:

Creation of methods for the directed catalytic pyrolysis of biomass in order to obtain functional chiral and aromatic compounds

Реферат українською:

На поверхні кремнезему спостерігається дві стадії піролізу адсорбованого полісахариду (стадія I - $T_{\max} \sim 300^{\circ}\text{C}$ і стадія II - $T_{\max} \sim 380^{\circ}\text{C}$). Стадія I обумовлена трансформацією вільних сегментів (петель, хвостів) полімеру, стадія II - сегментів, безпосередньо зв'язаних з поверхнею. Встановлено, що додаткова, порівняно з конденсованим станом, високотемпературна стадія піролізу полісахариду на поверхні кремнезему ($T_{\max} \sim 380^{\circ}\text{C}$), обумовлена хемосорбцією гідроксиметильних груп з формуванням прищеплених ефірних груп $\text{Si-O-CH}_2\text{-[Glu-O-]}_n$, результатом якої є блокування участі гідроксиметильних груп в процесі деполімеризації і, як наслідок, відсутності в продуктах піролізу левоглюкозану та діангідро-похідних. Показано, що змінюючи кількість адсорбованого полісахариду на поверхні кремнезему можна змінювати не лише кількісний, але й якісний склад продуктів піролізу. Зокрема, зменшувати або збільшувати вихід сполук піранового чи фуранового ряду. Розраховано кінетичні параметри утворення ряду піранових та фуранових похідних (температура максимальної швидкості реакції $T_{\max}$, порядок реакції n , енергія активації E_a , передекспоненційний фактор ρ_0 , ентропія активації $dS^\ddagger$) та запропоновано вірогідні механізми утворення сполук піранового ряду (левоглюкозану, левоглюкозенону), бутадієну та інших сполук.

Реферат англійською:

On the silica surface there are two stages of pyrolysis of the adsorbed polysaccharide (stage I - $T_{\max} \sim 300^{\circ}\text{C}$ and stage II - $T_{\max} \sim 380^{\circ}\text{C}$). Stage I is caused by the transformation of the free segments (loops, tails) of the polymer, Stage II - the segments that are directly connected to the surface. It is established that additional, compared to the condensed state, high-temperature stage of polysaccharide pyrolysis on the silica surface ($T_{\max} \sim 380^{\circ}\text{C}$) due to the chemisorption of hydroxymethyl groups with formation of grafted ether groups $\text{Si-O-CH}_2\text{-[Glu-O-]}_n$, result which is the blocking of the involvement of hydroxymethyl groups in the depolymerization process and, as a consequence, the absence of levoglucosan and dianhydro-derivatives pyrolysis products. It is shown that changing the amount of adsorbed polysaccharide on the silica surface can change not only the quantitative but also the qualitative composition of the pyrolysis products. In particular, reduce or increase the yield of the pyran or furan compounds. The kinetic parameters of the formation of a number of pyran and furan derivatives were calculated (maximum reaction rate $T_{\max}$, reaction order n , activation energy E_a , overexposure factor ρ_0 , entropy of activation $dS^\ddagger$) and proposed possible mechanisms for the formation of compounds of pyranoglucan, other compounds.

Індекс УДК: 544, 544.47; 66.092-977; 547-326

Коди тематичних рубрик: 31.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Картель Микола Тимофійович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Закономірності піролізу полісахаридів на основі мономерної ланки глюкози в конденсованому стані та на поверхні нанорозмірних SiO₂, Al₂O₃/SiO₂ і TiO₂/SiO₂ за допомогою адсорбційних методів аналізу, термопрограмованої десорбційної мас-спектрометрії, інфрачервоної спектроскопії та термогравіметрії.

Назва НТП англійською: Patterns of pyrolysis of polysaccharides on the basis of the monomeric glucose unit in the condensed state and on the surface of nanosized SiO₂, Al₂O₃ / SiO₂ and TiO₂ / SiO₂ using adsorption methods of analysis, thermoprogrammed desorption mass spectrometry, infrared spectroscopy.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології

Галузь застосування: C19, C20

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Показано, що змінюючи кількість адсорбованого полісахариду на поверхні кремнезему можна змінювати не лише кількісний, але й якісний склад продуктів піролізу. Зокрема, зменшувати або збільшувати вихід сполук піранового чи фуранового ряду.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Nastasiienko, N., Palianytsia, B., Kartel, M., Larsson, M., Kulik, T., Thermal Transformation of Caffeic Acid on the Nanoceria Surface Studied by Temperature Programmed Desorption Mass-Spectrometry, Thermogravimetric Analysis and FT-IR Spectroscopy. Colloids and Interfaces, 2019. 3(1), p.34. (1-14).
2. Т.В. Кулик, Б.Б. Паляниця, Н.С. Настасієнко, С.С. Тарнавський. Кінетика піролізу ряду природних та синтетичних похідних цинамової кислоти на поверхні нанорозмірного кремнезему. Хімія, фізика та технологія поверхні Т.10, № 3 (2019): 281-293.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Картель Микола Тимофійович
д. х. н., 02.00.04

Перелік осіб-виконавців

Кулик Тетяна Володимирівна
(к.х.н., 01.04.18)

Настасієнко Наталія Сергіївна
(к. х. н.)

Паляниця Борис Борисович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Дацюк Андрій Михайлович

Телефон

+38 (044) 322-96-32

Реєстратор

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

