

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U101221

Державний реєстраційний номер: 0119U102378

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-02-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вивчення електронних властивостей каталізаторів при веденні легуючих домішок d-/f-металів в основу оксидних наносистем

Початок етапу: 07.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 5251220, 380445251220

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:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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.): 50

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив структурно-розмірних та кислотно-основних характеристик Cu(Zn, Ag)/La(Zr)-SiO₂, CuNi/Mg(Ce)-Al₂O₃ каталізаторів на їх функціональні властивості в процесі конверсії біоетанола в цінні продукти

Назва роботи англійською:

Influence of structural dimensional and acid-main characteristics of Cu (Zn, Ag) / La (Zr) -SiO₂, CuNi / Mg (Ce) - Al₂O₃ catalysts on their functional properties in the conversion of bioethanol into valuable products

Реферат українською:

Основна ідея НДР полягає у з'ясування природи адсорбційних центрів активації реагуючих молекул на поверхні каталізатора та взаємовпливу складових каталізатора на його селективність та ефективність конверсії. Метою досліджень було вивчення впливу добавок d/f-металів у складі La(Zr)-SiO₂, Mg(Ce)-Al₂O₃ оксидних композицій на їх функціональні властивості як каталізаторів конверсії етанолу в 1,3-бутадиєн та 1-бутанол. В роботі досліджено електронно-адсорбційні закономірності впливу легуючих домішок d-/f-металів на селективність та ефективність створених оксидних наносистем з різною фазою провідності. Встановлено позитивний ефект від одночасного додавання оксидів цинку та магнію в основу каталізаторів для конверсії етанолу в 1,3-бутадиєн за методом Лебедева. Визначено матеріал каталізатора для такого процесу, що має оптимальний баланс між кількістю окислювально-відновних і кислотно-основних активних центрів. Визначено склад вихідних продуктів реакції та досліджено структурні дефекти та морфологічні зміни каталізаторів внаслідок каталітичної конверсії етанолу в 1,3-бутадиєн. Запропонована кількісна модель аналізу кислотно-основних властивостей каталітичних систем. Використовувалися методи: оже-електронна спектроскопія, термодесорбційна мас-спектрометрія, рентгенівська фотоелектронна спектроскопія ближнього тиску (10 mbar), скануючий електронний мікроскоп з високою роздільною здатністю та енергодисперсійна рентгенівська спектроскопія. Отримані результати є важливими для поглиблення фундаментальних уявлень фізико-хімічних процесів на поверхні, так і для розробки модифікованих оксидних наносистем у якості промислових каталізаторів.

Реферат англійською:

The basic idea behind R&D is to find out the nature of the adsorption centres for the activation of the reacting molecules on the catalyst surface and the mutual influence of the catalyst components on its selectivity and conversion efficiency. The aim of the study was to study the effect of d / f-metal additives in La (Zr) -SiO₂, Mg (Ce) -Al₂O₃ oxide compositions on their functional properties as catalysts for the conversion of ethanol into 1,3-butadiene and 1-butanol. The electron-adsorption regularities of the influence of alloying impurities of d- / f-metals on the selectivity and efficiency of the created oxide nanosystems with different phase conductivity are investigated. The positive effect of the simultaneous addition of zinc and magnesium oxides as catalysts for the conversion of ethanol into 1,3-butadiene by the Lebedev method was established. The catalyst material is determined for such a process that has an optimal balance between the number of redox and acid-base active centres. The composition of the initial reaction products was determined and structural defects and morphological changes of the catalysts due to the catalytic conversion of ethanol into 1,3-butadiene were investigated. A quantitative model for the analysis of acid-base properties of catalytic systems is proposed. The following methods were used: Auger electron spectroscopy, Thermal desorption mass spectrometry, near ambient pressure X-ray photoelectron spectroscopy (10 mbar), high resolution scanning electron microscope and energy-dispersive X-ray spectroscopy. The results obtained are important for deepening the fundamental concepts of physicochemical processes on the surface and for the development of modified oxide nanosystems as industrial catalysts.

Індекс УДК: 542.978;544.478, 665.644, 543; 54; 544.72

Коди тематичних рубрик:61.31.55.11, 61.51.16.07, 31.15.35

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Балакін Дмитро Юрійович

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Чисельні дані про фізико-хімічні властивості оксидних каталізаторів з домішками d- /f-металів в процесі конверсії біоетанола в цінні хімічні продукти

Назва НТП англійською: Numeric data on the physicochemical properties of oxide catalysts with d- / f-metal impurities in the process of conversion of bioethanol into valuable chemical products.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Нормативні документи, Методи, теорії, Технології

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції – 20; 24.11 ; 24.14

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проведені дослідження були спрямовані на вивчення нових каталітичних композитів, що містять науково обґрунтований баланс відновлювальних і кислотно-основних центрів, які підвищують продуктивність та селективність каталізаторів. Зокрема, досліджено електронні структури адсорбційних центрів в модельних зразках композитів Cu/SiO₂, Cu/ZnO, ZnO/SiO₂, Cu/ZrO₂/SiO₂, ZnO/ZrO₂SiO₂ і встановлення складу проміжних продуктів реакції при активації етанолу в умовах надвисокого вакууму і в реальній атмосфері (кисню, водню, етанолу та ацетальдегіду) роботи каталізатора. Також, досліджено механізми впливу морфології поверхні і легуючих домішок на термічну стійкість і кінетику реакційних процесів на поверхні композитів з різною фазою провідності. Встановлено умови формування адсорбційних центрів каталізу, які виникають на атомах d-металів (Zn, Cu, Zr, Ag), та їх властивості при різних концентраціях в оксидних композитах. Також було з'ясовано вплив кожного хімічного елементу каталізатора на склад продуктів десорбції з поверхні при конверсії етанолу в ацетальдегід і 1,3-бутадієн. Запропонована кількісна модель аналізу кислотно-основних властивостей каталітичних систем та встановлено електронно-адсорбційні закономірності та механізми поверхневих явищ в гетерогенному каталізі.

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:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 200000

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Спільні права на НТП

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Так

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):3

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

O.V. Larina, P.I. Kyriienko, D.Yu. Balakin, M. Vorokhta, I. Khalakhan, Y.M. Nychiporuk, V. Matolín, S. Soloviev, S. Orlyk. The effect of ZnO on acid-base properties and catalytic performance of ZnO/ZrO₂-SiO₂ catalysts in 1,3-butadiene production from ethanol-water mixture. Catal. Sci. Technol., 9, 3964-3978 (2019)

O.V. Larina, K.V. Valihura, P.I. Kyriienko, D.Yu. Balakin, N.V. Vlasenko, I. Khalakhan, T. Čendak, S.O. Soloviev, S.M. Orlyk. Successive vapour phase Guerbet condensation of ethanol and 1-butanol over Mg-Al oxide catalysts in a flow reactor. Appl. Catal. A: General 588, 117265 (2019)

P.I. Kyriienko, D.Yu. Balakin, O.V. Larina, I.M. Remezovskyi, S.O. Soloviev, S.M. Orlyk, M. Vorokhta, I. Khalakhan. NAP-XPS technique for design of M/Zr(La)-Si oxide catalysts (M: Zn, Cu, Ag) for 1,3-butadiene production from ethanol-water mixture. // Book of abstracts "14th European Congress on Catalysis, EuropaCat 2019", (18 – 23 August, 2019), Aachen, Germany.

P.I. Kyriienko, O.V. Larina, D.Yu. Balakin, M. Vorokhta, I. Khalakhan, S.O. Soloviev. Influence of structure and acid-base characteristics of ZnO on functional properties of Zn-Zr-Si oxide catalysts in ethanol-to-1,3-butadiene process. // Book of abstracts "Chemistry, physics and technology of surface" (15-17 May, 2019), Kyiv. P. 86.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Бондар Михайло Віталійович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Лопандя Любов Юріївна

Пилипчук Олександр Сергійович

(к. ф.-м. н., 01.04.07)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Балакін Д.Ю.

Телефон

+38 (096) 510-81-74

Реєстратор

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

