Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U001402

Державний реєстраційний номер: 0118U003623

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-01-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

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

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного документа: Остаточний 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.): 902.636

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:

Встановлено високу промотуючу здатність оксалатної кислоти (ОА) (на прикладі окислення толуолу і циклогексану O2 та H2O2, каталізованого VO(acac)2) котра обумовлена значним зниженням електричного опору реакційного середовища. Однією з причин є ріст концентрації заряджених часточок викликаний дисоціацією ОА, а також її солі VO(oxalate)2, котра утворюється при взаємодії ОА з вихідним VO(acac)2. Це призводить до зниження загального опору 1/G реакційного середовища і є суттю активуючого впливу. Заміщення лігандів слабкого поля (acac), VO(acac)2 на ліганди поля середньої сили (оксалат) посилює зв'язок катіон-ліганд та продовжує час життя каталізатору. Ефективність процесу пов'язана також з утворенням метал-пероксочастинок VO(□2-O2). Пояснено, чому добавки ОА та H2O2 в значній мірі нівелюють промотуючий ефект NHPI в каталітичній системі VO(acac)2/(Co(acac)2)/NHPI/O2. Вперше досліджені кінетичні закономірності сумісного впливу світлового опромінення та активаторів (NHPI, ОА) на окислення толуолу каталізоване солями V і Co в присутності фотокаталізатора Me2Acr+–Mes. Досліджено каталітичний ефект наночастинок d-металів у нульовій валентності (нікель, мідь, срібло) на розпад H2O2 і вплив гідроксилвмісних розчинників (MeOH, H2O) на дану реакцію. Вивчено закономірності окислення хіноліну пердекановою кислотою (ПДК) в ряді органічних розчинників. Найбільший вплив на даний процес мають величини параметрів специфічної та неспецифічної сольватації. Знайдено сумарні константи швидкості реакції окиснення акридину ПДК у різних органічних розчинниках (k) та енергії активації (Еак) в різних органічних середовищах. Між параметрами перехідного стану ΔH≠ та ΔS≠ існує лінійна залежність, яка вказує на наявність компенсаційного ефекту.

Реферат англійською:

The high promoting ability of oxalic acid (OA) was established on the example of the oxidation of toluene and cyclohexane by O2 and H2O2 catalyzed by VO(acac)2. The core of effect consists of a significant decrease the electrical resistance of the reaction medium. One of the reasons for the observed effect is the increase of the charged particles concentration caused by the dissociation of OA, as well as its salt VO(oxalate)2 formed upon OA interaction with the original VO(acac)2. This leads to decreasing in the total resistance 1/G of the reaction medium and is the essence of the activating effect. Substitution of weak-field ligands (acac), VO(acac)2 with middle-strength field ligands (oxalate) strengthens the cation-ligand bond and extends the life of the catalyst. The effectiveness of the process is also related to the formation of metal-peroxo species VO(□2-O2). On the other hand, as revealed OA and H2O2 additives significantly neutralize the promoting effect of NHPI in the VO(acac)2/(Co(acac)2)/NHPI/O2 catalytic system. For the first time, the kinetic dependencies of the combined effect of light irradiation and activators (NHPI, OA) on the oxidation of toluene catalyzed by V and Co salts in the presence of the photocatalyst Me2Acr+–Mes were investigated. The catalytic effect of nanoparticles of d-metals in zero valency (Ni, Cu, Ag) on the decomposition of H2O2 and the influence of hydroxyl-containing solvents (MeOH, H2O) on this reaction was studied. The peculiarities of quinoline oxidation by peroxodecanoic acid PDK in a number of organic solvents were studied. The parameters of specific and non-specific solvation have the greatest influence on this process. The total reaction rate constants of the acridine oxidation of PDK in various organic solvents (k) and the activation energy (Eak) in various organic media were found. There is a linear relationship

between the transition state parameters ΔH≠ and ΔS≠, which indicates the presence of a compensation effect.

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)

IX. Бібліографічний опис

1. Pokutsa A., Kubaj Y., Zaborovskyi A., Maksym D., Paczesniak T., Mysliwiec B., Bidzinska E., Muzart J., Sobkowiak A. Molec. Catal. V(IV)-catalyzed cyclohexane oxygenation promoted by oxalic acid: Mechanistic study. 2017, 434, 194–205.

2. Pokutsa A., Kubaj Y., Zaborovskyi A., Sobkowiak A., Muzart J. Reac Kinet Mech Cat. Oxalic acid-improved mild cyclohexane oxidation catalyzed by VO(acac)2: non-radical versus radical mechanism. 2017, 122, 757–774.

3. Dutka V., Midyana G., Dutka Yu., Palchicova E. Influence of Solvents on the Rate of Thermal Decomposition of Peroxydecanoic Acid, Russian Journal of General Chemistry.2018, vol.88, N 2, p.2703-2709.

4. Dutka V., Midyana G., Dutka Yu., Palchicova E. Solvent Effecton the Rate of Thermal Decomposition of Diacyl Diperoxydes, Russian Journal of General Chemistry.2018, vol.88, N 4, p.632-640.

5. Дутка В.С., Мідяна Г.Г., Дутка Ю.В., Пальчикова О.Я. Особливості термічного роз-кладу діацильних пероксидів у різних органічних розчинниках. Вісник Львівського університету. Серія Хімічна. 2018, Вип. 59, част.2 с.474-385.

6. Мідяна Г., Пальчикова О., Хавунко О., Мідяний С. Вплив розчинників на кінетику цис-трансізомеризації деяких ароматичних азосполук. Праці наук. тов. ім. Шевченка-Хімічні науки» Львів-2018, т.44. С.30-36.

7. Дутка В., Мідяна Г., Пальчикова О., Дутка Ю. Вплив реакційного середовища на швидкість терморозкладу аліфатичних пероксикислот. Праці наук. тов. ім. Шевченка-Хімічні науки» Львів-2018, т.44. С.30-36.

8. Dutka V., Aksimentyva O., Oschapovska N., Kovalsyi Ya., Halechko H. Adsorption and decomposition of peroxides on the surface of dispersed oxides Fe2O3, Cr2O3 and V2O5. Colloids Interfaces 2019. – 3. 13.; Doi: 10.3390/colloids3010013

9. Dutka V., Kovalskyi Ya., Aksimentyeva O., Tkachuk N., Oshapovska N., Halechco H. Molecular modeling of acridine oxidation by peroxyacsls// Chem.& Chem Technol, 2019, Vol. 13. No 3 P. 334 – 340. Doi: 10.23939/chcht13.03.334

10. Дутка В., Мідяна Г., Пальчикова О., Дутка Ю., Галечко Г. Вплив органічних розчинників на швидкість окиснення хіноліну пероксидекановою кислотою // Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна 2019. Вип. 60. ч.2. С.449 – 457. Doi: 10.30970/vch.6002.449

11. Дутка В., Аксіментьєва О., Галечко Г. Термомеханічні властивості та електропровідність композитів на основі кополімеру стирену з малеїновим ангідридом та поліаніліну та поліметакрилової кислоти та поліаніліну // Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна 2019. Вип. 60. ч. 2. С.395 – 401. Doi:/10.30970/vch.6002.395

12. Дутка Володимир, Мідяна Галина, Пальчикова Олена, Дутка Юрій, Нагорняк Ірина. Окиснення хіноліну пероксидекановою кислотою в різних органічних розчинниках. // Праці НТШ Серія хімічна 2019. Т. LVI. С. 89 – 100.

13. Жак О.В., Шпирка З.М., Карп'як В.В., Дутка В.С. Особливості проведення олімпіади вступника університету з хімії. / Актуальні питання підготовки майбутнього вчителя хімії: Теорія і практики. Збірник наукових праць. Випуск 5. Вінниця «Твори» 2019, С. 97 -100.

14. Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю., Пальчикова О. Окиснення акридину пероксидекановою кислотою в різних розчинниках. Праці НТШ. Серія хімічна. 2020. Т. LX/ С. 22 – 30. doi.org/10.37827*ntsh.chem.2020.60.022

15. Дутка В.С., Мидяна Г.Г., Дутка Ю.В., Пальчикова Г.Я. Влияние органических растворителе на скорость окисления сульфоксидов пероксикислотами // Журнал Общей Химии. 2020. Том. 90. № 3. С. 338 – 345. DOI: 10.31857/S0044460X20030026.

16. Dutka V.S., Midyana G.G., Dutka Yu.V., Pal'chikova E.Ya. Effekt of organic solvents on the raie of oxidation of sulfoxides with peroxy acids// Russian Journal of general chemistry. 2020. Vol. 90. No. 3. P. 329 – 334. DOI: 10.1134/S1070363230030020.

17. Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю., Пальчикова О. Вплив органічних розчинників на швидкість окиснення сульфоксидів пероксикислотами // Вісник Львівського ун-ту. Сер. Хім.. 2020. Вип. 61. Ч.2 С. 478 – 487. DOI: https:/doi.org/10.30970/vch.6102.478.

18. Pokutsa A., Tkach S., Zaborovsky A., Bloniarz P., Paczeŝniak T., Muzart J. Sustainable Oxidation of Cyclohexane and Toluene in the Presence of Affordable Catalysts: Impact of the Tandem of Promoter/Oxidant on Process Efficiency. ACS Omega, 2020, 5, 7613–7626. DOI: 10.1021/acsomega.0c00447.

19. Pokutsa A., Bloniarz P., Fliunt O., Kubaja Y., Zaborovskyi A., Paczeŝniak T. Sustainable oxidation of cyclohexane catalyzed by a VO(acac)2-oxalic acid tandem: the electrochemical motive of the process efficiency. RSC Adv., 2020, 10, 10959-10971. DOI: 10.1039/d0ra00495b.

20. Dariya S. Maksym; Andriy B. Zaborovsky; Yuliya Y. Kubaj; Pawel Bloniarz; Tomasz Pacześniak; Jacques Muzart; Alexander P. Pokutsa Versatile and Affordable Approach for Tracking the Oxidative Stress Caused by the Free Radicals: the Chemical Perception. Chemistry Select, 2020, 5, 13814 –13818. DOI: 10.1002/slct.202003305.

21. 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

22. 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.

23. 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.

24. 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.

25. Dutka V.S., Kovalskyi Ya. P., Midyana G.G. Adsorption of peroxides on aerosiles and magnesium oxide// Voprosy khimii and khemiceskoi tekhnologii, 2022, No. 1. P. 47 – 53. DOI: 10.32434/0321-4095-2022-140-1-47-53

(Scohus)

26. Дутка В., Мідяна Г. Дутка Ю., Пальчикова О. Окиснення N, N-диметиланіліну пероксинонановою кислотою в органічних розчинниках // Вісник Львівського університету. Серія хімічна 2022. вип. 63. С. 383 – 339. DOI: 10.30970/vch.6391.383

27. Dutka V.S., Kovalskyi Ya. P., Midana G. G. Physicochemical properties of maleic anhydride copolymers and their adsorption on aluminium oxide. Ukrainian conference with international participation “Chemistry, Physics and Technology of Surface” 19 – 20 October 2022, Kyiv, Ukraine P. 49.

28. Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю., Пальчикова О. N-окиснення хіноліну пероксикислотами в різних органічних розчинниках. //Праці НТШ. Хім. науки 2022. Т. LXX, С. 90 – 101. DOI 10:37827/ntch.2020 70.090.

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
(молодший науковий співробітник, 02.00.04)

Киця Андрій Романович
(д. х. н.)

Максим Дарія Степанівна
(молодший науковий співробітник, 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

