

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U102513

Державний реєстраційний номер: 0119U002032

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-02-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження механізмів та особливостей (кінетика, селективність, конверсія) перетворень гліцерину та його похідних, у присутності отриманих гетерогенних каталізаторів, у перспективні сполуки з корисними властивостями. Виявлення впливу походження та складу вихідної сировини на особливості утворення цільових продуктів.

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

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: 0442350981

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.): 2748.333

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Продукти тонкого органічного синтезу на основі каталітичних перетворень гліцерину та його похідних.

Назва роботи англійською:

Products of fine organic synthesis based on catalytic transformations of glycerin and its derivatives.

Реферат українською:

Об'єкти дослідження – гліцерин, ацеталі, кеталі, природні алюмосилікати (бентоніт, клиноптилоліт, трепел). Мета роботи: виявити перспективність кислотно-модифікованих алюмосилікатів, додатково імпрегнованих хлоридами перехідних металів (купруму або кобальту), в якості каталізаторів перетворень гліцерину у сполуки, що мають перспективність в якості присадок для моторних палив, фармації, косметики, харчової промисловості тощо. Методи дослідження: газова хроматографія, спектрофотометрія, потенціометрія. Проведено пошук, систематизовано та узагальнено літературні дані про результати ацилювання гліцерину оцтовою кислотою в моноацетин (МА) діацетин (ДА) та триацетин (ТА) у присутності гетерогенних кислотних каталізаторів. На прикладах взаємодії гліцерину (Гл) з ацетоном (Ац) показано перспективність модифікованих нітратною кислотою зразків природних клиноптилоліту (Н-КПТ), бентоніту (Н-БНТ) та трепелу (Н-ТРП) в якості каталізаторів трансформації Гл до циклічних ацеталів. Виявлено фактори, які визначають оптимальні умови кислотної модифікації вихідної сировини, що забезпечують максимальну конверсію Гл і каталітичну активність отриманих зразків. В реакціях гліцерину (Гл) з ацетоном (Ац) та оцтовою кислотою (АА) зіставлено каталітичні властивості зразків кислотно-модифікованих бентоніту (Н-БНТ), клиноптилоліту (Н-КПТ) та трепелу (Н-ТРП), що містять додатково внесені (змочуванням та просоченням) хлориди купруму(ІІ) та кобальту(ІІ). Виявлено, що незалежно від способу «металізації», наявність Cu(ІІ) та Co(ІІ) у більшості досліджених зразків призводить практично до їх повної дезактивації. Винятком є зразок Н-БНТ в реакції Гл з Ац. У присутності зразків Н-КПТ-3_3 (2,5 мас.%; 5 мас.%) та Н-ТРП-3_3 (5 мас.%), незалежно від змісту купруму та кобальту, домінуючим продуктом реакції є моноацетин із селективністю 58-67%. Наявність іонів купруму та кобальту в Н-БНТ-3_3 призводить до зміни селективності продуктів реакції і, в даному випадку, також домінуючим є моноацетин.

Реферат англійською:

Objects of research – glycerol, natural aluminosilicates (bentonite, clinoptilolite, trepel). Aim of research: to identify the prospects of acid-modified aluminosilicates, additionally impregnated with chlorides of transition metals (copper or cobalt), as catalysts for glycerol conversion into compounds that have potential as additives for motor fuels, pharmacy, cosmetics, food industry, etc. Research methods: gas chromatography, spectrophotometry, potentiometry. Literature data about results of glycerol acylation with acetic acid to monoacetin (MA) diacetin (DA) and triacetin (TA) in the presence of heterogeneous acid catalysts are searched, systematized and generalized. On examples of glycerol (Gl) interaction with acetone (Ac) show the viability of nitric acid-modified samples of natural clinoptilolite (H-CPT), bentonite (H-Bnt) and trepel (H-TRP) as catalysts for Gl transformation to cyclic acetals. Factors that determine optimal conditions for acid modification of raw material, providing maximum Gl conversion and catalytic activity of obtained samples, have been identified. In reactions of glycerol (Gl) with acetone (Ac) and acetic acid (AA), catalytic properties of acid-modified bentonite (H-Bnt), clinoptilolite (H-CPT) and trepel (H-TRP), containing additionally introduced (by wetting and impregnation) chlorides of copper (II) and cobalt (II) were compared. It was found that, regardless of "metallization" method, presence of Cu (II) and Co (II) in most of studied samples leads to almost complete deactivation. An exception is sample of H-Bnt in Gl reaction with Ac. In the presence of H-KPT-3_3 (2.5 wt.%; 5 wt.%) and H-TRP-3_3 (5 wt.%) samples, regardless of copper and cobalt content, the dominant reaction product is monoacetin with a selectivity of 58- 67%. In the presence of copper and cobalt ions in H-Bnt-3_3, monoacetin is dominant.

Індекс УДК:547.9;577.1, 547.426.1; 547.426.2; 547-316; 547.582; 542.9417; 542.943-92; 544.47:544.342.

Коди тематичних рубрик: 31.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Камалов Герберт Леонович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Дослідні зразки (1-2 л) ацеталів та кеталів гліцерину: 2,2-Диметил-4-гідроксиметил-1,3-діоксолан; 2-феніл-1,3-діоксолан-4-метанол/2-феніл-1,3-діоксан-5-ол; 1,4-діоксоспіро[4,5]дек-2-ил-метанол/1,5-діоксоспіро[5,5]ундекан-3-ол.

Назва НТП англійською: Test samples (1-2 L) of glycerol acetals and ketals: 2,2-Dimethyl-4-hydroxymethyl-1,3-dioxolane; 2-phenyl-1,3-dioxolane-4-methanol/2-phenyl-1,3-dioxan-5-ol; 1,4-dioxospiro[4,5]dec-2-yl-methanol/1,5-dioxospiro[5,5]undecan-3-ol.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проведено дослідження взаємодії гліцерину (Гл) з ацетоном (Ац), оцтовою кислотою (АА) в присутності кислотнo-модифікованих зразків бентоніту (Н-БНТ), кліноптілоліта (Н-КПТ), трепелу (Н-ТРП). Характерною особливістю досліджених процесів є необхідність зміни умов реакції при зміні карбонільної сполуки-партнера Гл. Кінетика реакцій задовільно описується моделлю Міхаеліса-Ментен. Виявлено оптимальні умови Н-модифікації (концентрація азотної, сірчаної кислот, просочення розчинами хлоридів купруму(II) та кобальту(II)) зразків природних КПТ, Н-БНТ, ТРП, в якості каталізаторів трансформації Гл до циклічних ацеталів та ацетинів. Виявлено, що у присутності зразків Н-КПТ/Cu, незалежно від вмісту Cu(II) та способу приготування каталізатору, величини швидкості убутку Гл (WoГл) та накопичення продуктів ацилування не змінюються. Але у випадку зразків Н-БНТ/Cu величини WoГл та накопичення моноацетину (WoМА) зменшуються, а накопичення діацетину (WoDA) та триацетину (WoТА) практично не змінюються. Із збільшенням вмісту Co(II) в зразках Н-КПТ/Co, величини WoГл та WoМА зменшуються майже в 1,5 разів, а величина WoDA зростає незначно. Виявлено, що природа мінеральної кислоти (H₂SO₄, HNO₃) не впливає на каталітичні властивості зразків, отриманих модифікацією початкових алюмосилікатів відповідною кислотною. У присутності зразків Н-КПТ-3_3 (2,5 мас.%; 5 мас.%) та Н-ТРП-3_3 (5 мас.%), незалежно від вмісту купруму та кобальту, домінуючим продуктом реакції є моноацетин із селективністю 58-67%. Наявність іонів купруму та кобальту в Н-БНТ-3_3 призводить до зміни селективності продуктів реакції і, в даному випадку, також домінуючим є моноацетин.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія енергоресурсів, Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: Підприємства хімічної галузі

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

Давтян А.С. Каталітичні властивості кислотно-модифікованих алюмосилікатів вітчизняних родовищ України в ацеталізації гліцерину ацетоном та бензальдегідом. Тези доп. XII всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські читання – 2020» – 21-23 квітня 2020 року. Харків. – С.77.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Андронаті Сергій Андрійович

Д. Х. Н.

Перелік осіб-виконавців

Давтян Аракся Сейранівна

(молодший науковий співробітник)

Левченко Ольга Олександрівна

(молодший науковий співробітник)

Чіхічін Дмитро Герасимович

(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку

Іллюшко Н. О.

облікових документів

Телефон

+38 (067) 724-39-55

Реєстратор

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

