

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000055

Державний реєстраційний номер: 0117U000021

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Розробка методів отримання 2,5-фурандикарбонової кислоти окисненням дизаміщених фуранів

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім.Л.М.Литвиненка

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження: Харківське шосе, 50, м. Київ, Київська обл., 02160, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442923032, 0442923081

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.): 1691.082

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Отримання біологічно-активних сполук і мономерів на основі принципів супрамолекулярного каталізу та "зеленої" хімії

Назва роботи англійською:

Obtaining of biologically active compounds and monomers based on the principles of supramolecular catalysis and "green" chemistry

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – 2,5 – дизаміщені фурани та продукти їх окиснення, зокрема, 2,5-фурандикарбонова кислота та 5,5' – дикарбокси-2,2'дифуран. Мета роботи – визначення теоретичних засад створення технології спрямованого синтезу 2,5-фурандикарбонової кислоти шляхом каталізованого N-гідроксиімідними радикалами аеробного окиснення 2,5-дизаміщених фуранів, що є продуктами глибокої переробки рослинної біомаси. Методи дослідження – ЯМР-, ІЧ-спектроскопія, кінетичні вимірювання, хроматографія, УФ-спектроскопія Створено скринінговий ряд сполук, що можуть утворюватись під час переробки гексозанвмісної рослинної біомаси та виступати як вихідні сполуки при розробці технології отримання 2,5-фурандикарбонової кислоти, для дослідження каталітичної активності гомогенних каталізаторів. Оптимізовані та вдосконалені методи отримання низки 2,5-дизаміщених фуранів, що дозволило суттєво збільшити виходи цільових сполук та поліпшити їх якість. Опрацьована та вдосконалена методика синтезу подвійного простого етеру 5-гідроксиметилфурфуролу, що вирізняється підвищеною стабільністю при зберіганні. Досліджено перебіг реакції окиснення заміщених фуранів молекулярним киснем в широкому інтервалі температур в присутності каталітичної системи N-гідроксифталімід – іони перехідних металів (Co, Mn, V) та визначені основні продукти окиснення. Для встановлення елементарних стадій механізму була досліджена елементарна реакція відриву атома водню N оксильними радикалами, утвореними із нітрокисильних радикалів шляхом окиснення йодбензендіацетатом в ацетонітрилі від C H зв'язків на низці похідних фурану методом УФ спектроскопії та визначені зміна реакційної здатності в ряду заміщених N-гідроксиімідів при взаємодії з 2,5-дизаміщеними фуранами.

Реферат англійською:

The object of study - 2,5 - disubstituted furans and their oxidation products, in particular, 2,5-furandicarboxylic acid. The aim of the work is to determine the theoretical foundations of the technology of directed synthesis of 2,5-furandicarboxylic acid by aerobic oxidation of 2,5-disubstituted furans catalyzed by N-hydroxyimide radicals. Research methods - NMR, IR spectroscopy, kinetic measurements, chromatography, UV spectroscopy A screening series of compounds that can be formed during the processing of sugar-containing plant biomass and act as starting compounds in the development of technology for the production of 2,5-furandicarboxylic acid, to study the catalytic activity of homogeneous catalysts. Optimized and improved methods for obtaining a number of 2,5-disubstituted furans, which significantly increased the yields of the target compounds and improve their quality. The method of synthesis of double simple ether of 5-hydroxymethylfurfural, which is characterized by increased storage stability, has been developed and improved. The course of the oxidation reaction of substituted furans by molecular oxygen in a wide temperature range in the presence of the catalytic system N-hydroxyphthalimide - transition metal ions (Co, Mn, V) was studied and the main oxidation products were determined. To establish the elementary stages of the mechanism, the elementary reaction of separation of the hydrogen atom by N-oxyl radicals formed from nitroxyl radicals by oxidation with iodobenzene diacetate in acetonitrile was investigated from CH bonds on a number of furan derivatives by UV spectroscopy and the change in reactivity in a number of substituted N-hydroxyimides when interacting with 2,5-disubstituted furans was determined.

Індекс УДК: 547.892+547.724.2+544.431.7+544.472.3+544.424 : 547.565

Коди тематичних рубрик:

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Попов Анатолій Федорович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Метод отримання 2,5-фурандикарбонової кислоти аеробним окиснення 5,5'-диформіл-2,2'-дифурфурилового етеру при каталізі системою N-гідроксид / іони Co (II) / Mn (II).

Назва НТП англійською: Method for producing 2,5-furandicarboxylic acid by aerobic oxidation of 5,5'-diformyl-2,2'-difurfuryl ether by catalysis with N-hydroxyimide / Co (II) / Mn (II).

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології, Методи, теорії, Поліпшення стану навколишнього середовища

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено метод синтезу 2,5-фурандикарбонової кислоти аеробним окиснення 5,5'-диформіл-2,2'-дифурфурилового етеру при каталізі системою N-гідроксид / Co (II) / Mn (II), що дозволяє проводити окиснення в один етап. Використання каталізатору N-гідроксид / Co (II) / Mn (II) дозволяє проводити окиснення при атмосферному тиску кисню з високими значеннями конверсії та селективності.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Споживачі продукції: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка НАН України

Перспективні ринки: Україна, Ринок стран Європейського Союзу, Латинської Америки

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

1. Kushch O. V., Hordieieva I. O., Kompanets M. O., Zosenko O. O., Opeida I. A., Shendrik A. N. Hydrogen Atom Transfer from Benzyl Alcohols to N Oxyl Radicals. Reactivity Parameters. J. Org. Chem., 2021, 86(5), 3792-3799. <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.joc.0c02595>, Journal Impact Factor: 4.354
2. Мельнікова А. М., Гордєєва І. О., Компанець М. О., Куш О. В., Шендрик О. М. Реакційна здатність арилзаміщених фталімід-*N*-оксильних радикалів у реакціях відриву *H*-атома від *p*-*C*-*H* зв'язків бензилових спиртів: тези доп. IV Міжнар. (XIV Укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення», 23-25 березня 2021 р. м. Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2021. С. 110. <https://jhps.donnu.edu.ua/article/view/10037>
3. Куш О. В., Гордєєва І.О., Компанець М. О., Опейда Й. О. Шендрик О. М. Параметри реактивності у реакціях переносу *H*-атома від *C*-*H* зв'язків бензилових спиртів до *N*-оксильних радикалів: тези доп. XVIII наук. конф. «Львівські хімічні читання – 2021». 31 травня – 2 червня 2021 р.: зб. наук. праць – Львів, 2021. – С. У22. https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2021/06/Zbirnyk-tez_LKHCH-2021.pdf

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович
д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Єфімова Ірина Владиславівна
(к. х. н.)

Аніщенко Віктор Миколайович
(к. х. н.)

Аніщенко Ганна Володимирівна

Дикун Олексій Михайлович
(к. х. н.)

Компанець Михайло Олександрович
(к. х. н.)

Корженевська Надія Галактіонівна
(к. х. н.)

Остапюк Світлана Миколаївна

Редько Андрій Миколайович
(к. х. н., 02.00.04)

Рибаченко Володимир Іванович
(д. х. н., 02.00.04)

Тамаркіна Юлія Володимирівна
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Коновкіна Ольга Анатоліївна

Телефон

+38 (095) 408-59-49

Реєстратор

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

