Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U001296

Державний реєстраційний номер: 0123U102170

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Порівняльне дослідження каталітичної дії бінарної системи від структури органокаталізаторів >NO-H в процесах окиснення >C-H і H(HO)C-вмісних субстратів. Дослідження механізму каталізу органокаталізатором N-гідроксифталімідом окиснення по бензильному >C-H зв'язку в рідкій фазі. Дослідження ролі поверхні гетерогенного каталізатора при каталізі системою N-гідроксифталімід-оксид перехідного металу в окисненні по бензильному C-H. Встановлення закономірностей та підбір оптимальних умов процесу УФ-ініційованої полімеризації функціональних полімерів та наноструктурованих композитів на основі акрилатних і вінілових мономерів та золь-гель систем.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного документа: Проміжний 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, буд. 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, 01601, 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 6237.878

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розроблення нових функціональних наноструктурованих мембран і каталізаторів для окиснення C-H-, H(HO)C-вмісних сполук природного та синтетичного походження

Назва роботи англійською:

Development of new functional nanostructured membranes and catalysts for oxidation of C-H-, H(HO)C-containing compounds of natural and synthetic origins

Реферат українською:

Об'єктом дослідження є каталітичні системи з перехідних металів (Mn, V, Cu), та N-гідроксиімідів для окиснення органічних субстратів, полімерні гібридні мембрани на основі акрилових мономерів, магнітосепарабельний наноструктурований CuO каталізатор типу ядро-оболонка. Предметом дослідження є каталіз окиснення органічних речовин киснем в присутності органокаталізатора N-гідроксифталіміду та гетерогенного каталізатора; синтез і дослідження полімерних мембран з протонопровідними і іоно-обмінними властивостями; каталітичні властивості нанокомпозитів у системі Фентона; вплив температури та pH середовища на ефективність окиснення. Метою роботи є розробка нових каталітичних систем на основі оксидів металів та N-гідроксиімідів для окиснення киснем органічних субстратів по C-H звязках; синтез амфіфільних полімерних гібридних мембран з високими протонопровідними та іоно-обмінними властивостями; створення магнітосепарабельних CuO каталізаторів Фентона типу ядро-оболонка. Було досліджено механізм каталітичної дії N-гідроксиімідів при окисненні з O2. Показано суттєву роль реакції фталімід-N-оксильних радикалів з утворюваним в реації гідропероксидом. Отримано загальне кінетичне рівняння каталізу з врахувнням цієї реакції. Запропоновано механізм гомогенно-гетерогенного каталізу. Зшиті полімерні мембрани синтезовано шляхом УФ-ініційованої радикальної кополімеризації акрилових мономерів: акрилонітрилу, акрилової кислоти та 2-акриламідо-2-метилпропансульфонової кислоти і зшивач N,N'-метилен(біс)акриламід. Аналіз фізико-хімічних властивостей засвідчив, що дані мембрани можуть бути використані у низькотемпературних твердотільних паливних елементах. Було досліджено каталітичну активність гетерогенного наноструктурованого каталізатора SiO2/CoFe2O4/SiO2/CuO у системі Фентона та визначено вплив pH середовища та температури на ефективність окиснення. Кінетичні характеристики дозволяють його використання для тонкого доочищення стічних вод від органічних забрудників.

Реферат англійською:

The object of the research is catalytic system of transition metals (Mn, V, Cu) with N-hydroxyimides for oxidation of organic substrates, polymer hybrid membranes based on acrylic monomers, magnetically separable nanostructured core-shell type CuO catalyst. The research subject is catalytic oxidation of organic substances by oxygen using organocatalyst N-hydroxyphthalimide and a heterogeneous catalyst; synthesis and investigation of polymer membranes with proton-conducting and ion-exchange properties; catalytic properties of nanocomposites in the Fenton system; influence of temperature and pH of the environment on the oxidation efficiency. This work aims at the development of new catalytic systems based on metal oxides and N-hydroxyimides for the oxidation of organic substrates by oxygen via C-H bonds; synthesis of amphiphilic polymer hybrid membranes with high proton-conducting and ion-exchange properties; creation of magnetically separable CuO Fenton catalysts of core-shell type. The mechanism of catalysis by N-hydroxyimides during oxidation by O2 was investigated. We showed the essential role of the reaction between phthalimide-N-oxyl radicals and hydroperoxide formed in the reaction. We obtained the general kinetic equation of catalysis that takes into account this reaction. A mechanism of homogeneous-heterogeneous catalysis was proposed. Crosslinked polymer membranes were synthesized via UV-initiated radical copolymerization of acrylic monomers: acrylonitrile, acrylic acid and 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonic acid with crosslinker N,N'-methylene (bis)acrylamide. The

analysis of physico-chemical properties proved that these membranes can be used in low-temperature solid-state fuel cells. The catalytic activity of the heterogeneous nanostructured catalyst SiO2/CoFe2O4/SiO2/CuO in the Fenton system was investigated and the effect of medium pH and temperature on the oxidation efficiency was determined. Catalyst can be used for fine purification of wastewater.

Індекс УДК: 543.082/.084:54-14; 541.12.011.3.082/.084, 541.124.2:127 + 547.53

Коди тематичних рубрик: 59.35.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Шепарович Роман Богданович

Науковий ступінь: к. х. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Полімерний адсорбент для очистки водних розчинів від іонів важких металів

Назва НТП англійською: Polymeric adsorbent for purification of aqueous solutions from heavy metal ions

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Вироби технічні, Технології, Матеріали

Галузь застосування: Можливими споживачами розробленої НТП можуть бути водоочисні підприємства, підприємства харчової галузі.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створена НТП відповідає пріоритетному напрямку розвитку науки і техніки “Нові речовини і матеріали”. Суть НТП полягає у створенні нового полімерного матеріалу для адсорбції іонів важких металів (Co(II), Ni(II) та ін.) методом УФ-ініційованої 2,2-диметилетокси-2-фенілацетофеноном кополімеризації мономерів акрилонітрилу (АН), акрилової кислоти (АК), 2-акриламідо-2-метилпропан-1-сульфокислоти (АМПС) при їх оптимальному співвідношенні АН : АМПС : АК = 60 : 30 : 10 ваг. %. Для формування зшитої структури полімера використовується зшивальний агент N,N’-метилен-біс-акриламід. Наявність сульфогруп у складі комономера 2-акриламідо-2-метилпропан-1-сульфокислоти (АМПС) забезпечує сильну взаємодію одержаного полімеру з іонами важких металів завдяки іонному зв’язку. Технологічними перевагами створеної НТП є високі експлуатаційні характеристики матеріалу. Економічна привабливість розробленої НТП полягає у використанні для синтезу полімерного матеріалу недорогих доступних речовин та обладнання, а також в енергоощадливості та високій швидкості процесу синтезу. Екологічність НТП забезпечується відсутністю агресивних розчинників у процесі синтезу.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: розробка триває

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: водоочисні підприємства, підприємства харчової галузі

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Спосіб тонкого очищення стоків молочних виробництв методом Фентона

Назва НТП англійською: The method of fine purification of dairy effluents by the Fenton method

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Вироби технічні, Технології, Матеріали

Галузь застосування: Можливими споживачами розробленої НТП можуть бути підприємства молочної галузі, приватні фермерські господарства, підприємства харчової галузі.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створена НТП відповідає пріоритетному напрямку розвитку науки і техніки “Екологія та охорона середовища”. Суть НТП полягає у використанні гетерогенного багатошарового магніточутливого каталізатора типу «ядро-оболонка» складу $SiO_2/CoFe_2O_4/SiO_2/CuO$ для тонкого очищення стоків молочних виробництв методом Фентона, в якому в якості окисника замість пероксиду водню використовується кисень повітря. Для проведення процесу деградації органічних сполук повітря подають протягом 25 - 30 хв. за кімнатних температур зі швидкістю 530 - 550 $см^3/хв$ до встановлення бульбашково-пінного режиму контактування між каталізатором, киснем та органічними забрудниками, в результаті чого утворюються окисні частинки, які окиснюють органічні сполуки. Використання кисню повітря як окисника є ефективним як щодо глибини очищення від органічних сполук, так і до тривалості очищення, а можливість вилучення каталізатора магнітною сепарацією для повернення його у цикл значно спрощує апаратне оформлення процесу. Технологічними перевагами створеної НТП є висока ефективність процесу очищення стічних вод до показників, що дозволяють їх повернення у виробничий цикл. Економічна привабливість розробленої НТП полягає у використанні недорогих доступних речовин, простого обладнання, енергозаощадливості та високій швидкості процесу. Екологічність НТП забезпечується використанням реагентів, які не впливають на оточуюче середовище, а сам процес повністю відповідає критеріям «зеленої хімії».

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Подано патент на корисну модель.

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства харчової галузі, приватні фермерські господарства, підприємства молочної галузі

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Створення нових каталітичних систем ТМО – NHPI та АМА - NHPI для аеробного окиснення органічних субстратів по С-Н звязку

Назва НТП англійською: Development of new catalytic systems TMO - NHPI and AMA - NHPI for aerobic oxidation of organic substrates via C-H bond

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Вироби технічні, Технології, Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: Можливими споживачами НТП є хімічні та фармацевтичні підприємства

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: НТП відповідає пріоритетному напрямку “Нові речовини і матеріали” Суть НТП полягає в створенні нової каталітичної системи шляхом поєднання оксидів перехідних 3-d металів з N-гідроксифталімідом, яка проявляє високу актиивність в окисненні органчних субстратів О2 та НООН в м'яких умовах. Показано залежність їх активності від окисно-відновних властивостей поверхні оксидів. Встановлено, що серед досліджених оксидів найефективнішими є системи MnOx + NHPI та VOx + NHPI. Запропоновано нове загальне рівняння для опису каталізу NHPI, яке охоплює відомі рівняння Амораті та рівняння Гемондса, які описували часткові випадки цього каталітичного процесу . Перевага НТП полягає у створенні нової теорії, що описує гомогенно-гетерогенний каталіз, яка дозволяє систематизувати відомі факти в цій області і має прогностичну цінність. Розроблена каталітична система дає можливість проводити процес при м’якших умовах – нижчих температурах та тисках, значно зменшує число викидів та токсичних побічних продуктів і дозволяє регулювати селективність реакції. Економічність НТП - використання недорогих каталізаторів, та молекулярного кисню – як найдешевшого та екологічного найбільш «зеленого» з окисників.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: розробка триває

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: хімічні підприємства, фармацевтика

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

I.A. Opeida, R.B. Sheparovych, W.Ya. Suprun, Kinetic analysis of aerobic oxidation catalyzed by a hybrid heterogeneous-homogeneous system containing supported Mn and V oxides and N-hydroxyphthalimide, Journal of Catalysis, 424, 2023, 197-210, (Q1, IF: 7.3) https://doi.org/10.1016/j.jcat.2023.04.016.

Zhyhailo, M., Demchyna, O., Yevchuk, I., Makota, O. Co(II) and Ni(II) Removal from Aqueous Solutions by Polymer and Polymer/Silica Adsorbents with Sulfo and Carboxyl groups. Acta Chimica Slovenica., 2023, 70(3), pp. 361–370 (Q3, IF: 1.524) https://doi.org/10.17344/acsi.2022.7819

Rymsha Kh. V., Yevchuk I. Yu., Zhyhailo M. M. et al. Hydrogels and their composites based on sulfo-containing acrylates: preparation, properties, and proton conductivity. J Solid State Electrochem (2023). (Q2, IF: 2.5) https://doi.org/10.1007/s10008-023-05619-2

Курилець, О. Г., Макідо, О. Ю., Хованець, Г. І., & Васійчук, В. О. (2023). Використання гетерогенної системи Фентона для очищення органовмісних стічних вод. Інтегровані технології та енергозбереження, (2), 3-14. https://doi.org/10.20998/2078-5364.2023.2.01

Л. Опейда, Л. Волкова. УТВОРЕННЯ РАДИКАЛІВ У КАТАЛІЗІ АЕРОБНОГО ОКИСНЕННЯ СИСТЕМАМИ ПЕРМАНГАНАТ – ОРГАНОКАТАЛІЗАТОР // Збірник тез доповідей XIX НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ “ЛЬВІВСЬКІ ХІМІЧНІ ЧИТАННЯ – 2023”. 29–31 травня 2023 року, м. Львів, Україна.

Р. Шепарович, О. Хавунко, А. Новохатько, Й. Опейда. ВПЛИВ КИСЛОТНОСТІ ПОВЕРХНІ НА КАТАЛІТИЧНУ АКТИВНІСТЬ ОКСИДІВ ПЕРЕХІДШИХ МЕТАЛІВ У ПОЄДНАННІ З NHPI В ПРОЦЕСАХ РІДИННО-ФАЗОВОГО ОКИСНЕННЯ // Збірник тез доповідей XIX НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ “ЛЬВІВСЬКІ ХІМІЧНІ ЧИТАННЯ – 2023”. 29–31 травня 2023 року, м. Львів, Україна.

Л. Волкова, Л. Опейда. ПРО МЕХАНІЗМИ РЕАКЦІЙ 2,3-ДИМЕТИЛБУТАНУ В РОЗЧИНАХ КОНЦЕНТРОВАНОЇ СІРЧАНОЇ КИСЛОТИ // Збірник тез доповідей XIX НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ “ЛЬВІВСЬКІ ХІМІЧНІ ЧИТАННЯ – 2023”. 29–31 травня 2023 року, м. Львів, Україна.

Курилець О. Г., Макідо О. Ю., Дзядик М. А. До питання вдосконалення систем очищення стічних вод молокопереробних підприємств // Збірник матеріалів VIII Міжнародного молодіжного конгресу «Сталий розвиток: захист навколишнього середовища. Енергоощадність. Збалансоване природокористування», 2–3 березня 2023 р., м. Львів, Україна. – с. 72.

Zhyhailo M.M., Demchyna O.I., Yevchuk I.Yu. Proton conductivity of sulfo-containing polymeric and organic-inorganic materials // VI Міжнародна (XVI Українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених “Хімічні проблеми сьогодення” (ХПС-2023), 21–23 березня 2023 р., Вінниця, Україна. – с. 120.

Макідо О. Ю., Хованець Г. І., Курилець О. Г. Вплив температури на швидкість процесу окиснення органічних речовин в гетерогенній системі Фентона // Збірник наукових статей XXI Міжнародної науково-практичної конференції «Ресурси природних вод Карпатського регіону / Проблеми охорони та раціонального використання», 25–26 травня 2023 р., м. Львів, Україна. – с. с. 181–182.

Zhyhailo M.M., Demchyna O.I., Yevchuk I.Yu., Babkina N.V., Maksymych V.M. Viscoelastic properties of polymeric and nanocomposite proton conductive membranes for fuel cells // International Research and Practice

Conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO-2023), 16–19 August 2023, Bukovel, Ivano-Frankivsk region, Ukraine. – p. 115.

Makido O. Yu., Khovanets’ G. I., Kurilets’ O. G., Diadenchuk A. V. Influence of surfactants on adsorption and catalytic properties of Fenton-like catalysts // Book of abstracts of XI International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (NANO – 2023), 16–19 August 2023, Bukovel, Ivano-Frankivsk region, Ukraine. – p. 215.

Zhyhailo M.M., Demchyna O.I., Yevchuk I.Yu. Synthesis and properties of polyacrylate and polyacrylate/silica multifunctional membranes // Міжнародна конференція «Сучасні досягнення в харчовій, органічній та полімерній хімії», 24-26 жовтня 2023 р., Львів, Україна. – с. 46.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Киця Андрій Романович
д. х. н.

Перелік осіб-виконавців

Євчук Ірина Юріївна
(к. х. н.)

Демчина Оксана Ігорівна
(к. х. н., 02.00.06)

Жигайло Марія Михайлівна
(к. х. н.)

Заборовський Андрій Богданович
(молодший науковий співробітник, 02.00.04)

Максим Дарія Степанівна
(молодший науковий співробітник, 02.00.04)

Макідо Олена Юріївна
(к. т. н., 02.00.01)

Мусій Ростислав Йосипович
(к. х. н., 02.00.06)

Новохатько Анастасія Олександрівна

Опейда Йосип Олексійович
(д.х.н., 02.00.15)

Хавунко Оксана Юліанівна
(к. х. н.)

Хованець Галина Ігорівна
(к. х. н., 02.00.06)

Відповідальний за підготовку облікових документів Шепарович Р.Б.

Телефон +38 (095) 047-49-84

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

