Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U000491

Державний реєстраційний номер: 0113U002858

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-03-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Синтез і надання російській стороні, заздалегідь узгоджених, 5-10 зразків N-, O- і S- лігандів. Визначення основних маршрутів каталітичного окиснення DBE і CH повітрям.

Початок етапу: 10.2013

Закінчення етапу: 12.2013

Вид звітного документа: Остаточний 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:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (048) 766-20-44: факс 048 765-96-02

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державне агентство з питань електронного урядування України

Код за ЄДРПОУ: 37471818

Місцезнаходження: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2071730

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 52 - договір з вітчизняною організацією (органами місцевої ради, фондом, асоціацією, концерном тощо)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 90

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Гомо- і гетерометалічні інтермедіати та продукти взаємодії моно- та біядерних піразолатних комплексів 3d металів з відповідними карбоксилатами, як каталізатори (моделі каталізаторів) утворення та перетворень гідропероксидів

Назва роботи англійською:

Homo- and heterometallic intermediates and products of 3d metals mono- and binuclear pyrazolate complexes intraction with the corresponding carboxylates, as catalysts (models of catalysts) of hydroperoxides formation and transformations.

Реферат українською:

Основними продуктами окиснення дибензилового етеру (DBE) у присутності одно- і різнорідних карбоксилатних і карбоксилат-піразолатних комплексів кобальту(II), купруму(II) і ніколу(II) (всього 24 сполуки) є моногідропероксид (HP), бензальдегід (BAld) і бензойна кислота (BAc). У присутності комплексів Co(II) окиснення DBE характеризується, як правило, більшою швидкістю та селективністю по BAld, тоді як у разі комплексів Cu(II) в оксидаті домінує HP. Комплекси Cu(II) проводять глибше окиснення DBE до BAc, ніж комплекси Co(II). Для каталітичної активності біядерних комплексів Cu(II) зі структурою "китайського ліхтарика", виявлено такий ряд "впливу" термінальних лігандів: Hdmpz > NEt3 ? PCy3 ? MeOH > PPh3 ? OPPh3 ? OC(NH2). При окисненні циклогексену (ЦГ) у присутності півалатних комплексів з металоостовом CoM2O (M = Co-I, Cr-II, Fe-III) та комплексу NiCr2OPiv6·3Ppy (IV), конверсія ЦГ і початкові швидкості накопичення гідропероксиду порівнянні з такими для DBE, а селективність змінюється таким чином: IV<I<II<<III. У присутності комплексів I і II, на одних і тих же каталітичних центрах відбувається практично синхронне утворення ЦГону і ЦГолу. У разі півалатів II-IV можливе утворення "пероксо-димерів" M-O-O-M/, в яких реакційна здатність зв'язків O-O буде різною, внаслідок чого змінюватиметься не лише швидкість окислення ЦГ, але і селективність процесу.

Реферат англійською:

Monohydroperoxide (HP), benzaldehyde (BAld) and benzoic acid (BAc) are basic products of dibenzyl ether (DBE) oxidation in the presence of cobalt(II), copper(II) and nickel(II) homo- and heteroleptic carboxlate and carboxylate-pyrazolate complexes (24 compounds). DBE oxidation is characterized by high rate and BAld selectivity in the presence of Co(II) complexes, whereas in the case of Cu(II) complexes, HP prevails in the oxidate. The Cu(II) complexes carry out deeper DBE oxidation to BAc in comparison with Co(II) complexes. For catalytic activity of Cu(II) binuclear complexes with the "chinese lantern" structure, such row of "influence" of terminal ligands is educed: Hdmpz > NEt3 ? PCy3 ? MeOH > PPh3 ? OPPh3 ? OC(NH2). At cyclohexene (CH) oxidation in the presence of pivalate complexes with CoM2O framework (M = Co - I, Cr - II, Fe - III) and NiCr2OPiv6·3Ppy (IV), CH conversion and initial rates of hydroperoxide accumulation are comparable with such for DBE, and selectivity changes thus: IV<I<II<<III. In the presence of complexes I and II, there is practically synchronous formation of CHon and CHol on the same catalytic centers. Formation of "peroxo-dimers" M-O-O-M/ is possible in the presence of pivalates II-IV. Reactivity of O-O bonds will be different, as a result CH oxidation rate and selectivity will change.

Індекс УДК: 547, 547.098+542.943+547.26.265+547.36.361+547.514.46

Коди тематичних рубрик: 31.21

Керівники роботи

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

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Маршрути утворення і перетворень моногідропероксидів дибензилового етеру і циклогексену при окисненні останніх киснем повітря у присутності гомо- гетероядерних карбоксилат-піразолатних комплексів перехідних металів (Fe, Co, Ni, Cu). Методи синтезу лігандів з N-, O- та S-донорними центрами, здатними до координації з перехідними металами.

Назва НТП англійською: Formation and transformations routes of dibenzyl ether and cyclohexene monohydroperoxides at oxidation by oxygen of air in the presence of homo- and heteronuclear transition metals (Fe, Co, Ni, Cu) carboxylate-pyrazolate complexes. Synthesis methods of ligands with N-, O- and S-donor centers, able to co-ordination with transition metals.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Хімічна промисловість

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У диоксані і його суміші з дибензиловим ефіром (DBE) велику активність в розкладі пероксиду гідрогену проявляє біядерний комплекс кобальту(II), тоді як в змішаних розчинниках (диоксан:циклогексан, циклогексен) активніший відповідний триядерний комплекс. У присутності вивчених комплексів, в змішаному розчиннику (DBE:диоксан), залежність швидкості розкладу пероксиду гідрогену від концентрації DBE проходить через максимум, збільшуючись приблизно в 2 рази. Комплекси купруму менш активні, чим кобальтові. При об'ємному відношенні DBE:диоксан = 1 : 1, біядерний комплекс Co(II) проявляє велику каталітичну активність порівняно з триядерним, а піразолатний комплекс складу Co((CF3)2pz)2(Hdmpz)2 активніший, ніж бензоатний комплекс Co(OOCPh)2(Hdmpz)2. Виявлено, що при окисненні циклогексену (ЦГ) у присутності півалатних комплексів з металоостовом CoM2O (M = Co-I, Cr-II, Fe-III) та комплексу NiCr2OPiv6·3Ppy (IV), конверсія ЦГ і початкові швидкості накопичення гідропероксиду (ГП) порівнянні з такими для DBE, а селектив

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає замовник

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Хімічна галузь

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

Степанов Д.Е., Грищук Л.В., Иванова Р.Ю., Э.И.Иванов, А.А.ЯворовскийЮ Г.Л.Камалов. Простой способ получения 2-(2-амино-4-арилтиазол-5-ил)пиримидинов. Журн. общей химии- 2013., Т. 83, № 3. С. 473-476.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Іванов Ю.Е.

Камалов Г.Л.

Коцеруба В.А.

Левченко Ольга Олександрівна

Чіхічін Д.Г.

Яворовський А.О.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

