Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U004196

Державний реєстраційний номер: 0110U003510

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-01-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Вивчення кінетики і впливу умов реакції (температура, розчинник, характер каталітичної добавки, атмосфера аргону або повітря, співвідношення продуктів та ін.) на основні маршрути трансформації моногідропероксидів дибензилового етеру і циклогексену в розчинах відповідних оксидатів. Вивчення кінетики каталітичного розкладу пероксиду гідрогену у присутності дибензилового етеру і циклогексену, а також окислення цих субстратів пероксидом гідрогену у присутності комплексів 3d перехідних металів

Початок етапу: 01.2011

Закінчення етапу: 12.2011

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): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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.): 132

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Бі- та поліядерні піразолат-карбоксилати перехідних металів як каталізатори рідиннофазного окислення органічних субстратів з активованими С-Н зв'язками.

Назва роботи англійською:

Di- and polynuclear pyrazolate-carboxylates of the transition metals as catalysts for liquid-phase oxidation of substrates with activated C-H bonds

Реферат українською:

Вивчено кінетику розкладу пероксиду гідрогену та окиснення дибензилового етеру (ДБЕ) повітрям у присутності металокомплексів 3d металів, визначені основні маршрути реакції та вплив складу і структури вихідних комплексів на селективність і конверсію DBE, а також наведені дані про особливості кінетики розкладу пероксиду гідрогену у присутності карбоксилатних та карбоксилат-піразолатних комплексів кобальту і купруму,. Синтезувані поліфункціональних азотвмісні гетероцикли - потенційні ліганди для моделювання координаційної сфери природних металоферментів.

Реферат англійською:

The kinetics of hydrogen peroxide decomposition and dibenzyl ether (DBE) liquid-phase oxidation in the presence of 3d metals complexes was investigated. Main routes of the reaction and influence of the composition and structure of the initial complexes on the selectivity and conversion of DBE were defined. Characteristic of the hydrogen peroxide decomposition's kinetics in the presence of cobalt and copper carboxylate and carboxylate-pirazolate complexes was given. Polyfunctional nitrogen-containing heterocycles - potential ligands for modeling of the coordination sphere of natural metaloenzymes were synthesized

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: Кінетика розкладу пероксиду гідрогена та окиснення дибензилового етеру повітрям у присутності комплексів 3d металів. Синтез поліфункціональних азотвмісних гетероциклів для моделювання координаційної сфери природних металоферментів.

Назва НТП англійською: Kinetics of hydrogen peroxide decomposition and dibenzyl ether's oxidation in the presence of air and 3d metals complexes. Synthesis of polyfunctional nitrogen-containing heterocycles for modeling of natural metaloenzymes' coordination sphere.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: органічна хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезована та запропонована для вивчення в якості нових лігандів група ізомерних N-оксидів 2-фенил-1,2,3-триазолів. У якості вихідних сполук були використані 1- та 3-оксид-2-феніл-1,2,3-триазол[4,5-d]піримідин-5,7-діону. Нагрівання 1-оксид-2-феніл -1,2,3-триазол [4,5-d]піримідин-5,7-діону у водному розчині гідроксиду натрію, а також аміаку, приводить до гідролізу піримідинового циклу з утворенням, відповідно, 1-оксидів 4-аміно- і 4-уреїдо-2-феніл-1,2,3-триазол-5-карбонової кислоти. Вивчення зв'язку між складом і структурою поліядерних металокомплексів та їх каталітичними властивостями дозволяє зрозуміти механізм дії природних металоферментів та конструювати нові активні та селективні каталітичні системи окиснення органічних субстратів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства хімічної галузі

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

Чихичин Д.Г., Коцеруба В.А., Левченко О.А., Яволовский А.А., Перова Е.В., Нефедов С.Е., Камалов Г.Л. Жидкофазное окисление дибензилового эфира воздухом в присутствии гомо- и гетеролигандных пивалатных и 3,5-диметилпиразолатных комплексов 3d металлов. Теорет. и эксперим. химия.- 2009.-Т.45, №6.- С.341-347

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Іванов Ю.Е.

Грищук Л.В.

Камалов Г.Л.

Коцеруба В.А.

Левченко О.О.

Степанов Д.Є

Чіхічін Д.Г.

Яволовський А.О.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

