Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U004350

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-10-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кізюн Олена Валеріївна
2. Kiziun Olena Valeriivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 19-09-2019

Спеціальність за освітою: Технологія електрохімічних виробництв

Місце роботи здобувача: Інститут сорбції та проблем ендоекології Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05398131

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, 13, м. Київ, Київ, 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Президія національної академії наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.210.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут сорбції та проблем ендоекології Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05398131

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, 13, м. Київ, Київ, 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Президія національної академії наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Вплив домішок на фізико-хімічні властивості VPO-каталізаторів окиснення н-пентану

2. The influence of additives on the physical-chemical properties of VPO catalysts of the n-pentane oxidation

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена вивченню впливу домішок іонів металів Bi, La, Mo, Te, Fe, W, Zr, Ti, Ag, Ni на фізико-хімічні властивості VPO-каталізаторів окиснення н-пентану. Встановлено, що модифікування VPO-каталізаторів домішками в більшості випадків не веде до зміни фазового складу базової композиції, але змінює температуру кристалізації активного компонента каталізатора фази пірофосфату ванадилу (VO)2P2O7 та температуру його окиснення до фосфату ванадилу VOPO4, що позитивно впливає на умови його активування та стабільної експлуатації. Уведені домішки змінюють морфологію базової VPO-композиції і розподілені двома способами: 1) нанодисперсно, рівномірно, 2) з утворенням рентгеноаморфних фаз домішок. Показано, що промотування VPO-каталізатора впливає на ступінь окиснення ванадію та енергію зв'зку O 1 s-електронів, що дозволяє регулювати активність каталізаторів. Запропонована нова схема окиснення н-пентану та утворення фталевого (ФА) і малеїнового (МА) ангідридів. Встановлено, що основним шляхом утворення ФА є реакція Дільса-Альдера між МА та ненасиченим вуглеводнем С4. Запропонована

схема окиснення н-пентану дозволяє спрямовано регулювати процес окиснення н-пентану в бік утворення МА або ФА шляхом введення в базову VPO-композицію домішок, які змінюють співвідношення центрів Бренстеда та Льюїса, що підтверджено експериментально. Показано, що на основі даної схеми окиснення н-пентану можна реалізувати нову технологію одержання ФА при пошаровому завантаженні різних за кислотними властивостями каталізаторів, яка дозволяє підвищити вихід цього продукту

2. The dissertation is devoted to the study of influence of additives (Bi, La, Mo, Te, Fe, W, Zr, Ti, Ag, Ni metal ions) on the physical-chemical properties of VPO catalysts of the n-pentane oxidation. It was established that mainly a modification of the VPO catalysts by additives does not lead to the change of a phase composition – the semihydrate vanadyl phosphate (VOHPO4·0,5H2O) rests the basic phase, with the exception lanthanum and molybdenum ions introduction. The introduction of the lanthanum accompanied by VOPO4 phase formation and molybdenum ions lead to the formation of molybdenum phosphate phase. It was shown that the additives introduction in VPO composition changes a temperature of the catalyst active component - vanadyl pyrophosphate phase ((VO)2P2O7) crystallization and the temperature of its oxidation to the vanadyl phosphate (VOPO4). It was established the Ti, Bi, Fe ions decrease the values of the first temperature and increase the second temperature that have positive effect connected with the reduce the activation temperature of VPO catalyst and to raise the range of its stability work without loss of a selectivity. The introduction of the W, Te, Mo (Mo/V=0,10) ions in basic composition increases both temperatures that necessary to take in account for the effective conducting of the activation stage. Other additives decrease both temperatures. This fact must be taken into account at determination of critical temperature of the catalyst exploitation. It was established that additives introduced in the basic VPO composition can be distributed by two ways: 1) highly dispersive and evenly (Fe, Te, Ni, Ag), 2) with formation of X-ray amorphous phase of the additive phosphate (Ti, Bi, La, W, Zr). It was shown that the additives introduction has any effect on an oxidation state of phosphorus but the oxidation state of vanadium changed. It was the increase of the P/V ratio on a surface of catalysts was observed after the introduction of additives and this fact has positive effect on life time of the catalyst. It was established that the introduction of additives, its nature and content affect on acidic properties of the catalyst surface, namely the namber of acid centers and ratio of Brönsted and Lewis centres. The study of mechanism of n-pentne transformation by different methods permits to propose the principle new scheme of the n-pentane oxidation. According this scheme the activity of the catalyst, connected with proton abstraction from hydrocarbon, determines by effective negative charge on surface oxygen which can be relative to BE O 1s-electrons. It was shown that a main route of the PhA formation is the Diels-Alder reaction between MA and an unsaturated hydrocarbon C4. So, the ratio of MA and PhA in products of n-pentane oxidation is determined by the containt of Brönsted and Lewis centres. The increase of the Lewis acidic centres on the surface of catalyst allows to an increase the PhA selectivity. These established relations permit to predict the ways of VPO catalyst modification by additives introduction and regulate the catalytic activity and selectivity to one of anhydride formation. It was proposed the layered loading of two different catalysts with different acidic properties in catalytic reactor which permits to an increase the PhA selectivity on 6-10 %.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Зажигалов Валерій Олексійович

2. Zazhygalov Valeriy O.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.15

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тарасенко Юрій Олександрович

2. Tarasenko Yuriy O.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Соловйов Сергій Олександрович

2. Soloviev Sergiy O.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.15

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Картель Микола Тимофійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Картель Микола Тимофійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.