

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0825U003254

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 01-08-2025

**Статус:** Запланована

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Павлюк Анастасія Сергіївна

2. Anastasiia Pavliuk

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-2864-7714

**Вид дисертації:** доктор філософії

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 161

**Назва наукової спеціальності:** Хімічні технології та інженерія

**Галузь / галузі знань:** хімічна та біоінженерія

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Хімічні технології та інженерія

**Дата захисту:** 01-08-2025

**Спеціальність за освітою:** Хімічні технології та інженерія

**Місце роботи здобувача:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** PhD 9829

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

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

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:** Українська

**Коди тематичних рубрик:** 31.15.27.07, 61.31.55.07, 61.37

**Тема дисертації:**

1. Основи технології окиснення ароматичних альдегідів на мікротелевих каталізаторах
2. Fundamentals of Aromatic Aldehydes Oxidation Technology on Microgel Catalysts

**Реферат:**

1. Дисертацію присвячено розробці технології гетерофазного окиснення ароматичних альдегідів на мікротелевих Se-вмісних каталізаторах. Метою є отримання ароматичних кислот і фенольних сполук, зокрема бензойної кислоти, яка є актуальною для сучасної промисловості. Як сировину використано доступні продукти – бензальдегід і пероксид водню. Робота вирішує проблему створення ефективних міжфазних каталізаторів, здатних стабілізувати емульсії, активних у системі «вода–олія» та придатних до багаторазового використання. Проведено огляд літератури, сформульовано мету та завдання дослідження. Обґрунтовано переваги гетерофазного підходу, зокрема спрощення очищення продуктів. Основним бар'єром впровадження є низька активність традиційних міжфазних каталізаторів, тому запропоновано використання мікротелевих систем. Описано методики синтезу Se-вмісних мікротелів, їх фізико-хімічні характеристики (TEM, FTIR, раман-спектроскопія, DLS, конфокальна мікроскопія, тензіометрія) та дослідження їх каталітичних властивостей у реакторі періодичної дії (GC, GC-MS, NMR, FTIR). Каталізатори ефективні за м'яких умов (20–50°C), забезпечують селективність 96,6–98,7% і вихід продуктів 85–97%. Їхня активність

пояснюється наявністю полімерного носія з Se-групами, здатного змінювати свої властивості під впливом температури. Встановлено вплив морфології й вмісту селену на активність мікрогелів. Завдяки колоїдній природі вони рівномірно розподіляються на межі фаз і забезпечують добрий контакт реагентів з активними центрами. Проаналізовано вплив технологічних параметрів (температура, час, співвідношення розчинника до води). При співвідношенні толуол/вода 4:1 досягнуто 97% виходу бензойної кислоти (селективність 98,6%), при 1:1 – 85% (селективність 97,7%) з меншими витратами розчинника. Виявлено, що вибір органічного розчинника впливає на склад продуктів, зокрема синтезовано октилбензоат з виходом 23,3%. Досліджено окиснення бензойного, анісового, вератрового та коричного альдегідів. Отримано: – з коричного – 11,6% коричної кислоти, 36,4% гідрокумарину; – з анісового – 18,0% анісової кислоти, 42,2% мехінолу; – з вератрового – 8,6% вератрової кислоти, 51,5% 3,4-диметоксифенолу. Результати підтверджують ефективність мікрогелів у синтезі широкого спектра органічних сполук. Каталізатори легко відокремлюються та можуть бути використані повторно. Після трьох циклів зниження виходу бензойної кислоти становило лише 3%. Створено основи технології синтезу ароматичних кислот і фенольних сполук у гетерофазному середовищі. Розроблено технологічні схеми синтезу бензойної кислоти (вихід 76,6%, селективність 97,1%) і сумісного одержання анісової кислоти (33,5%) і мехінолу (42,4%).

2. The dissertation is devoted to the development of a technology for the heterophase oxidation of aromatic aldehydes using microgel-based selenium-containing (Se-containing) catalysts. The aim is to obtain aromatic acids and phenolic compounds, particularly benzoic acid, which is highly relevant for modern industry. Readily available substances – benzaldehyde and hydrogen peroxide – were used as raw materials. The work addresses the challenge of creating efficient interfacial catalysts capable of stabilizing emulsions, active in a “water–oil” system, and suitable for repeated use. A literature review was conducted, and the purpose and objectives of the research were formulated. The advantages of the heterophase approach were substantiated, especially in simplifying product purification. The main barrier to implementation is the low activity of traditional interfacial catalysts, which is why microgel systems were proposed. The methodologies for synthesizing Se-containing microgels, their physicochemical characterization (TEM, FTIR, Raman spectroscopy, DLS, confocal microscopy, tensiometry), and their catalytic performance in a batch reactor (GC, GC-MS, NMR, FTIR) are described. The catalysts are effective under mild conditions (20–50°C), providing 96.6–98.7% selectivity and 85–97% product yield. Their activity is attributed to the polymer carrier with Se-groups, which can alter its properties in response to temperature. The influence of morphology and selenium content on the catalytic performance of the microgels was established. Due to their colloidal nature, the microgels distribute evenly at the phase boundary, ensuring good contact between reagents and active centers. The effect of process parameters (temperature, time, solvent-to-water ratio) was analyzed. A toluene/water ratio of 4:1 resulted in a 97% yield of benzoic acid (98.6% selectivity), while a 1:1 ratio gave an 85% yield (97.7% selectivity) with lower solvent consumption. It was found that the choice of organic solvent affects the product composition, including the formation of octyl benzoate with a yield of 23.3%. The oxidation of benzoic, anisic, veratric, and cinnamic aldehydes was studied. The results were: – from cinnamic aldehyde: 11.6% cinnamic acid, 36.4% hydrocoumarin; – from anisic aldehyde: 18.0% anisic acid, 42.2% mequinol; – from veratric aldehyde: 8.6% veratric acid, 51.5% 3,4-dimethoxyphenol. The results confirm the effectiveness of the microgels in synthesizing a wide range of organic compounds. The catalysts are easily separable and reusable. After three oxidation cycles, the yield of benzoic acid decreased by only 3%, indicating high stability. The foundations of a technology for the synthesis of aromatic acids and phenolic compounds in a heterophase medium have been established. Process flow diagrams were developed for the synthesis of benzoic acid (yield 76.6%, selectivity 97.1%) and the joint production of anisic acid (33.5%) and mequinol (42.4%).

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:** Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:** Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

**Підсумки дослідження:** Нове вирішення актуального наукового завдання

### **Публікації:**

- Pavliuk A., Fiukowski O., Wagner J., Kharandiuk T., Ivasiv V., Nebesnyi R., Schnakenberg U., Pich A. (2025). Selenium-modified microgels as interfacial catalysts for the heterophase oxidation of aromatic aldehydes. *Reaction Chemistry and Engineering*, 10, 782–789. doi.org/10.1039/D4RE00516C
- Pavliuk A., Ivasiv V., Nebesnyi R. (2025). Advances in heterogenization of catalysts for fine organic synthesis via catalytic oxidation in liquid medium: a review. *Chemistry & chemical technology*, 19 (1), 117–130. doi.org/10.23939/chcht19.01.117
- Павлюк А., Івасів В., Небесний Р. (2024). Каталітичне окиснення ароматичних альдегідів на Se-модифікованих мікрогелях. *Каталіз та нафтохімія*, 35, 32–40. doi.org/10.15407/kataliz2024.35.032.
- Pavliuk A., Kharandiuk T., Maykova S., Ivasiv V., Nebesnyi R. (2024). Study of Se-based microgel catalyst for heterophase benzaldehyde oxidation. *Chemistry, technology and application of substances*, 7 (1), 66–70. doi.org/10.23939/ctas2024.01.066.
- Roman Nebesnyi, Anastasia Pavliuk, Kok Hui Tan, Tetiana Kharandiuk, Volodymyr Ivasiv, Andriy Pich. Se-driven microgel catalysts for oxidation processes // 3rd International Scientific Conference “Chemical Technology and Engineering” (Lviv, Ukraine, June 21 – 24, 2021). – 2021. – P. 102 – 104. doi.org/10.23939/cte2021.01
- Roman Nebesnyi, Tetiana Kharandiuk, Anastasiya Pavliuk, Volodymyr Ivasiv, Kok-Hui Tan, Andriy Pich. Selenium-modified microgel catalysts for low temperature unsaturated aldehydes oxidation // *Zjazd Naukowy PTChem (Lublin, Poland, 11 – 16 wrzesnia, 2022)*. – 2022. – P. 601.
- R. Nebesnyi, T. Kharandiuk, A. Pavliuk, V. Ivasiv, K.H. Tan, A. Pich. Selenium-modified Microgels as Bio-inspired Catalysts for Unsaturated Aldehydes Oxidation // 84th Prague Meetings on Macromolecules Frontiers of polymer Colloids from Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications. *Book of Abstracts (Prague, July 24 – 28, 2022)*. – 2022. – P. 114.
- Anastasia Pavliuk, Oliver Fiukowski, Tetiana Kharandiuk, Volodymyr Ivasiv, Roman Nebesnyi, Andriy Pich. Se-driven microgel catalysts for oxidation processes // 4th International Scientific Conference “Chemical Technology and Engineering” (Lviv, Ukraine, June 26 – 29, 2023). – 2023. – P. 155 – 156.
- Pavliuk A., Kharandiuk T., Ivasiv V., Nebesnyi R. Se-based microgel as a catalyst for heterophase benzaldehyde oxidation // XII Міжнародна науково-технічна конференція «Поступ в нафтогазовій промисловості та нафтохімії» (APGIP-12) (м. Львів, 20 – 24 травня 2024 р.). – 2024. – С. 112 –115.
- Pavliuk A., Fiukowski O., Wagner J., Ivasiv V., Nebesnyi R., Schnakenberg U., Pich A. Interfacial Oxidation Reactions Catalyzed by Se-containing Microgels at Mild Conditions // 12th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2024 (Uzgorod, Ukraine, August 21-24, 2024). – 2024. – P. 25.
- A. Pavliuk, O. Fiukowski, J. Wagner, V. Ivasiv, R. Nebesnyi, U. Schnakenberg, A. Pich. Interfacial Microgel Catalysts for Fine Control of Oxidation Reactions // 4th International Conference on Innovative Materials and NanoEngineering (IMNE'2024) (Dovgoluka, Ukraine, September 13-16, 2024). – 2024. – P. 1–4.

**Наукова (науково-технічна) продукція:** технології; каталізатор

**Соціально-економічна спрямованість:** економія енергоресурсів; підвищення продуктивності праці; підвищення автоматизації виробничих процесів

**Охоронні документи на ОПВ:**

Винаходи, корисні моделі, промислові зразки

Патент України на корисну модель № 159152, Україна МПК C07C63/06 B01J27/02 B01J35/00 B01J37/00 C07B33/00 C08J3/24. Спосіб одержання бензойної кислоти в гетерофазних умовах з використанням Se-вмісного мікрогелевого каталізатора / Павлюк А. С., Небесний Р.В., Івасів В.В; заявник Національний університет «Львівська політехніка». – № u202405132; заявл. 30.10.2024; опубл. 30.04.2025, Бюл. № 18.

**Впровадження результатів дисертації:** Впроваджено

**Зв'язок з науковими темами:** 0124U003382

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

- Небесний Роман Володимирович
- Roman Nebesnyi

**Кваліфікація:** д. т. н., с.д., 05.17.04

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-0513-5783

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

- Кудрявцев Сергій Олександрович
- Serhii Kudriavtsev

**Кваліфікація:** к.т.н., доц., 05.17.07

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-2452-2220

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля

**Код за ЄДРПОУ:** 02070714

**Місцезнаходження:** вул. Іоанна Павла II, буд. 17, Київ, 01042, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Прудіус Світлана Володимирівна
2. Svitlana Prudius

**Кваліфікація:** д. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.04**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-2783-027X**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Державна організація Інститут сорбції та проблем ендоекології Національної академії наук України**Код за ЄДРПОУ:** 05398131**Місцезнаходження:** вул. Генерала Наумова, буд. 13, Київ, 03164, Україна**Форма власності:** Державна**Сфера управління:** Національна академія наук України**Ідентифікатор ROR:****Рецензенти****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Мельник Юрій Романович
2. Yuriy Mel'nyk

**Кваліфікація:** д. т. н., доцент, 05.17.04**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-0109-5526**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Національний університет "Львівська політехніка"**Код за ЄДРПОУ:** 02071010**Місцезнаходження:** вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна**Форма власності:** Державна**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України**Ідентифікатор ROR:****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Старчевський Володимир Людвікович
2. Volodymyr Starchevskiy

**Кваліфікація:** д. т. н., професор, 05.17.04**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-1095-138X**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

## VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Дзіняк Богдан Остапович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Дзіняк Богдан Остапович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Павлюк Анастасія Сергіївна

**Реєстратор**

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна