# Облікова картка НДДКР

**Державний обліковий номер:** 0218U003578

**Державний реєстраційний номер:** 0113U001392

**Відкрита**

**Дата реєстрації:** 10-04-2018

## 1. Етапи виконання

**Номер етапу:** 2

**Назва етапу:** Дослідження кінетики та механізму м'якого окислення циклогексану, ксилолів та толуолу, каталізованого розчинними сполуками кобальту та заліза та активованого органічними промоторами (нижчі двохосновні кислоти)

**Початок етапу:** 01-2016

**Закінчення етапу:** 12-2017

**Вид звітного документа:** Остаточний звіт

## 2. Виконавець

**Назва організації:** Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім.Л.М.Литвиненка НАН України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 03772476

**Підпорядкованість:** Національна академія наук України

**Адреса:** 79053, Україна,м.Львів-53, вул.НаковаЗа

**Телефон:** (032) 2635-174

**E-mail:** hop_vfh@ukr.net

## 3. Власник результатів НДДКР (продукції)

**Назва організації:** Національна академія наук України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 00019270

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

**Підпорядкованість:** Кабінет Міністрів України

**Телефон:** 380442350981

**E-mail:** prez@nas.gov.ua

**WWW:** http://nas.gov.ua

## 4. Джерела та напрями фінансування

**Підстава для проведення робіт:** 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

**КПКВК:** 6541030

**Напрям фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

**Джерело фінансування:** 7713 - кошти держбюджету

**Фактичний обсяг фінансування за звітний етап:** 799.935 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Кінетика та механізм реакцій функціоналізації органічних субстратів до практично-важливих продуктів в нових енерго-ощадливих каталітичних процесах

### Назва роботи (англ)

Kinetics and Mechanism of Functionalization of Organic Substrates to Practically Important Products in New Energy-Resource Catalytic Processes

### Реферат (укр)

Встановлено, що окислення C6H12 в присутності VO(acac)2 (1) може бути значно пришвидшено добавками невеликих кількостей щавелевої кислоти (2). Дані дослідження навели на думку про необхідність більш детального вивчення механізму вплив 2 на даний процес. Показано, що вищий (порівняно з безкислотним процесом) вихід циклогексанолу та циклогексанону, є обумовлений відносно вищим рівнем метал-пероксо-інтермедіатів. Вільно-радикальна складова процесу була також глибокого вивчена тому, що продукти виключно вільно-радикального окислення (циклогексилгідропероксид) були зафіксовані як у відсутності, так і в присутності щавелевої кислоти.

### Реферат (англ)

It has been established that the oxidation of C6H12 in the presence of VO (acac)2 (1) can be significantly accelerated by the addition of small amounts of oxalic acid (2). These studies suggested the need for a more detailed study of the mechanism of influence 2 on this process. It has been shown that the higher (in comparison with the acid-free process) yield of cyclohexanol and cyclohexanone is due to the relatively higher level of metal-peroxo-intermediates. The free-radical component of the process was also thoroughly studied because products of purely free radical oxidation (cyclohexylhydroperoxide) were recorded both in the absence and in the presence of oxalic acid.

**Індекс УДК:** 544.77.03, 547:541.124-145.4:547.592.12.546.281.678.061:0.22.532

**Коди тематичних рубрик НТІ:** 31.15.47

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

### НТП 1

**Назва продукції (укр):** Дослідження кінетики та механізму м'якого окислення циклогексану, ксилолів та толуолу, каталізованого розчинними сполуками кобальту та заліза та активованого органічними промоторами (нижчі двохосновні кислоти)

**Назва продукції (англ):** Investigation of kinetics and mechanism of soft oxidation of cyclohexane, xylenes and toluene, catalyzed by soluble cobalt and ferum compounds and activated by organic promoters (lower dibasic acids)

**Очікувані результати:**

**Галузь застосування:** 24.14.0-"виробництво основної органічної продукції";24.30.0-"виробництво лаків та фарб"

**Опис продукції (укр):** Запропоновано механізм окислення циклогексану пероксидом водню в присутності малих добавок щавелевої кислоти та ванадил(IV)ацетилацету як вихідного каталізатора.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:**

**Стадія завершеності НТП:** Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Строки впровадження:** 0000

**Виробник продукції:** хімічна промисловість

**Споживачі продукції:** хімічні і нафтохімічні виробництва

**Перспективні ринки:** Україна

**Права інтелектуальної власності:** За договорами

**Форми та умови передачі продукції:** Спільні НДДКР

## 7. Бібліографічний опис

1. Pokutsa A., Kubaj Yu., Zaborovskyi A., Sobkowiak A., Muzart J. Oxalic acid-improved mild cyclohexane oxidation catalyzed by VO(acac)2: non-radical versus radical mechanism. // Reac Kinet Mech Cat. -2017.-V.122.-P.757-774. 2. Pokutsa A., Kubaj Yu., Zaborovskyi A., Maksym D., Paczesniak T., Mysliwiec B., Bidzinska E., Muzart J., Sobkowiak A. V(IV)-catalyzed cyclohexane oxygenation promoted by oxalic acid: Mechanistic study. // Molecular Catalysis. -2017.-V.434.-P.194-205. 3. Kahnt A., Flyunt R., Laube C., Knolle W., Eigler S., Hermann R., Naumov S., Abel B. How fast is the reaction of hydrated electrons with graphene oxide in aqueous dispersions? // Nanoscale. -2015.-V.7.-P.19432-19437. 4. Kahnt A., Flyunt R., Naumov S., Knolle W., Eigler S., Hermanne R., Abel B. Shedding light on the soft and efficient free radical induced reduction of graphene oxide: hidden mechanisms and energetics. // RSC Adv. -2016.-V.6.-P.68835-68845. 5. Flyunt R., Knolle W., Kahnt A., Halbig C. E., Lotnyk A., Haupl T., Prager A., Eigler S., Abel B. High quality reduced graphene oxide flakes by fast kinetically controlled and clean indirect UV-induced radical reduction // Nanoscale. -2016.-V.8.-P.7572-7579. 6. Rogovyk V.I., Makitra R.G., Palchykova E.A., Bazylyak L.I., Midyana G.G., Zaikov G.E. Coordination of Specific Re-tention Volumes of Organic Compounds with Their Physical-Chemical Properties by means of Polyparametric Equations, "Organic Chemistry, Biochemistry, Biotechnology and Renewable Reseorces. Research & Development". - ISBN: 978?1 62081 155 9. - Nova Science Publishers, Inc. ? 2013. ? V.1. - Ch. XI P.115 125. 7. Макитра Р.Г., Мидяна Г.Г., Брык Д.В., Семенюк М.В. /R.G. Makitra, G.G.Midyana, D.V.Bryk, M.V. Semenyuk, Процессы переработки углей в смеси с резиносодер-жащими отходами в жидкое томливо. (Processes for the Conversion of Coals in a Mixture with Rubber-Containing Wastes into Liquid Fuel), ХТТ, 2013, №3, с.43-46.Solid Fuel Chemistry. -2013.-V.47.- N3.-P.177-179. 8. Макитра Р.Г., Мидяна Г.Г., Пальчикова Е.Я., Влияние свойств растворителей на выход экстракта из углей. //ХТТ. -2013.-№4.-С.12-15. 9. Брик Д.В., Макітра Р.Г., Мідяна Г.Г., Пальчикова О.Я.,Семенюк М.В., Ультразвукова екстракція вугілля органічними розчинниками // УглеХимический журнал. -2013.- №2.-С.56-60.10. 10. Бойко В.П., Грищенко В.К., Макитра Р.Г., Мидяна Г.Г., Пальчикова Е.Я. Корреляционная зависи-мость начальной скорости полимеризации изопрена под действием пероксида водорода от растворителя. // Полимерний журнал. -2013.-Т.35.-№ 1.-С.83-87. 11. Макитра Р.Г., Мидяна Г.Г., Пальчикова Е.Я. Рассмотрение набухания натурального каучука в ор-ганических растворителях на основании принципа ЛСЭ. // Полимерный журнал. -2013.-Т.35.-№ 1.-С.76-82.

## 8. Звітна документація

**Кількість сторінок в звіті:** 123

**Мова звіту:** Українська

**Кількість файлів у звіті:** 1

## 9. Заключні відомості

### Перелік осіб-виконавців

Антонишин Ірина Степанівна

Балашова Ірина Єгорівна

Васютин Ярослава Михайлівна

Заборовський Андрій Богданович

Кубай Юлія Юріївна

Мідяна Галина Григорівна

Макітра Роман Григорович

Макогон Оксана Іванівна

Максим Дарія Степанівна

Ткач Сергій Олександрович

Федорчук Анатолій Олександрович

Флюнт Роман Ігорович

**Керівник організації:**

МІДЯНА Галина Григорівна

**Керівники роботи:**

ПОКУЦА ОЛЕКСАНДР ПЕТРОВИЧ

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ**

Юрченко Т.А.