Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0217U003964

Державний реєстраційний номер: 0117U003205

Відкрита

Дата реєстрації: 31-10-2017

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Встановлення кінетичних закономірностей окиснення органічних субстратів в умовах каталізу досліджуваними системами "органокаталізатор-металічні наночастинки" та їх теоретичний аналіз із залученням комп'ютерного моделювання

Початок етапу: 08-2017

Закінчення етапу: 10-2017

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05420735

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 83114, Україна, Донецьк-114, вул. Р. Люксембург, 70

Телефон: +38 044 559 6675

Телефон: +38 044 559 6675

E-mail: office.ipocc@nas.gov.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім.Л.М.Литвиненка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05420735

Адреса: Харківське шосе, 50, м. Київ, Київська обл., 02160, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445596675

Телефон: 380445596686

E-mail: office.ipocc@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: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 65 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Синергічні органокаталітичні системи «N-гідроксііміди – металічні наночастинки» в окисненні органічних субстратів молекулярним киснем

Назва роботи (англ)

Synergistic organic catalytic systems «N-hydroxyimides – metallic nanoparticles» in the oxidation of organic substrates by molecular oxygen

Реферат (укр)

Метою науково-дослідної роботи було дослідження каталітичних властивостей моно- та біметалічних наночастинок на основі d-елементів з метою розробки нових селективних каталітичних систем синергічної дії "гідроксііміди - металічні наночастинки" для окиснення органічних субстратів. Об'єкт дослідження - каталітичні системи на основі моно- і біметалевих наночастинок нікелю, срібла, міді та N-гідроксифталіміду в реакціях окиснення органічних субстратів молекулярним киснем. Методи дослідження - кінетичні, рентгеноструктурні, електронна мікроскопія. В результаті проведених досліджень синтезовані практично монодисперсні наночастинки нікелю розміром 140 ± 40 нм, а також біметалеві наночастинки складу Ni4Cu, Ni3Cu і NiCu з розміром < 25-70 нм. Встановлено, що отримані нанопорошки складаються з двох фаз - розчин міді в нікелі та розчин нікелю в міді і не містять оксидів. За методом контактного відновлення синтезовані біметалеві наночастинки Ni@Ag типу "Core-Shell"з товщиною срібної оболонки 3-7 нм і вмістом срібла 10 % мас. На прикладі реакції ініційованого окиснення кумолу молекулярним киснем досліджена каталітична активність отриманих наноматеріалів та показана залежність швидкості реакції від площі поверхні нанокаталізаторів і їх природи. Встановлено, що найбільш ефективним серед досліджених каталізатором окиснення кумолу є наночастинки Ni3Cu і NiCu. Методом комп'ютерного моделювання встановлені границі виконання умов стаціонарності у випадку каталізу процесів окиснення системами, що вміщують N-гідроксифталімід, тобто границі, де можна застосовувати замість систем диференціальних рівнянь системи алгебраїчних для аналізу кінетики окиснення. Показано значну каталітичну активність системи з комбінацією каталізаторів: мікрочастинки металів - N-гідроксифталімід, де окремі каталізатори діють у різних стадіях радикально-ланцюгового процесу: NHPI - у стадії продовження ланцюга, а металеві мікрочастинки - у стадії ініціювання.

Реферат (англ)

The aim of research was to study the catalytic properties of mono- and bimetallic nanoparticles based on the d-elements to develop new selective catalytic systems with synergistic action "N-hydroxyimides – metallic nanoparticles" for the processes of oxidation of organic substrates. Object of study - catalytic systems based on mono- and bimetallic nickel, silver and copper nanoparticles and N-hydroxyphtalimide for oxidation of organic substrates by molecular oxygen. Methods - kinetic, X-ray studies, electron microscopy. As a result of the studies, practically monodisperse nickel nanoparticles of 140 ± 40 nm in size, as well as bimetallic nanoparticles Ni4Cu, Ni3Cu and NiCu with a size of 25-70 nm were synthesized. It is established that the nanopowders obtained consist of two phases - a solution of copper in nickel and a solution of nickel in copper and contain no oxides. The bimetallic nanoparticles Ni@Ag of the "Core-Shell" type with a silver shell thickness of 3-7 nm and a silver content of 10% by weight were synthesized by the contact reduction method. The catalytic activity of the obtained nanomaterials were studied using the reaction of the initiated oxidation of cumene with molecular oxygen and the dependence of the reaction rate on the surface area of ??the nanocatalysts and their nature is shown. It has been established that nanoparticles Ni3Cu and NiCu are the most effective among the studied catalysts for the oxidation of cumene. The method of computer simulation established the boundaries of the fulfillment of the stationarity conditions in the case of catalysis of oxidation processes by systems containing N-hydroxyphthalimide, that is, the boundaries where one can apply instead of the systems of differential equations of

the algebraic system for analyzing the kinetics of oxidation. A significant catalytic activity of the system is shown with a combination of catalysts: microparticles of metals - N-hydroxyphthalimide, where individual catalysts act in different stages of the radical chain process: NHPI - in the chain propagation stage, and metallic microparticles - in the initiation stage.

Індекс УДК: 544.47, 546.56-121: 546.57:544.473-039.63

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.15.27.07

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Метод створення органокаталітичних систем «N-гідроксііміди – металічні наночастинки» для окиснення органічних субстратів молекулярним киснем

Назва продукції (англ): Method of preparation of organic catalytic systems «N-hydroxyimides – metallic nanoparticles» for the oxidation of organic substrates by molecular oxygen

Очікувані результати:

Галузь застосування: 72.19 - Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Опис продукції (укр): Розроблені 1) метод отримання біметалевих наночастинок складу NixCuy, який полягає у відновленні суміші гідроксидів металів гідразином в умовах, що забезпечують отримання наночастинок; 2) каталітична система складу "N-гідроксифталімід-мікрочастинки кобальту" для окиснення органічних субстратів молекулярним киснем.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: не визначено

Виробник продукції: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім.Л.М.Литвиненка НАН України

Споживачі продукції: Підприємства хімічної промисловості та наукові і освітні заклади.

Перспективні ринки: Україна, західна Європа

Права інтелектуальної власності: Публікація в наукових виданнях

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1) Й.О. Опейда, Р.Є. Гладишевський, Ю.М. Гринда, В.Л. Старчевський, О.В Кущ, М.О Компанець, Ю.М. Гринчук Сумісна дія металевих мікрочастинок Co, Mn та N-гідроксифталіміду в рідиннофазному окисненні кумолу молекулярним киснем // "Доповіді НАН України". - 2017. 2) Киця А. Р., Базиляк Л. І. Кінетичні закономірності формування наночастинок срібла в присутності центрів кристалізації // "Збірник наукових праць НТШ. Серія: "Хімічні науки". - 2017. 3) Киця А. Р., Базиляк Л. І., Побігун-Галайська О.І. Субмікронні частинки нікелю як наповнювач для електропровідних полімерних композитів // "Вісник Львівського національного університету імені Івана Франка" - Серія хімічна. - 2017. - випуск 58. - ч. 2. - с. с. 442-449. 4) Ю. Семенюк, С. Семенюк, І. Салдан, Л. Базиляк, А. Киця, О. Решетняк. Електрохімічно одержаний поліанілін як відновлювальний агент під час синтезу паладій-поліанілінових нанокомпозитів // "Вісник Львівського національного університету імені Івана Франка" - Серія хімічна. - 2017. - випуск 58. - ч. 2. - с. с. 431-441.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 77

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік організацій-співвиконавців

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

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03772476

Адреса: 79053, м.Львів-53, вул. Наукова, 3-а

Підпорядкованість:

Перелік осіб-виконавців

Гринда Юрій Миколайович

Киця Андрій Романович

Кущ Ольга Василівна

Мідяна Галина Григорівна

Побігун-Галайська Олена Ігорівна

Хавунко Оксана Юліанівна

Керівник організації:

Попов Анатолій Федорович

Керівники роботи:

Опейда Йосип Олексійович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.