Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0225U000446

Державний реєстраційний номер: 0123U102170

Відкрита

Дата реєстрації: 11-01-2025

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Експериментальне дослідження та математичне моделювання кінетики процесів окиснення молекулярним киснем органічних Н(НО)С-вмісних субстратів при варіюванні гетерокаталізатора. Дослідження активності каталітичних сумішей рибофлавіну, оксалатної кислоти та сполук d-елементів на прикладі окислення циклогексану та толуолу. Кінетичні дослідження активності каталітичних систем на основі кроцетину та сполук перехідних елементів при рідинно-фазному окисленні циклогексану та толуолу. Дослідження особливостей УФ-синтезу нанокомпозитів з біорозкладальними властивостями із застосуванням відновлюваної сировини (крохмаль, целюлоза). Визначення адсорбційних властивостей синтезованих композитів при використанні ПАР різної природи (неорганічні та органічні).

Початок етапу: 01-2024

Закінчення етапу: 12-2024

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

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

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03772476

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Наукова, буд. 3-а, м. Львів, Львівська обл., 79053, Україна

Телефон: 380322635174

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

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

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03772476

Адреса: вул. Наукова, буд. 3-а, м. Львів, Львівська обл., 79053, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380322635174

E-mail: gmidyana@gmail.com

WWW: https://physchem.lviv.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: 2604.205 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Розроблення нових функціональних наноструктурованих мембран і каталізаторів для окиснення C-H-, H(HO)C-вмісних сполук природного та синтетичного походження

Назва роботи (англ)

Development of new functional nanostructured membranes and catalysts for oxidation of C-H-, H(HO)C-containing compounds of natural and synthetic origins

Реферат (укр)

Об'єктом дослідження є каталітичні системи з перехідних металів (Ag, Co, Mn, Fe, Cu), та N-гідроксиімідів для окиснення органічних субстратів, полімерні гібридні мембрани на основі акрилових мономерів, магнітосепарабельний каталізатор включений в наноструктуровану мембрану для системи очистки. Предметом дослідження є каталіз окиснення органічних речовин киснем в присутності органокаталізатора N-гідроксифталіміду та гетерогенного каталізатора; синтез і дослідження полімерних мембран з протонопровідними властивостями; очисні властивості наноструктурованих мембран з каталізаторами типу Фентона; вплив умов синтезу мембран на структуру і ефективність очистки. Метою роботи є розробка нових каталітичних систем на основі оксидів металів та N-гідроксиімідів для окиснення киснем органічних субстратів по C-H звязках; синтез амфіфільних полімерних гібридних мембран з високими протонопровідними; створення магнітосепарабельних наноструктурованих мембран з каталізаторами типу Фентона. Створена математична модель окиснення C-H звязків, з використанням якої на прикладі перманганату змодельовано участь гетерогенних каталізаторів, що вміщують метали змінної валентності, в аеробному окисненні сполук з C-H звязками в бензильних групах. Зшиті полімерні мембрани синтезовано шляхом УФ-ініційованої радикальної кополімеризації акрилових мономерів: акрилонітрилу, акрилової кислоти та 2-акриламідо-2-метилпропансульфонової кислоти і зшивач N,N'-метилен(біс)акриламід. Аналіз фізико-хімічних властивостей засвідчив, що дані мембрани можуть бути використані у низькотемпературних твердотільних паливних елементах. Одержано плівки на основі метало-полімерного композиту з використанням ПАР природнього походження (рамноліпідів), що дозволяють здійснити ефективне очищення водних розчинів від органічних забрудників.

Реферат (англ)

The object of the research is catalytic system of transition metals (Ag, Co, Mn, Fe, Cu) with N-hydroxyimides for oxidation of organic substrates, polymer hybrid membranes based on acrylic monomers, magnetically separable catalyst embedded into nanostructured membrane for purification system. The research subject is catalytic oxidation of organic substances by oxygen using organocatalyst N-hydroxyphthalimide and a heterogeneous catalyst; synthesis and investigation of polymer membranes with proton-conducting properties; properties of nanostructured membranes with Fenton-like catalysts; influence of synthetic procedure on the membrane structure and purification efficiency. This work aims at the development of new catalytic systems based on metal oxides and N-hydroxyimides for the oxidation of organic substrates by oxygen via C-H bonds; synthesis of amphiphilic polymer hybrid membranes with high proton-conducting properties; creating of magnetically separable nanostructured membranes with Fenton-like catalysts. C-H bond oxidation model was created, which allowed modelling processes with heterogeneous catalysts, containing transition metal ions, in the aerobic oxidation of compounds with C-H bonds in benzylic groups. Crosslinked polymer membranes were synthesized via UV-initiated radical copolymerization of acrylic monomers: acrylonitrile, acrylic acid and 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonic acid with crosslinker N,N'-methylene(bis)acrylamide. The analysis of physico-chemical properties proved that these membranes can be used in low-

temperature solid-state fuel cells. Films based on metal-polymer composite were synthesized using SAS of natural origin (rhamnolipids), which are highly efficient in purification of aqueous solutions from organic pollutants.

Індекс УДК: 543.082/.084:54-14; 541.12.011.3.082/.084, 541.124.2:127 + 547.53

Коди тематичних рубрик НТІ: 59.35.29

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Створення нових каталітичних систем оксиди металів - NHPI для аеробного окиснення органічних субстратів по С-Н звязку

Назва продукції (англ): Development of new catalytic systems metal oxides - NHPI for aerobic oxidation of organic substrates via C-H bond

Очікувані результати: Вироби технічні, Технології, Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: процеси окиснення в хімічній промисловості та фармацевтиці

Опис продукції (укр): НТП відповідає пріоритетному напрямку “Нові речовини і матеріали” Суть НТП полягає в створенні нової каталітичної системи шляхом поєднання оксидів перехідних 3-d металів на різноманітних підкладках з N-гідроксифталімідом, яка проявляє високу активність в окисненні органічних субстратів O2 та HOOH в м'яких умовах. Показано залежність їх активності від окисно-відновних властивостей поверхні оксидів, характеристик розчинника та матеріалу підкладки. Встановлено, що серед досліджених оксидів найефективнішою є система Co/TiO2 + NHPI. Створена математична модель окиснення С-Н звязків, з використанням якої на прикладі перманганату змодельовано участь гетерогенних каталізаторів, що вміщують метали змінної валентності, в аеробному окисненні сполук, що вміщують бензильні групи з С-Н звязками. Теоретично з використанням математичного моделювання оцінена ефективність каталітичної системи KMnO4–NHSI–AcOH у рідинно-фазному окиснення кумолу при 40С показує можливість збільшення (понад 90%) селективності ROOH. Перевага НТП полягає у створенні нової теорії, що описує гомогенно-гетерогенний каталіз, яка дозволяє систематизувати відомі факти в цій області і має прогностичну цінність. Розроблена каталітична система дає можливість проводити процес при м’якших умовах – нижчих температурах та тисках, значно зменшує число викидів та токсичних побічних продуктів і дозволяє регулювати селективність реакції. Економічність НТП - використання недорогих каталізаторів, та молекулярного кисню – як найдешевшого та екологічного найбільш «зеленого» з окисників.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Збільшення обсягів виробництва, Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів, Економія матеріалів

Стадія завершеності НТП: Ідея, концепція, Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: розробка триває

Строки впровадження:

Виробник продукції: Відділення ФХГК ІнФОВ ім.Л.М.Литвиненка НАН України

Споживачі продукції: хімічні та фармацевтичні підприємства

Перспективні ринки: Підприємства України та зарубіжжя

Права інтелектуальної власності: «Ноу-хау»

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

НТП 2

Назва продукції (укр): Металополімерні композити для вилучення органічних сполук (барвників, пігментів)

Назва продукції (англ): Metal-polymer composites for the extraction of organic compounds (dyes, pigments)

Очікувані результати: Технології, Матеріали

Галузь застосування: Текстильна промисловість Харчова промисловість

Опис продукції (укр): Суть НТП полягає у створенні нових металополімерних композитів для адсорбції органічних барвників методом фотоініційованої полімеризації на основі полімерної матриці триетиленглікольдиметакрилату (ТГМ–3), попередньо синтезованих наночастинок фериту кобальту (CoFe2O4) та натуральних/синтетичних ПАР (рамноліпід і додецилсульфат натрію) у масовому співвідношенні ТГМ–3:CoFe2O4:ПАР=90:5:5. Як фотоініціатор використовували 2,2-диметокси-1,2-дифенілетан-1-он (IRGACURE 651), 2%мол. Одержані полімерні плівки на основі металонаповненого композиту характеризуються хорошими експлуатаційними властивостями – вони міцні, еластичні, однорідні за структурою, володіють адсорбційними властивостями та є магнітосепарабельні, що робить їх перспективними у процесах відновлення водних ресурсів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища

Стадія завершеності НТП: Ідея, концепція, Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: розробка триває

Строки впровадження:

Виробник продукції: Відділення ФХГК ІнФОВ ім.Л.М.Литвиненка НАН України

Споживачі продукції: Очисні споруди підприємств текстильної та харчової галузі

Перспективні ринки: Підприємства України, Індії, ЄС

Права інтелектуальної власності: «Ноу-хау»

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

НТП 3

Назва продукції (укр): Протонопровідні полімерні і нанокомпозитні гідрогелі на основі сульфовмісних акрилатів

Назва продукції (англ): Proton-conductive polymer and nanocomposite hydrogels based on sulfo-containing acrylates

Очікувані результати: Матеріали

Галузь застосування: електротехнічна, косметична (як суперадсорбенти) та ін.

Опис продукції (укр): Створена НТП відповідає пріоритетному напрямку розвитку науки і техніки «Нові речовини і матеріали». Суть НТП полягає у розробленні раціонального способу синтезу нових полімерних і нанокомпозитних матеріалів з протонопровідними властивостями методом УФ-полімеризації акриламіду, акрилонітрилу та трьох різних мономерів, що містять сульфогрупи: 3-сульфопропілакрилату калію, 2-акриламід-2-метилпропансульфокислоти і стиренсульфонату натрію у присутності фотоініціатора та N,N'-метиленбісакриламіду як зшивального агента. Нанокомпозитні полімер/кремнеземні гідрогелі одержані на основі вищезгаданої полімерної матриці з додаванням золь-гель системи тетраетоксисилан (ТЕОС) – етанол – вода. Наявність сульфогруп у складі одержаних продуктів зумовлює їхню протонну провідність до 19 мСм/см, що дозволяє використання їх у електрохімічних пристроях. Використання сульфовмісних мономерів різної природи та наночастинок кремнезему дозволяє регулювати протонопровідні та водоутримуючі характеристики синтезованих матеріалів. Технологічними перевагами створеної НТП є високі експлуатаційні характеристики матеріалів. Використання методу УФ-полімеризації та золь-гель методу забезпечує економічну та екологічну привабливість розробленої НТП, оскільки у процесі синтезу не використовуються агресивні речовини, не утворюються токсичні побічні продукти, швидкість процесу достатньо висока, що зумовлює енергоощадливість виробництва.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів

Стадія завершеності НТП: Дослідний зразок

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: Відділення ФХГК ІнФОВ ім.Л.М.Литвиненка НАН України

Споживачі продукції: Виробники паливних електрохімічних генераторів; розділювальних та очисних мембран

Перспективні ринки: Підприємства України та зарубіжжя

Права інтелектуальної власності: «Ноу-хау»

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Rymsha Kh.V., Yevchuk I.Yu., Zhyhailo M.M., Demchyna O.I., Maksymych V.M., Ivashchyshyn F.O. Hydrogels and Their Composites Based on Sulfo-containing Acrylates: Preparation, Properties and Proton Conductivity // Journal of Solid State Electrochemistry, 2024, 28, 555–563. https://doi.org/10.1007/s10008-023-05619-2

Zhyhailo M.M., Yevchuk I.Yu., Ivashchyshyn F.O., Demchyna O.I., Chabecki P., Babkina N., Shantaliy T. Modeling of Electrochemical Impedance of Fuel Cell Based on Novel Nanocomposite Membrane // Energies, 2024, 17, 2754. https://doi.org/10.3390/en17112754

Makota O., Dutkova E., Briančin J., Bednarcik J., Lisnichuk M., Yevchuk I., Melnyk I. Advanced Photodegradation of Azo Dye Methyl Orange Using H2O2-Activated Fe3O4@SiO2@ZnO Composite under UV Treatment // Molecules, 2024, 29(6), 1190. https://doi.org/10.3390/molecules29061190

Yuriy Medvedevskykh, Olena Makido, Galyna Khovanets', Olena Karpenko, Tetyana Pokynbroda, Iryna Yevchuk, Oksana Kurylets. Investigation of the adsorption properties of a new composite catalyst for the Fenton system // Chemistry and Chemical Technology, 2024, 18(4). 15–28. https://doi.org/10.23939/chcht18.04.15

Opeida, L.I., Sheparovych, R.B., Havunko, O.Y. et al. Initiation of Radical-Chain Aerobic Oxidation of Cumene by Potassium Permanganate and N-Hydroxysuccinimide // Theor Exp Chem, 2024, 60, 133–140. https://doi.org/10.1007/s11237-024-09815-7

I.A.Opeida, O.A.Velichko, Ye.V.Sheludko, A.V.Pavliuk, R.B.Sheparovych, V.E.Sheludko, M.N.Baran. Metal complex catalysis of initiated oxidation of hydrocarbons and alcohols: features of inhibition // Functional Materials, 2024, 31(2), 269-275. http://dx.doi.org/10.15407/fm31.02.269

Khamar O., Dutka V., Kovalskyi Ya. Formation of polymers in the presence of dispersed mineral phase. Molecular Crystalc and Lyquid Crystals 2024. DOI:10.1080/15421406.2024.2348202

Khamar O., Dutka V., Yatsyshyn M. Kovalskyi Ya. Electrical conductivity and thermal stability of polyaniline and water-soluble polymer nanocomposites //Molecular Crystalc and Lyquid Crystals 2024. DOI:10.1080/15421406.2024.2348287

Богонович Х., Стариков Г., Дутка В., Ковальський Я., Горбунко Ю., Аксіментєва О. Квантово-хімічне та спектральне дослідження механізму формування структури полі індолу //Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна. 2024, Вип.. 65 С. 264 -272. DOI: 10. 30970/vch/6501.264

Дутка В., Хамар О., Ковальський Я., Яцишин М. Електропровідність і термостійкість композитів поліаніліну та полівінілового спирту //Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна. 2024, Вип.. 65 С. 301 – 307. DOI: 10. 30970/vch/6501.301

Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю. Каталітичний розклад концентрованих розчинів пероксиоцтової кислоти. //Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна. 2024, Вип.. 65 С. 344 -351. DOI: 10. 30970/vch/6501/34

Dutka V., Kovalskyi Ya., Yushuk A., Khamar O Qantum-chemical calculation of nanocomposites based onpolyaniline and polyacrylic acids. . III International reserch and practical conference "nanoobjectc # nanostructuring" (N&N). October 7 – 10, 2024, Lviv, Ukraine, P. 52 -53.

Dutka V., Kovalskyi Ya., Chalun V., Khamar O Physico-chemical properties of nanokomposites based on polyaniline and polymethymetacrylate. III International reserch and practical conference "nanoobjectc # nanostructuring" (N&N). October 7 – 10, 2024, Lviv, Ukraine, P. 47 -48.

Dutka V.S., Midyana G, G., Dutka Yu. V., Kovalskyi Ya. P. Polymer mineral composites based on metal oxides and vinyl polymers // Intrenational research and practict conference"Nanotechnology and nanomaterials" 21 -24 of August 2024 Uzhhorod, Ukraine, P. 145.

Dutka V.S.,Horbenko Yu. Yu., Kovalskyi Ya.P., Khamar O.O., Chalun V.O., Yushchuk A.B. Polyaniline and polumethacrylates electrical conductive composites // Intrenational research and practict conference"Nanotechnology and nanomaterials" 21 -24 of August 2024 Uzhhorod, Ukraine, P. 144.

Dutka V.S., Midyana G.G., Dutka Yu. V. Adsorptionof polymers basedon maleic angydride on aluminum oxide and properties of aqueous -organis solutionof ionogenic copolymers/ //Ukraiiun Conference whth Intrnational Participation "Chemistry, Phsiscs

and Technology of surface" Book of abstracts/ 29 -30 May, 2024 Kyiv.Ukraine, P. 42.

Дутка В.С., Мідяна Г.Г., Дутка Ю.В. Одержання полімер- мінеральних композитів оа основі полістирену та дисперсного оксиду ванадію Матеріали III міжнародної конференції «Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів» Дніпро «Середняк Т.К.» 20 травня 2024 року С. 178 -180.

Дутка В.С., Чалун В.О., Ющук А. Я., Ковальський Я.П., Горбунко Ю.Ю., Хамар О.О. Полімер-полімерні композити на основі поліаніліну та поліметилметакрилату і полі акрилової кислоти. УІІІ Всеукраїнська наукова конференція « Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи. Матеріали конференції м.Житомир, Україна. 1 травня 2024 року, С.72 – 73.

Дутка В. Українські вчені-природознавці – члени наукового товариства Шевченка Х. Міжнародна конференція «Сучасні тенденції навчання хімії» Тези доповідей. 22 – 23 березня 2024 року м. Львів, Україна, С.62.

Demchyna O. I., Zhyhailo M. M., Yevchuk I. Yu. Polymer-based fenton catalysts for wastewater treatment // «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС-2024), Вінниця, 19-21 березня 2024, С. 168.

Demchyna O. I., Zhyhailo M. M., Yevchuk I. Yu. Degradation of azo dye methylene blue using novel fenton catalysts // XXV Міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Сучасні проблеми хімії», Київ, 15-17 травня 2024, С. 192.

Zhyhailo M. M., Yevchuk I. Yu., Demchyna O. I. Novel nanocomposite membrane for fuel cell application // V Міжнародна науково-технічна конференція «Перспективні полімерні матеріали і технології», Львів, 24-28 вересня 2024.

Дзядик М. А., Курилець О. Г., Макідо О. Ю., Хованець Г. І. Апробація методу Фентона для очищення стоків від антибіотиків // Збірник тез доповідей VII Міжнародної (XVII Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС – 2024), м. Вінниця, Україна, 19–21 березня 2024, с. 46.

Makido O. Yu., Khovanets' G. I., Kurilets O. G., Dziadyk M. A. Fine treatment of dairy wastewater in the Fenton system // Book of abstracts of XII International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO – 2024), Uzhhorod, Ukraine, 21–24 August, 2024, p. 159.

Галина Хованець, Олена Макідо. Металополімерні композити на основі триетиленглікольдиметакрилату та фериту кобальту // Тези доповідей І наукової конференції з міжнародною участю «Інноваційні напрями розвитку хімії – 2024», м. Одеса, Україна, 09–11 вересня 2024 р., с. 113.

R. Sheparovych, W. Suprun, A. Matvienko, I. Opeida. TRANSITION METALS OXIDES AND N-HYDROXYPHTHALIMIDE IN THE CATALYSIS OF AEROBIC OXIDATION OF BENZYLIC C-H BONDS // XII Міжнародна конференція «Поступ в нафтогазопереробній та нафтохімічній промисловості» (APGIP-12) 20–24 травня 2024 року, м. Львів, Україна.

R.Sheparovych, A.Novokhatko, W.Suprun, I.Opeida. SUPPORTED METALS OXIDES and N-HYDROXYPHTHALIMIDE IN CATALYSIS OF THE OXIDATION OF BENZYLIC C-H BONDS // VII International (XVII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current Chemical Problems" (CCP-2024), March 19–21, 2024, Vinnytsia, Ukraine

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 95

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Євчук Ірина Юріївна (к. х. н., с.д.)

Демчина Оксана Ігорівна (к. х. н., с.н.с.)

Дутка Володимир Степанович (д. х. н., професор)

Жигайло Марія Михайлівна (д.філософ, н.с)

Заборовський Андрій Богданович (молодший науковий співробітник)

Мідяна Галина Григорівна (к.х.н., с.н.с.)

Макідо Олена Юріївна (к. т. н., с.н.с.)

Максим Дарія Степанівна (молодший науковий співробітник)

Мусій Ростислав Йосипович (к. х. н.)

Новохатько Анастасія Олександрівна (пров.інж)

Опейда Йосип Олексійович (д.х.н., професор)

Хавунко Оксана Юліанівна (к. х. н., ст.н.с.)

Хованець Галина Ігорівна (к. х. н.)

Керівник організації:

Киця Андрій Романович (д. х. н., с.д.)

Керівники роботи:

Шепарович Роман Богданович (к. х. н.)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.