

# Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U032771

Державний реєстраційний номер: 0123U102607

Відкрита

Дата реєстрації: 04-12-2024



## 1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

**Назва етапу:** Модифікування метал-оксидних та метал-цеолітних каталізаторів сполуками Mg, Fe, Mo, Y, La, Ce. Дослідження впливу природи модифікуючих добавок сполук Mg, Fe, Mo, Y, La, Ce на структурно-розмірні характеристики, кислотно-основні та окисно-відновні властивості синтезованих метал-оксидних і метал-цеолітних каталізаторів.

**Початок етапу:** 03-2024

**Закінчення етапу:** 11-2024

**Вид звітного документа:** Проміжний звіт

## 2. Виконавець

**Назва організації:** Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського Національної академії наук України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 05417213

**Підпорядкованість:** Національна академія наук України

**Адреса:** проспект Науки, буд. 31, м. Київ, 03028, Україна

**Телефон:** 380445251190

**E-mail:** admini@inphyschem-nas.kiev.ua

**WWW:** <http://www.inphyschem-nas.kiev.ua/>

## 3. Власник результатів НДДКР (продукції)

**Назва організації:** Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського Національної академії наук України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 05417213

**Адреса:** проспект Науки, буд. 31, м. Київ, 03028, Україна

**Підпорядкованість:** Національна академія наук України

**Телефон:** 380445251190

**E-mail:** admini@inphyschem-nas.kiev.ua

**WWW:** <http://www.inphyschem-nas.kiev.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:** 2201300

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

## Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 3500.000 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Дизайн нанокompatитних метал-оксидних каталізаторів сумісної окиснювальної конверсії C1-4-алканів та діоксиду вуглецю з одержанням водню/синтез-газу, цінних органічних сполук

### Назва роботи (англ)

Design of nanocomposite metal-oxide catalysts for the compatible oxidative conversion of C1-4-alkanes and carbon dioxide with the production of hydrogen/synthesis gas, valuable organic compounds

### Реферат (укр)

Проект спрямований на вирішення питань екологічної безпеки та раціонального використання природних ресурсів, зменшення антропогенного тиску на довкілля з боку парникових газів шляхом розвинення фундаментальних основ комплексної переробки компонентів природного газу із залученням вуглекислого газу процесами гетерогенного каталізу. Основним завданням даного етапу є структурно-функціональний дизайн каталізаторів процесів переробки легких алканів – метану, пропану та бутану з одержанням цінних напівпродуктів і органічних сполук: синтез-газу (CO/H<sub>2</sub>), пропілену та бутенів різної будови, шляхом модифікування сполуками d, f, s і p-елементів. Показано, що введення модифікуючих добавок Fe, La, Ce приводить до зменшення кислотності Льюїса поверхні Ni-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-каталізатора процесу вуглекислотної конверсії метану. Водночас сполуки Mg, La та Mo спричиняють збільшення основності поверхні каталізатора. Зменшення кислотності уповільнює швидкість активації молекули метану з наступною дисоціацією, що у випадку глибокої дисоціації метану призводить до завуглецювання поверхні каталізатора. Збільшення основності поверхні, переважно за рахунок основних центрів середньої сили, дозволяє контролювати швидкість дисоціації метану, а також сприяє адсорбції і дисоціації окисника – CO<sub>2</sub>, що забезпечує більш стійку роботу каталізатора. Добавки сполук Cen+ утворюють на поверхні кисневі вакансії, це підвищує реакційну здатність кисню поверхні і стабільність роботи каталізатора. Цілеспрямоване конструювання (дизайн) цеолітних каталізаторів, формування активних центрів їх поверхні: кислотно-основних – шляхом інкорпорування гетероелементів (Zn, Y, Cr); окисно-відновних – шляхом інкорпорування d-металів в кристалічну ґратку BEA дозволяє розробити ефективні каталізатори процесів окиснювального дегідрування пропану і бутану за участю CO<sub>2</sub> з одержанням олефінів. Вищі показники процесу ОДП-CO<sub>2</sub> (за 600-650°C): конверсія пропану до 55%, селективність за пропіленом 96-99% та вихід до 53% досягаються на Zn<sub>2</sub>O/SiBEA.

### Реферат (англ)

Project aims to solve issues of environmental safety and rational use of natural resources, to reduce anthropogenic influence of greenhouse gases on the environment by developing the fundamentals of natural-gas components' complex processing involving carbon dioxide by heterogeneous catalysis. Structural and functional design of the catalysts for light alkanes' processing such as methane, propane and butane to produce valuable intermediates and organic compounds: syngas (CO/H<sub>2</sub>), propylene and butenes of various structures by modifying catalysts with d, f, s and p-elements is the main objective of this stage. The introduction of Fe, La, Ce modifying additives is shown to decrease Lewis acidity of the surface of a Ni-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst for the dry reforming of methane. At the same time, Mg, La, and Mo compounds increase the catalyst's surface basicity. Reducing the acidity slows down an activation rate of the methane molecule with its subsequent dissociation. The latter, in the case of deep methane dissociation, leads to carburization of the catalyst's surface. Increasing the surface basicity, mainly at the expense of medium-strength basic sites, allows controlling the rate of methane dissociation, and also promotes adsorption and dissociation of the oxidant (CO<sub>2</sub>), which ensures a more stable catalysts' operation. Additions of Cen+ compounds form oxygen vacancies on the surface, which increases surface oxygen reactivity and catalyst's stability. A targeted construction (a design) of zeolite catalysts, the formation of active sites on the surface: acid-base ones by incorporating Ga(Zn, Cr) heteroelements; redox ones by incorporating d-metals into a crystal lattice of BEA allows developing effective catalysts for CO<sub>2</sub>-mediated oxidative

dehydrogenation of propane and butane with the production of olefins. Higher process indices (at 600-650°C): propane conversion of up to 55%, propylene selectivity of 96-99% and yield of up to 53% are achieved on Zn<sub>2</sub>O/SiBEA.

**Індекс УДК:** 66-93/-96, 661.097.3; 542.978

**Коди тематичних рубрик НТІ:** 61.13.21, 61.31.55

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

### НТП 1

**Назва продукції (укр):** Метал-оксидні Ni-MoO<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/кордієрит та метал-цеолітні Ni-Ce-BEA каталізатори

**Назва продукції (англ):** Metal-oxide Ni-MoO<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/cordierite and metal-zeolite Ni-Ce-BEA catalysts

**Очікувані результати:** Матеріали

**Галузь застосування:** Хімічна промисловість; Технологія каталізаторів; Переробка природного газу

**Опис продукції (укр):** Матеріали можуть бути застосовані як каталізатори процесів переробки метану за участю вуглекислого газу у водень/синтез-газ (CO/H<sub>2</sub>).

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, Підвищення ефективності процесів переробки метану в синтез-газ, Утилізація парникових газів

**Стадія завершеності НТП:** Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Строки впровадження:**

**Виробник продукції:** Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського Національної академії наук України

**Споживачі продукції:** Підприємства азотно-кислотної промисловості

**Перспективні ринки:**

**Права інтелектуальної власності:** За договорами

**Форми та умови передачі продукції:** За договорами

### НТП 2

**Назва продукції (укр):** Метал-цеолітні ZnSiBEA, Cr/Zn-BEA каталізатори, в тому числі модифіковані сполуками ітрію - Zn(Y)SiBEA

**Назва продукції (англ):** Metal-zeolite ZnSiBEA, Cr/Zn-BEA catalysts, including those modified with yttrium compounds - Zn(Y)SiBEA

**Очікувані результати:** Матеріали

**Галузь застосування:** Хімічна промисловість; Технологія каталізаторів; Нафтохімічний синтез; Виробництво пластмас

**Опис продукції (укр):** Матеріали можуть бути застосовані як каталізатори процесів переробки компонентів природного газу (пропану) за участю вуглекислого газу в пропілен, сировину для виготовлення пластмас.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, Утилізація парникових газів

**Стадія завершеності НТП:** Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Строки впровадження:**

**Виробник продукції:** Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського Національної академії наук України

**Споживачі продукції:** Підприємства по виготовленню пластмас

**Перспективні ринки:**

**Права інтелектуальної власності:** За договорами

**Форми та умови передачі продукції:** За договорами

## НТП 3

**Назва продукції (укр):** Ni-Bi-Mo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> метал-оксидні каталізатори

**Назва продукції (англ):** Ni-Bi-Mo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> metal-oxide catalysts

**Очікувані результати:** Матеріали

**Галузь застосування:** Хімічна промисловість; Технологія каталізаторів; Нафтохімічний синтез

**Опис продукції (укр):** Матеріали можуть бути застосовані як каталізатори процесів переробки компонентів природного газу (бутану) за участю вуглекислого газу в продукти органічного синтезу – дієни різної структури, зокрема в 1,3-бутадієн.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, Зміцнення обороноздатності країни, Утилізація парникових газів

**Стадія завершеності НТП:** Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Строки впровадження:**

**Виробник продукції:** Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського Національної академії наук України

**Споживачі продукції:** Підприємства по виготовленню спиртів, розчинників, компонентів моторних палив

**Перспективні ринки:**

**Права інтелектуальної власності:** За договорами

**Форми та умови передачі продукції:** За договорами

## 7. Бібліографічний опис

Soloviev, S.O. Prospects for the Development of Nanocomposite Catalysts for the Oxidative Conversion of C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> Alkanes with Carbon Dioxide to Produce Hydrogen/Synthesis Gas and Organic Compounds: A Review [Text] / S.O. Soloviev // Theor. Exp. Chem. – 2023. – Vol. 59(5). – P. 307–323.

Effect of Surface Acidity/Basicity of Cr/Zn-BEA Zeolite Catalysts on Performance in CO<sub>2</sub>-PDH Process [Text] / S.M. Orlyk, A.Yu. Kapran, V.I. Chedryk, Yu.M. Nychiporuk, P.I. Kyriienko, S. Dzwigaj // ChemistrySelect. – 2024. – Vol. 9, № 11. – P. e202304801.

Influence of Chromium in Cr/Zn-BEA Metal-Zeolite Composites on Their Acid-Base Characteristics and Catalytic Properties in the Processes of Propane Dehydrogenation [Text] / S.M. Orlyk, N.V. Vlasenko, V.I. Chedryk, A.Yu. Kapran, S. Dzwigaj // Theor. Exp. Chem. – 2024. – Vol. 60, № 1. – P. 41–48.

Ларіна, О.В. Дизайн новітніх поліфункціональних каталізаторів для процесів отримання стратегічно важливих органічних продуктів з відновлюваної сировини [Текст] / О.В. Ларіна // Вісник НАН України. – 2024. – №9. – С. 65-72.

CO<sub>2</sub>-mediated oxidative dehydrogenation of n-butane into buta-1,3-diene on Ni-Bi-Mo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxide catalysts [Text] / O.V. Larina, O.P. Pertko, O.V. Zikrata, I.M. Remezovskyi, D.Yu. Balakin, M. Vorochta, K. Veltruská, I. Khalakhan, P.I. Kyriienko, S.O. Soloviev // 18th International Congress on Catalysis, Lyon, France, July 14-19, 2024: abstracts. – Lyon, 2024. – A12059OL.

Ni(Fe,Cr)-Mo(Bi)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxide catalysts for oxidative dehydrogenation of n-butane into 1,3-butadiene assisted by CO<sub>2</sub> [Text] / O.V. Larina, O.P. Pertko, O.V. Zikrata, I.M. Remezovskyi, P.I. Kyriienko, S.O. Soloviev // International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2024), Uzhhorod, August 21–24, 2024: abstract book [Ed. O. Fesenko]. – Uzhhorod, 2024. – 640 p. – ISBN 978-617-8092-32-0. – P. 136.

NAP-XPS and TPSR study of Ni-Bi-Mo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts for CO<sub>2</sub>-mediated oxidative dehydrogenation of alkanes [Text] / D.Yu. Balakin, O.V. Larina, Yu.M. Nychiporuk, O.V. Zikrata, S.O. Soloviev // Ukrainian Conference with International Participation

