

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0223U001402

Державний реєстраційний номер: 0118U003623

Відкрита

Дата реєстрації: 28-01-2023



1. Етапи виконання

Номер етапу: 5

Назва етапу: Вивчення моно- та бі- V і Co нано-каталізаторів, так само VO-Fe і Co-Fe- ацетилацетонатів у процесі окислення толуолу, ксилолів, циклогексану, гваяколу, ізо-евгенолу з застосуванням O₂ і H₂O₂ у метиловому і ізопропіловому спиртах і ацетонітрилі при 40-100C і 1-20 атм, промотоване THСА.

Початок етапу: 01-2022

Закінчення етапу: 12-2022

Вид звітного документа: Остаточний 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, 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, Львів, Львівська User/address.short_region_ending, 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

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 902.636 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Окиснення вуглеводнів та їх кисневмісних похідних киснем та пероксидом водню до практично-важливих напівпродуктів промотоване біо-інспірованими активаторами.

Назва роботи (англ)

The oxidation of hydrocarbons and their oxygen-containing oxygen and hydrogen peroxide derivatives to practically important intermediates is evidenced by bio-inspired activators.

Реферат (укр)

Встановлено високу промотуючу здатність оксалатної кислоти (ОА) (на прикладі окислення толуолу і циклогексану O_2 та H_2O_2 , каталізованого $VO(acac)_2$) котра обумовлена значним зниженням електричного опору реакційного середовища. Однією з причин є ріст концентрації заряджених часточок викликаний дисоціацією ОА, а також її солі $VO(oxalate)_2$, котра утворюється при взаємодії ОА з вихідним $VO(acac)_2$. Це призводить до зниження загального опору $1/G$ реакційного середовища і є суттю активуючого впливу. Заміщення лігандів слабого поля ($acac$), $VO(acac)_2$ на ліганди поля середньої сили (оксалат) посилює зв'язок катіон-ліганд та продовжує час життя каталізатору. Ефективність процесу пов'язана також з утворенням метал-пероксочастинок $VO(\eta^2-O_2)$. Пояснено, чому добавки ОА та H_2O_2 в значній мірі нівелюють промотуючий ефект NHPI в каталітичній системі $VO(acac)_2/(Co(acac)_2)/NHPI/O_2$. Вперше досліджені кінетичні закономірності сумісного впливу світлового опромінення та активаторів (NHPI, ОА) на окислення толуолу каталізоване солями V і Co в присутності фотокаталізатора Me_2Acr^+-Mes . Досліджено каталітичний ефект наночастинок d-металів у нульовій валентності (нікель, мідь, срібло) на розпад H_2O_2 і вплив гідроксилвмісних розчинників (MeOH, H_2O) на дану реакцію. Вивчено закономірності окислення хіноліну пердекановою кислотою (ПДК) в ряді органічних розчинників. Найбільший вплив на даний процес мають величини параметрів специфічної та неспецифічної сольватації. Знайдено сумарні константи швидкості реакції окиснення акридину ПДК у різних органічних розчинниках (k) та енергії активації ($E_{ак}$) в різних органічних середовищах. Між параметрами перехідного стану ΔH^\ddagger та ΔS^\ddagger існує лінійна залежність, яка вказує на наявність компенсаційного ефекту.

Реферат (англ)

The high promoting ability of oxalic acid (OA) was established on the example of the oxidation of toluene and cyclohexane by O_2 and H_2O_2 catalyzed by $VO(acac)_2$. The core of effect consists of a significant decrease the electrical resistance of the reaction medium. One of the reasons for the observed effect is the increase of the charged particles concentration caused by the dissociation of OA, as well as its salt $VO(oxalate)_2$ formed upon OA interaction with the original $VO(acac)_2$. This leads to decreasing in the total resistance $1/G$ of the reaction medium and is the essence of the activating effect. Substitution of weak-field ligands ($acac$), $VO(acac)_2$ with middle-strength field ligands (oxalate) strengthens the cation-ligand bond and extends the life of the catalyst. The effectiveness of the process is also related to the formation of metal-peroxo species $VO(\eta^2-O_2)$. On the other hand, as revealed OA and H_2O_2 additives significantly neutralize the promoting effect of NHPI in the $VO(acac)_2/(Co(acac)_2)/NHPI/O_2$ catalytic system. For the first time, the kinetic dependencies of the combined effect of light irradiation and activators (NHPI, OA) on the oxidation of toluene catalyzed by V and Co salts in the presence of the photocatalyst Me_2Acr^+-Mes were investigated. The catalytic effect of nanoparticles of d-metals in zero valency (Ni, Cu, Ag) on the decomposition of H_2O_2 and the influence of hydroxyl-containing solvents (MeOH, H_2O) on this reaction was studied. The peculiarities of quinoline oxidation by peroxodecanoic acid PDK in a number of organic solvents were studied. The parameters of specific and non-specific solvation have the greatest influence on this process. The total reaction rate constants of the acridine oxidation of PDK in various organic solvents (k) and the activation energy ($E_{ак}$) in various organic media were found. There is a linear relationship between the transition state parameters ΔH^\ddagger and ΔS^\ddagger , which indicates the presence of a compensation effect.

Індекс УДК: 544, 544.472

6. Науково-технічна продукція (НТП)

7. Бібліографічний опис

1. Pokutsa A., Kubaj Y., Zaborovskyi A., Maksym D., Paczesniak T., Mysliwiec B., Bidzinska E., Muzart J., Sobkowiak A. *Molec. Catal. V(IV)-catalyzed cyclohexane oxygenation promoted by oxalic acid: Mechanistic study.* 2017, 434, 194–205.
2. Pokutsa A., Kubaj Y., Zaborovskyi A., Sobkowiak A., Muzart J. *Reac Kinet Mech Cat. Oxalic acid-improved mild cyclohexane oxidation catalyzed by VO(acac)₂: non-radical versus radical mechanism.* 2017, 122, 757–774.
3. Dutka V., Midyana G., Dutka Yu., Palchicova E. *Influence of Solvents on the Rate of Thermal Decomposition of Peroxydecanoic Acid, Russian Journal of General Chemistry.* 2018, vol.88, N 2, p.2703–2709.
4. Dutka V., Midyana G., Dutka Yu., Palchicova E. *Solvent Effect on the Rate of Thermal Decomposition of Diacyl Diperoxydes, Russian Journal of General Chemistry.* 2018, vol.88, N 4, p.632–640.
5. Дутка В.С., Мідяна Г.Г., Дутка Ю.В., Пальчикова О.Я. *Особенности термического раз-клада диацильных дипероксидов у разных органических растворителей. Вісник Львівського університету. Серія Хімічна.* 2018, Вип. 59, част.2 с.474–385.
6. Мідяна Г., Пальчикова О., Хавунко О., Мідяний С. *Вплив розчинників на кінетику цис-трансізомеризації деяких ароматичних азосполук. Праці наук. тов. ім. Шевченка-Хімічні науки» Львів-2018, т.44. С.30–36.*
7. Дутка В., Мідяна Г., Пальчикова О., Дутка Ю. *Вплив реакційного середовища на швидкість терморозкладу аліфатичних пероксикислот. Праці наук. тов. ім. Шевченка-Хімічні науки» Львів-2018, т.44. С.30–36.*
8. Dutka V., Aksimentyva O., Oshapovska N., Kovalsyi Ya., Halechko H. *Adsorption and decomposition of peroxides on the surface of dispersed oxides Fe₂O₃, Cr₂O₃ and V₂O₅. Colloids Interfaces* 2019. – 3. 13.; Doi: 10.3390/colloids3010013
9. Dutka V., Kovalskiy Ya., Aksimentyeva O., Tkachuk N., Oshapovska N., Halechko H. *Molecular modeling of acridine oxidation by peroxyacids // Chem. & Chem Technol, 2019, Vol. 13. No 3 P. 334 – 340. Doi: 10.23939/chcht13.03.334*
10. Дутка В., Мідяна Г., Пальчикова О., Дутка Ю., Галечко Г. *Вплив органічних розчинників на швидкість окиснення хіноліну пероксидекановою кислотою // Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна 2019. Вип. 60. ч.2. С.449 – 457. Doi: 10.30970/vch.6002.449*
11. Дутка В., Аксіментьєва О., Галечко Г. *Термомеханічні властивості та електропровідність композитів на основі кополімеру стирену з малеїновим ангідридом та поліаніліну та поліметакрилової кислоти та поліаніліну // Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна 2019. Вип. 60. ч. 2. С.395 – 401. Doi:/10.30970/vch.6002.395*
12. Дутка Володимир, Мідяна Галина, Пальчикова Олена, Дутка Юрій, Нагорняк Ірина. *Окиснення хіноліну пероксидекановою кислотою в різних органічних розчинниках. // Праці НТШ Серія хімічна 2019. Т. LVI. С. 89 – 100.*
13. Жак О.В., Шпирка З.М., Карп'як В.В., Дутка В.С. *Особенности проведения олимпиады вступника университета з хімії. / Актуальні питання підготовки майбутнього вчителя хімії: Теорія і практики. Збірник наукових праць. Випуск 5. Вінниця «Твори» 2019, С. 97 –100.*
14. Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю., Пальчикова О. *Окиснення акридину пероксидекановою кислотою в різних розчинниках. Праці НТШ. Серія хімічна. 2020. Т. LX/ С. 22 – 30. doi.org/10.37827*ntsh.chem.2020.60.022*
15. Дутка В.С., Мідяна Г.Г., Дутка Ю.В., Пальчикова Г.Я. *Влияние органических растворителей на скорость окисления сульфоксидов пероксикислотами // Журнал Общей Химии. 2020. Том. 90. № 3. С. 338 – 345. DOI: 10.31857/S0044460X20030026.*
16. Dutka V.S., Midyana G.G., Dutka Yu.V., Pal'chikova E.Ya. *Effekt of organic solvents on the rate of oxidation of sulfoxides with peroxy acids // Russian Journal of general chemistry. 2020. Vol. 90. No. 3. P. 329 – 334. DOI: 10.1134/S1070363230030020.*
17. Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю., Пальчикова О. *Вплив органічних розчинників на швидкість окиснення сульфоксидів пероксикислотами // Вісник Львівського ун-ту. Сер. Хім.. 2020. Вип. 61. Ч.2 С. 478 – 487. DOI:*

<https://doi.org/10.30970/vch.6102.478>.

18. Pokutsa A., Tkach S., Zaborovsky A., Bloniarz P., Paczeński T., Muzart J. Sustainable Oxidation of Cyclohexane and Toluene in the Presence of Affordable Catalysts: Impact of the Tandem of Promoter/Oxidant on Process Efficiency. *ACS Omega*, 2020, 5, 7613–7626. DOI: 10.1021/acsomega.0c00447.
19. Pokutsa A., Bloniarz P., Fliunt O., Kubaja Y., Zaborovsky A., Paczeński T. Sustainable oxidation of cyclohexane catalyzed by a VO(acac)₂-oxalic acid tandem: the electrochemical motive of the process efficiency. *RSC Adv.*, 2020, 10, 10959–10971. DOI: 10.1039/d0ra00495b.
20. Dariya S. Maksym; Andriy B. Zaborovsky; Yuliya Y. Kubaj; Pawel Bloniarz; Tomasz Paczeński; Jacques Muzart; Alexander P. Pokutsa Versatile and Affordable Approach for Tracking the Oxidative Stress Caused by the Free Radicals: the Chemical Perception. *Chemistry Select*, 2020, 5, 13814 –13818. DOI: 10.1002/slct.202003305.
21. Pokutsa A., Zaborovsky A., Bloniarz P., Paczeński T., Maksym D., Muzart J. Cyclohexane oxidation: relationships of the process efficiency with electrical conductance, electronic and cyclic voltammetry spectra of the reaction mixture. // *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis* (2021) 132:123–137 – <https://doi.org/10.1007/s11144-020-01913-6>
22. Pokutsa A., Ohkubo K., Zaborovsky A., Bloniarz P. UV-induced oxygenation of toluene enhanced by Co(acac)₂/9-mesityl-10-methylacridinium ion/N-hydroxyphthalimide tandem // «Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering». – 2021. – <https://doi.org/10.1002/apj.2714>.
23. Дутка В. С., Мідяна Г. Г., Дутка Ю. В., Пальчикова О. Я. Окиснення акридину пероксикислотами в різних органічних розчинниках // «Вісник Львівського ун-ту. Серія хімічна». 2021. – вип. 62. – С. 330 – 339.
24. Дутка В. С., Мідяна Г. Г., Дутка Ю. В., Пальчикова О. Я. Окиснення нітрогеновмісних сполук пероксикислотами в різних органічних розчинниках // «Збірник наукових праць НТШ». – 2021. – т. LXVI. С / 28.
25. Dutka V.S., Kovalskyi Ya. P., Midyana G.G. Adsorption of peroxides on aerosiles and magnesium oxide // *Voprosy khimii and khimiceskoi tekhnologii*, 2022, No. 1. P. 47 – 53. DOI: 10.32434/0321-4095-2022-140-1-47-53 (Scopus)
26. Дутка В., Мідяна Г. Дутка Ю., Пальчикова О. Окиснення N, N-диметиланіліну пероксинонановою кислотою в органічних розчинниках // Вісник Львівського університету. Серія хімічна 2022. вип. 63. С. 383 – 339. DOI: 10.30970/vch.6391.383
27. Dutka V.S., Kovalskyi Ya. P., Midana G. G. Physicochemical properties of maleic anhydride copolymers and their adsorption on aluminium oxide. Ukrainian conference with international participation “Chemistry, Physics and Technology of Surface” 19 – 20 October 2022, Kyiv, Ukraine P. 49.
28. Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю., Пальчикова О. N-окиснення хіноліну пероксикислотами в різних органічних розчинниках. // Праці НТШ. Хім. науки 2022. Т. LXX, С. 90 – 101. DOI 10:37827/ntch.2020 70.090.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 170

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

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

Заборовський Андрій Богданович (молодший науковий співробітник)

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

Максим Дарія Степанівна (молодший науковий співробітник)

Керівник організації:

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

Керівники роботи:

Покуца Олександр Петрович

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.