Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U007242

Державний реєстраційний номер: 0114U006039

Відкрита

Дата реєстрації: 19-02-2015

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез та дослідження кінетики каталітичних термоперетворень нанокомпозитів функціоналізованих жирними кислотами та тригліцеридами

Початок етапу: 06-2014

Закінчення етапу: 12-2014

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03291669

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 03164, Київ, вул. Генерала Наумова, 17

Телефон: тел.: (044) 423-80-58; 424-11-35 факс: (044) 424-35-67

E-mail: www.isc.gov.ua, info@isc.gov.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Державне агентство з питань електронного урядування України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 37471818

Адреса: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 2071730

WWW: http://e.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: 2209080

Напрям фінансування: 2.5 - програми і проекти у сфері міжнародного науково-технічного співробітництва

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 99 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Піроліз із застосуванням нанокаталізаторів MexOy/SiO2 - шлях до отримання біопалива II покоління за допомогою переробки жирних кислот, тригліцеридів та відновлюваної рослинної біомаси

Назва роботи (англ)

Pyrolysis with the use of nanocatalysts MexOy/SiO2 the way to get second-generation biofuels via processing of fatty acids, triglycerides and renewable plant biomass

Реферат (укр)

Мета роботи - синтез нанокомпозитів MexOy/SiO2 на основі рідкісноземельних металів з метою пошуку високоефективних нанокаталізаторів для піролітичної конверсії рослинної біомаси в біопаливо II покоління. Встановлення впливу концентрації оксиду рідкісноземельного елементу на поверхні нанокомпозиту на реакційну здатність нанооксидів в реакціях термічної трансформації жирних кислот - компонент рослинних тригліцеридів одержання кореляцій між кінетичними параметрами (енергією активації Еакт) каталітичної реакції та структурними характеристиками; встановлення оптимальних умов синтезу нових нанокомпозитів. Методи дослідження - термопрограмована десорбційна мас-спектрометрія (ТПД МС), адсорбційні методи аналізу. З метою пошуку потенційних каталізаторів для піролітичної конверсії рослинної біомаси в біопаливо II покоління проведено порівняльний аналіз методом ТПД МС термохімічних перетворень аліфатичних карбонових кислот на поверхні нанокомпозитів CeO2/SiO2 з розміром кристалітів діоксиду церію ~3 нм та концентрацією 6-24 вагових %. Для цього було проведено функціоналізацію реакційною серією аліфатичних жирних карбонових кислот синтезованих нанокомпозитів CeO2/SiO2. Виявлено, що температура максимальної швидкості реакції Тмакс конверсії жирних кислот в кетони на поверхні нанокомпозитів CeO2/SiO2 зростає в гомологічному ряду зі збільшенням кількості метиленових груп в молекулі. Зміщення по температурі становить ?Тмакс ~130°С, якщо порівнювати конверсію оцтової та стеаринової кислот, відповідно зростання енергії активації для конверсії стеаринової кислоти порівняно з оцтовою становить ?Еакт~30 кДж

Реферат (англ)

The purpose of work is a synthesis of nanocomposites MexOy/SiO2 based on rare-earth metals in order to find a high-performance nanocatalysts for pyrolytic conversion of biomass into II generation biofuels; determining the effect of concentration of the rare earth element oxide on the surface of nanocomposite on reactivity of nanooxides in thermal transformation reactions of fatty acids - component of vegetable triglycerides, obtaining a correlations between kinetic parameters (activation energy Eact) of catalytic reaction and structural characteristics; the establishment of optimal conditions for synthesis of new nanocomposites. Research methods are temperature programmed desorption mass spectrometry (TPD MS), adsorption methods of analysis. In order to find potential catalysts for the pyrolytic conversion of biomass into II generation biofuels, a comparative analysis of thermochemical transformations of aliphatic carboxylic acids on the surface of nanocomposites CeO2/SiO2 with a crystallite size of cerium ~ 3 nm and the concentration of 6-24% by weight was carried out by TPD MS. For this purpose, the functionalization of synthesized nanocomposite CeO2/SiO2 by a series of aliphatic carboxylic fatty acids was done. It has been determined that the temperature of the maximum reaction rate Tmax in the conversion of fatty acids to ketones on the surface of nanocomposite CeO2/SiO2 increases in the homologous series with increasing number of methylene groups in the molecule. The shift of temperature is ?Tmax ~ 130 ° C when compared to the conversion of acetic acid and stearic acid. Respectively, the increase of the activation energy for the conversion of stearic acid as compared with acetic acid is ?Eakt ~ 30 kJ/mol. Detailed studies of thermal transformations of the grafted groups ?Si-O-Ce-(O-Acac)2 in the topochemical synthesis of CeO2nanoparticles on the silica surface, depending on the concentration and quantity of laying of Ce(Acac)3 modifier have been done. The kinetic parameters have been calculated and the mechanism of formation of acetone as a result of thermal transformation of grafted groups ?Si-O-Ce-(O-Acac)2 has been proposed. The basic laws of thermal transformations of the grafted groups ?Si-O-Ce-(O-Acac)2 have been established. It has been shown that the development of nanocatalysts based on cerium oxide is promising as a temperature of maximum speed Tmax of catalytic reaction of forming of symmetrical ketones on the surface of nanocomposite CeO2/SiO2 decreases with increasing concentration of cerium oxide

nanoparticles in the nanocomposites. Respectively, the activation energy decreases, and therefore energy efficiency of the use of such catalysts will be higher. The obtained new knowledge can be the basis for the development of nanotechnologies of pyrolytic nanocatalysis for obtaining II generation biofuel from renewable natural resources, such as vegetable oils, waste oils and fats containing substantial amounts of free fatty acids, and biomass, which can contain besides the triglycerides, free fatty acid and lignocellulose. These green technologies can reduce energy dependence on imported fossil hydrocarbons and solve environmental problems of production of I generation biodiesel.

Індекс УДК: 544, 544.47, 66.092-977, 547-326

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.15

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Біопаливо II покоління

Назва продукції (англ): Second-generation biofuels

Очікувані результати:

Галузь застосування: 72.19 (нанокаталіз)

Опис продукції (укр): З метою пошуку потенційних каталізаторів для піролітичної конверсії рослинної біомаси в біопаливо II покоління проведено порівняльний аналіз методом ТПД МС термохімічних перетворень аліфатичних карбонових кислот на поверхні нанокомпозитів CeO2/SiO2 з розміром кристалітів діоксиду церію ~3 нм та концентрацією 6-24 вагових %. Проведені детальні дослідження термічних перетворень прищеплених груп ?Si-O-Ce-(O-Acac)2 в процесі топохімічного синтезу наночастинок CeO2 на поверхні кремнезему в залежності від концентрації та кількості нанесень модифікатора Ce(Acac)3.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 2016 (при наявності інвестора)

Виробник продукції: вітчизняні дослідно-експериментальні підприємства

Споживачі продукції: промислові підприємства

Перспективні ринки: вітчизняні та закордонні

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1.L.R. Azizova, T.V. Kulik, B.B. Palyanytsya, A.E. Zemlyakov, V.N. Tsikalova, V.Ya. Chirva, Investigation of chemical transformations of thiophenylglycoside of muramyl dipeptide on the fumed silica surface using TPD-MS, FTIR spectroscopy and ES IT MS, Nanoscale Research Letters, 2014, 9(1), 234-243. doi:10.1186/1556-276X-9-234 (IF= 2.48) 2.B.B.Palianytsia, T.V. Kulik, O.O.Dudik, O.L.Toncha, T.V. Cherniavska, Study of the thermal decomposition of some components of biomass by desorption mass spectrometry. // International Congress on Energy Efficiency and Energy Related Materials (ENEFM 2013), Series: Springer Proceedings in Physics, Vol. 155, Oral, A., Bahsi, Z.B., Ozer, M. (Eds.), 2014, XIV, 454-461. 3.Т.Ю.Дмитренко, К.С.Кулик, К.В.Войтко, О.М.Бакалінська, М.В.Борисенко, М.Т.Картель. Каталітична активність церійвмісних матеріалів у реакції розкладання пероксиду водню. Хімія, фізика та технологія поверхні. 2014, Т.5, С. 317-324. 4.Л.Р Азізова, Т.В. Кулик, Б.Б. Паляниця, К. Ласло, А. Менихард, Фізико-хімічне дослідження кремнезему, модифікованого гепарином, для створення нових систем доставки лікарських засобів, Полімерний журнал, 2014, Т.36, №3, С. 309-315. 5.L.R. Azizova, T.V. Kulik, B.B. Palyanytsya, Thermal and hydrolytic stability of grafted ester groups of carboxylic acids on the silica surface. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, submitted. Участь в конференціях: 1.T.V. Kulik, B.B. Palyanytsya, L.R. Azizova, K.S. Kulyk, M.V. Borysenko, Thermal transformation of carboxylic acids on the surface of nanosized oxides: kinetics and mechanisms, 34th International conference on vacuum microbalance and thermoanalytical techniques (ICVMTT 34), Kyiv, 2014, P.40. 2.L.R. Azizova,

T.V. Kulik, B.B. Palyanytsya, Thermal and hydrolytic stability of grafted ester groups of carboxylic acids on the silica surface, 34th International conference on vacuum microbalance and thermoanalytical techniques (ICVMTT 34), Kyiv, 2014, P.23.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 53

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Б.Б.Паляниця

К.С.Кулик

Кулик Т.В.

Л.Р.Азізова

М.В.Борисенко

О.О. Дудік

Керівник організації:

Картель Микола Тимофійович (д. х. н., професор, акад.)

Керівники роботи:

Кулик Тетяна Володимирівна

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.