Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0223U001348

Державний реєстраційний номер: 0121U110142

Відкрита

Дата реєстрації: 28-01-2023

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Сумісний вплив структури і температури у реакції ацидолізу хлорметилоксирану

Початок етапу: 01-2022

Закінчення етапу: 12-2022

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070803

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Телефон: 380432508930

Телефон: 380432508778

E-mail: rector@donnu.edu.ua

WWW: http://www.donnu.edu.ua/

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070803

Адреса: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380432508930

Телефон: 380432508778

E-mail: rector@donnu.edu.ua

WWW: http://www.donnu.edu.ua/

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

КПКВК:

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7706 - безплатно (договір про науково-технічне співробітництво, тощо)

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 0.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Сумісний вплив температури та структури на каталітичний ацидоліз епіхлоргідрину

Назва роботи (англ)

Joint effect of temperature and structure on catalytic acidolysis of epichlorohydrin

Реферат (укр)

Досліджено методами хімічної кінетики, спектроскопії, кореляційного аналізу систему «оксиран - органічна кислота – каталізатор основної природи», для якої встановлено умови виявлення унікального ізопараметричного ефекта, розроблено новий метод визначення концентрації аліфатичних третинних амінів в ході реакції. Узагальнено результати дослідження ентальпійно-ентропійного компенсаційного ефекту в некаталітичних та каталізованих піридинами реакціях арилоксиранів з органічними кислотами різних класів. Цей ефект проявляється в ізопараметричних (ізокінетичних, ізоенергетичних) реакційних серіях внаслідок взаємодії (неадитивності) спільних ефектів температури та структури. Наведено експериментальні докази його фізичної реальності у низці перехресних реакційних серій. Обговорено характер активаційних процесів без ентальпійно-ентропійної компенсації Описано спосіб спектрофотометричного визначення концентрації катіона четвертинного амонію у середовищі епіхлоргідрину, що дозволяє контролювати поточну концентрацію аміна / четвертинної амонієвої солі та надає інформацію стосовно поведінки каталізатора в ході реакції, що дає змогу для дослідження механізму реакції.

Реферат (англ)

The system "oxirane - organic acid - catalyst of basic nature" was studied using the methods of chemical kinetics, spectroscopy, and correlation analysis, for which the conditions for detecting a unique isoparametric effect were established, and a new method for determining the concentration of aliphatic tertiary amines during the reaction was developed. Results are summarized from a study of the enthalpy–entropy compensation effect in non-catalytic and pyridine-catalyzed reactions of aryloxiranes with organic acids of various classes. This effect is observed in isoparametric (isokinetic, isoenergetic) reaction series, due to the interaction (nonadditivity) of the joint effects of temperature and structure. Experimental evidence of its physical reality in a number of cross reaction series is considered. The character of activation processes when there is no enthalpy–entropy compensation is discussed. The method of spectrophotometric determination of quaternary ammonium cation concentration in epichlorohydrin medium is described, which allows to control the current concentration of amine / quaternary ammonium salt and provides information about the behavior of the catalyst during the reaction, which makes it possible to study the reaction mechanism.

Індекс УДК: 544.1;544.41, 547:544.18; 547:544.16; 547:544.12 , 547:544-42/.43 , 547-311:[(547.56 +547.29):547-304.2/544.476 +541.127:544.323.2]

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.15.27.05, 31.21.15 , 31.21.18

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Спосіб спектрофотометричного визначення концентрації катіона четвертинного амонію у середовищі епіхлоргідрину

Назва продукції (англ): The method of spectrophotometric determination of quaternary ammonium cation concentration in

epichlorohydrin medium

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук; 85.42 Вища освіта

Опис продукції (укр): 1. Запатентовано спосіб спектрофотометричного визначення концентрації катіона четвертинного амонію у середовищі епіхлоргідрину, який відрізняється тим, що включає екстрагування четвертинної амонієвої солі водою з епіхлоргідрину, утворення комплексу з бромтимоловим синім у присутності цитратно-фосфатного буферного розчину з подальшою екстракцією хлороформом і спектрофотометруванням при довжині хвилі максимуму оптичного поглинання 407 нм.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 01.202212.2022

Виробник продукції: ДонНУ імені Василя Стуса

Споживачі продукції: Заклади вищої освіти, Наукові установи, Хімічні лабораторії

Перспективні ринки: Ринок освітніх послуг, Ринок хіміко-аналітичного контролю

Права інтелектуальної власності: Отримано патент, Патент України на корисну модель № 152096

Форми та умови передачі продукції: Продаж ліцензії, Спільні НДДКР

НТП 2

Назва продукції (укр): Розділи лекцій дисципліни «Будова речовини як основа реакційної здатності» для здобувачів вищої освіти денної форми з нормативним терміном навчання ІІ курсу ступеня освіти «Магістр», ОП «Хімія» факультету хімії, біології і біотехнологій.

Назва продукції (англ): Lecture sections of the discipline “The structure of a substance as the basis of reactivity” for full-time students with a standard term of study of the 2 grade of the Master level of study at the Faculty of Chemistry, Biology and Biotechnologies.

Очікувані результати: Методичні документи

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук; 85.42 Вища освіта

Опис продукції (укр): Узагальнено результати систематичного дослідження ентальпійно-ентропійного компенсаційного ефекту в некаталітичних та каталізованих піридинами реакціях арилоксиранів з органічними кислотами різних класів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення рівня підготовки студентів закладів вищої освіти

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 01.202212.2022

Виробник продукції: ДонНУ імені Василя Стуса

Споживачі продукції: Заклади вищої освіти, Наукові установи

Перспективні ринки: Ринок освітніх послуг

Права інтелектуальної власності: належать авторам і ДонНУ імені Василя Стуса спільно

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Спосіб спектрофотометричного визначення концентрації катіона четвертинного амонію у середовищі епіхлоргідрину:

пат. 152096: МПК G01N 21/33 (2006.01) C07C 211/62 (2006.01) / Ютілова Ксенія Сергіївна, Швед Олена Миколаївна, Червонченко Іван Дмитрович – № u 2022 01928 заявл. 07.06.2022; опубл. 26.10.2022, Бюл. № 43. – 4 с.

Казаков О.А., Бахалова Є. А., Швед О. М. Вплив природи аніону тетраалкіламоніієвих солей у каталітичному ацидолізі хлорметилоксирану бензойною кислотою. Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2022): зб. тез доп. V Міжнар. (XV Українській) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених, м. Вінниця, 22-24 березня 2022 р. Вінниця, 2022. С. 66.

Evgeniia Bakhalova, Elena Shved, Anna Mishchenko, Liliia Lisova. Effect of structure of benzoic acids on catalytic acidolysis of 2-(chloromethyl) oxyrane. Open readings: March 15-18 Vilnius Lithuania. Vilnius University, 2022, P1-54, P. 158

I. V. Shpanko, I. V. Sadovaya Enthalpy–Entropy Compensation in Reactions of Oxirane Ring Opening. Russian Journal of Physical Chemistry A, 2022, Vol. 96, No. 11, pp. 2307–2317

Каталіз реакції 2-(хлорметил)оксирану з оцтовою кислотою металокомлексами на основі салофену / Соколовський Д. А., Марценюк Н. С., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей V Міжнародної (XV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 22–24 березня 2022 р., м. Вінниця. Вінниця, 2022. С. 70.

The effect of structure of tertiary amine on the acetolysis of 2-(chloromethyl)oxirane: ab initio and experimental study / K. Yutilova, E. Shved // Abstract book: 65th International Conference for students of physics and natural sciences «Open Readings-2022». Vilnius, Lithuania, March 15-18. Вільнюс, 2022. С. 106.

Спектрофотометричне визначення концентрації метилдиоктиламіну in situ у реакції розкриття циклу епіхлоргідрину оцтовою кислотою / Червонченко І. Д., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей V Міжнародної (XV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 22–24 березня 2022 р., м. Вінниця. Вінниця, 2022. С. 75

Дослідження впливу концентрації кислотного реагенту на кінетичні закономірності ацетолізу 2-(хлорметил)оксирану у присутності третинних амінів / Тарасенко В. В., Кравчук А. В., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей V Міжнародної (XV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 22–24 березня 2022 р., м. Вінниця. Вінниця, 2022. С. 72.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 29

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Бахалова Євгенія Анатоліївна

Беспалько Юлія Миколаївна (к. х. н., доц.)

Шпанько Ігор Васильович (д. х. н., професор)

Ютілова Ксенія Сергіївна (к. х. н.)

Керівник організації:

Гринюк Роман Федорович (д.ю.н., професор)

Керівники роботи:

Швед Олена Миколаївна (д. х. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.