Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U008341

Державний реєстраційний номер: 0113U001362

Відкрита

Дата реєстрації: 25-12-2015

1. Етапи виконання

Номер етапу: 3

Назва етапу: Розробка теоретичних і практичних основ синтезу метил-1,3,4-триметилциклогекс-3-енкарбоксилату та його використання

Початок етапу: 01-2015

Закінчення етапу: 12-2015

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Національний університет "Львівська політехніка"

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02071010

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: 79013, Україна, м.Львів, вул. С.Бандери, 12

Телефон: (032)258-20-25

Телефон: (032)258-26-80

E-mail: lazko@lp.edu.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.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: 2201020

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 122.254 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Одержання нових мономерів на основі алкілциклогексенкарбонових кислот та їх використання

Назва роботи (англ)

Obtaining of new monomers on the basis of alkilcyclohexenic acids and their use

Реферат (укр)

Вперше проведено квантово-хімічне моделювання [4+2]-циклоприєднання 2,3-диметилбута-1,3-дієну з метилметакрилатом за реакцією Дільса-Альдера за допомогою напівемпіричної програми MOPAC2012 методом RM1. Досліджено вплив співвідношення реагентів та температури на швидкість процесу та вихід цільового продукту. Встановлено оптимальні умови синтезу метил-1,3,4-триметилциклогекс-3-енкарбоксилату взаємодією 2,3-диметилбута-1,3-дієну з метилметакрилатом. Розроблено методики та проведено лабораторний синтез взірців метил-1,3,4-триметилциклогекс-3-енкарбоксилату.

Реферат (англ)

A quantum-chemical design of [4+2]-cycloaddition of 2,3-dimethylbuta-1,3-diene with methyl methacrylate after the Diels-Alder reaction by means of the semiempiric program MOPAC2012 by the RM1 method is first conducted . Influence of correlation of reagents and temperature is investigational on speed of process and output of having a special purpose product. The optimal terms of synthesis of methyl 1,3,4-cyclohex-3-encarboxlate are co-operating of 2,3-dimethylbuta-1,3-diene with methyl methacrylate. Methods are worked out and the laboratory synthesis of methyl 1,3,4-cyclohex-3-encarboxlate standards are conducted.

Індекс УДК: 547.51, 547.51

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.23

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Методики синтезу, аналізу та лабораторні взірці метил-1,3,4-триметилциклогекс-3-енкарбоксилату

Назва продукції (англ): Methods of synthesis, analysis and laboratory standards of methyl 1,3,4-trimethylcyclohex-3-encarboxylate

Очікувані результати:

Галузь застосування: 24.14.0 Виробництво іншої основної органічної хімічної продукції

Опис продукції (укр): Квантово-хімічне моделювання реакцій є основою прогнозування реакційної здатності сполук, механізмів взаємодії, взаємного впливу функціональних груп і замісників у молекулі на їхню реакційну здатність та фізико-хімічні властивості. Розроблені методики синтезу та аналітичного контролю дозволяють в оптимальних умовах синтезувати лабораторні взірці метил-1,3,4-триметилциклогекс-3-енкарбоксилату, який є вихідною речовиною для синтезу комономерів, модифікаторів, пластифікаторів, компонентів парфюмерних композицій.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Експериментальний (макетний зразок)

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 5 років

Виробник продукції: Національний університет "Львівська політехніка"

Споживачі продукції: хімічна промисловість

Перспективні ринки: Україна, ЄС

Права інтелектуальної власності: Отримано патент

Форми та умови передачі продукції: згідно договору

7. Бібліографічний опис

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 94

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Ковальський Ярослав Петрович

Федевич Марія Дмитрівна

Керівник організації:

Чухрай Наталія Іванівна

Керівники роботи:

Маршалок Галина Олексіївна

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.