Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U004085

Державний реєстраційний номер: 0116U002519

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу:

Назва етапу:

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Вид звітного документа:

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: +38 (0432) 50-89-30 , +38 (0432) 50-87-78

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

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

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 261.65

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Регіоселективний синтез епоксидних сполук різної топології

Назва роботи англійською:

Regioselective synthesis of epoxy compounds with different topologies

Реферат українською:

Кінетичними методами вивчено поведінку амінів як каталізаторів ацидолізу і фенолізу оксиранів. Оцінено спостережувані, каталітичні і некаталітичні константи швидкості реакції. Встановлено, що некаталітичний потік практично не впливає на спостережувану константу швидкості реакції. Для визначення характеру поведінки амінів (основи/нуклеофіли) в даній реакції проаналізовано їх реакційну здатність в рамках концепцій основного і нуклеофільного механізмів каталізу. Виходячи з кількісних закономірностей взаємозв'язку структура аміну - каталітична активність шляхом порівняння значень коефіцієнтів кореляцій (r) рівнянь, що описують механізми для різних реакційних систем, показано, що в реакціях оксиранів з протонодонорними реагентами (карбонові кислоти і феноли) каталітична активність третинних амінів/піридинів визначається їх нуклеофільністю, а не основністю. Вивчено вплив структури X-заміщених оксидів транс-4,4-дінітростільбен і Y-заміщених арилсульфокислот на швидкість реакції в суміші діоксану з 1,2-діхлоретаном (7: 3 об / об) при 265 К. Встановлено, що спільний вплив замісників X і Y на швидкість процесу розкриття оксиранового кільця неаддитивний. Показано можливість використання ізопараметричних точок в якості кількісних механістичних критеріїв. Досліджено кінетичні закономірності, запропонована схема основних реакцій гомополімеризації епоксидної смоли ЕД-20 у присутності комплексів амінів з трифторидами бору. Показано, що на початковій стадії процесу комплекси розпадаються під дією епоксидної смоли з вивільненням аміну і утворенням нового комплексу ЕД-20·BF3. Наявність у системі останнього сприяє протіканню двох напрямів реакції: 1-ого - гомополімеризації ЕД-20, що каталізується BF3, і 2-ого - тверднення ЕД-20 первинними і вторинними амінами або гомополімеризації ЕД-20, що каталізується третинними амінами, внесок кожного з яких визначається природою останніх. При цьому процес катіонної полімеризації смоли під впливом BF3 (1-ий напрям) конкурує з процесом тверднення смоли високоосновними первинними і вторинними амінами (2-ий напрям). У випадку ж комплексів низькоосновних первинних і вторинних, а також третинних амінів, істотний внесок у швидкість протікання процесу вносить саме 1-ий напрям реакції. Різні напрямки взаємодії амінів з епоксидною смолою дозволяють пояснити монотонне збільшення активності первинних і вторинних амінів зі зростанням їх основності (реакція нуклеофільного заміщення), і аномально низьку активність третинних амінів (ступінчаста полімеризація). Золь-гель методом синтезовано епоксидно-полісилоксанові й епоксидно-титанові композити катіонної полімеризації і амінного тверднення на основі смоли EPONEX 1510. Установлено, що в отриманих композитах підвищення вмісту наповнювача від 0,5 до 3,0 мас. % призводить до порушення топологічної структури епоксидної матриці, підвищення виходу золь-фракції і зниження температури склування. Методом сканувальної електронної мікроскопії показано, що розміри полісилоксанових частинок коливаються від 80-120 нм до 400 нм.

Реферат англійською:

The behavior of amines as catalysts for oxirane acidolysis and phenolysis has been studied using kinetic methods. The apparent catalytic and noncatalytic reaction rate constants have been estimated. It has been demonstrated that the noncatalytic pathway has almost no effect on the apparent reaction rate constant. In order to determine the character of the behavior of amines (bases/nucleophiles) in this reaction, their reactivity has been analyzed within the conceptions of basic and nucleophilic mechanisms of catalysis. Based on the quantitative amine structure—catalytic activity correlation, it has been shown by comparing the values of correlation coefficients (r)

of equations describing mechanisms for various reaction systems that, in the reactions of oxiranes with proton donors (carboxylic acids and phenols), the catalytic activity of tertiary amines/pyridines is determined by their nucleophilicity rather than basicity. The effect structure have on the rate of reactions between X-substituted trans-4,4'-dinitrostilbene oxide and Y-substituted arylsulfonic acids in a mixture of dioxane with 1,2-dichloroethane (7: 3 vol/vol) at 265 K is studied. It is found that as a result of the nonadditivity of the joint effect of substituents X and Y on the rate of the process of oxirane ring opening. The possibility of using isoparametric points as quantitative mechanistic criteria is demonstrated. The kinetics and scheme reaction of epoxy resin ED-20 homopolymerization in the presence of amines with boron trifluoride complexes are investigated. It is shown the complexes are decomposed under the epoxy resin's action with amine releasing and formation new complex ED-20·BF3 at the initial process' stage. The presence of the last one promotes the two directions of reaction: the 1st - the catalysis of ED-20 homopolymerization by BF3 and the 2nd - curing ED-20 by primary and secondary amines or the catalysis of ED-20 homopolymerization by tertiary amines. The contribution of each directions depends on the amine nature. The cationic polymerization process of the resin under the influence BF3 (the 1st direction) competes with the curing process of the resin highly basic primary and secondary amines (the 2nd direction). In the case of complexes lowly basic primary and secondary, and tertiary amines, significant contribution to the rate of the process makes first direction. Various directions of amines' reaction with epoxy help to explain a monotonic increase in the activity of the primary and secondary amines with an increasing of the basicity (nucleophilic substitution reaction), and abnormally low activity of tertiary amines (step-growths polymerization). Epoxy-silica and epoxy-titania composites of cationic polymerization and amine curing based on epoxy resin EPONEX 1510 were synthesized via sol-gel method. It was found that increasing of filler content in the obtained composites from 0,5 to 3 wt. % leads to imperfection of topological structure of epoxy matrix, raise of sol-gel fraction yield and decrease of glass transition temperature. According to scanning electron microscopy analysis data silica particles' size in the composites varies from 80-120 to 400 nm.

Індекс УДК: 543, 547-311:[547.56+547.29]:547-304.2/544.4767 +541.127:544.323.2:547.636.3:547.541+678.8:547.311

Коди тематичних рубрик: 31.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Швед Олена Миколаївна

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Навчальний посібник "Механізми органічних реакцій"

Назва НТП англійською: Textbook "Organic reactions' mechanisms"

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Навчальний посібник

Галузь застосування: 85.42 Вища освіта. 72.10 Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У навчальному посібнику обговорюється найважливіші механізми реакцій за участю органічних речовин. Розглянуто загальні уявлення щодо механізмів органічних реакцій та типів реагентів, наведені основні механізми реакцій, в тому числі функціональних та ланцюгових перегрупувань, що розглядаються в класичних університетах в курсі "Органічної хімії".

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: впроваджено у навчальний процес кафедри органічної хімії ДонНУ імені Василя Стуса у 2016 році

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: студенти хімічного факаультету ДонНУ імені Василя Стуса

Перспективні ринки: ринок освітніх послуг України та СНД

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 10

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 15

Очікуваний термін окупності (років): 3

Додаткова інформація: невиключна ліцензія-

Назва НТП українською: Навчальний посібник "Кінетика органічних реакцій"

Назва НТП англійською: Textbook " Organic reactions' kinetics"

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Навчальний посібник

Галузь застосування:85.42 Вища освіта. 72.10 Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В навчальному посібнику наведено програму курсу "Кінетика органічних реакцій", розглянуті основні розділи хімічної кінетики, а саме кінетика простих порядків, методи визначення порядків реакції, методи вимірювання швидкості реакції. Навчальний матеріал з кожного розділу включає лекції, приклади розв'язання задач, варіанти завдань для самостійної роботи.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: впроваджено у навчальний процес кафедри органічної хімії ДонНУ імені Василя Стуса (2016 р.)

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: студенти хімічних факультетів ВНЗ

Перспективні ринки: ринок освітніх послуг України та СНД

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 10

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 20

Очікуваний термін окупності (років): 4

Додаткова інформація: невиключна ліцензія-

Назва НТП українською: Методика одержання епоксидного композиту катіонної полімеризації

Назва НТП англійською: Method of obtaining of epoxy composite obtaned by cationic polymerization

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 85.42 Вища освіта. 72.10 Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Епоксидний композит, який містить органічну складову на основі дигліцидилового етеру дициклогексилолпропану та дисперсний титаноксидний наповнювач, сформований золь-гель методом на основі тетрабутоксититану, крижаної оцтової кислоти та метилетилкетону, при певному співвідношенні компонентів. Покриття на основі синтезованого епоксидного композиту можуть бути використані для захисту від корозії поверхні металу (алюмінієві сплави, сталь тощо), а також для захисту від біоруйнувань історичних та архітектурних пам’яток.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2019-2020 роки

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Авіаційна та оборонна промисловість, машино- й кораблебудування, захист історичних кам'яних та архітектурних пам'яток

Перспективні ринки: Ринок полімерних матеріалів України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 200

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 500

Очікуваний термін окупності (років): 10

Додаткова інформація: невиключна ліцензія-

Назва НТП українською: Хімія високомолекулярних сполук: навчальний посібник для студентів хімічних факультетів, які навчаються за спеціальністю "Хімія" / С. В. Жильцова, В. М. Михальчук, Н. Г. Леонова. – Вінниця : ДонНУ, 2016. – 194 с.

Назва НТП англійською: Macromolecular chemistry: training manual for students of the Faculty of Chemistry who are studying in the specialty of "Chemistry" / S. V. Zhiltsova, V. M. Mikhalchuk, N. G. Leonova. – Vinnitsa : DonNU, 2016. – 194 p.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: навчальний посібник

Галузь застосування: 85.42 Вища освіта. 72.10 Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Навчальний посібник є курсом лекцій, який складається з розділів, що стосуються основних способів синтезу полімерів, методів їх промислового одержання, структури полімерних тіл, властивостей розчинів полімерів і хімічних перетворень макромолекул. Кожний розділ містить перелік питань для самопідготовки, відповіді на які дозволять студентам краще засвоювати матеріал шляхом його аналізу та структурування при підготовці відповідей. У бібліографічному списку вказана література для поглибленого вивчення дисципліни.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2016 рік

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: студенти вищих навчальних закладів та спеціалісти, що мають потребу у вивченні та/або поглибленні знать з хімії полімерів

Перспективні ринки: ринок освітніх послуг України

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 20

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 25

Очікуваний термін окупності (років): 5

Додаткова інформація: невиключна ліцензія-

IX. Бібліографічний опис

1. Швед Е.Н., Беспалько Ю.Н., Бахтин С.Г. Амины как основные или нуклеофильные катализаторы реакции раскрытия оксиранового цикла протонодонорными нуклеофилами // Кинетика и катализ. - 2015. - Т. 57, № 1. - С. 49-53 (Kinetika i Kataliz. - 2016. - Vol. 57, No. 1. - P. 49-53). 2. Швед Е.Н., Беспалько Ю.Н., Синельникова М.А. Кинетические аспекты реакции гомополимеризации эпоксидной смолы ЭД-20 под действием комплексов аминов с трифторидом бора // Вопросы химии и химической технологии. - 2016. - Т. 3 (107). - С. 36-39. 3. Шпанько И.В., Садовая И.В. Компенсационный эффект в реакциях транс-4.4-динитростильбеноксида с аренсульфоновыми кислотами // Журнал физической химии. - 2016. - Т. 90 (12). - С. 1771-1778. (Russian Journal of Physical Chemistry A, 2016, Vol. 90, No. 12, pp. 2332-2338). 4. Шпанько И.В., Садовая И.В. Феномен изопараметричности в реакциях транс-2,3-диарилоксиранов с аренсульфоновыми кислотами. Механическая интепретация // Журнал общей химии. 2016. Т. 86. Вып. 11. -С. 1774-1778. 5. Bespal'ko Y., Shved E., Bakhtin S. Catalytic activity of tertiary amines with antisymbatic change of basic and nucleophilic properties in the chloroxypropylation reaction of acetic acid // Reac. Kinet. Mech. Cat. - 2016. - Vol. 119, № 1. - P. 139-148. 6. Швед О.М., Беспалько Ю.М., Сінельникова М.А. Механізми органічних реакцій: навч. посібник / уклад. О.М. Швед, М.А. Сінельникова, Ю.М. Беспалько. -Вінниця: ДонНУ, 2016. -60с. 7. Жильцова С. В., Леонова Н. Г., Михальчук В. М. Химия высокомолекулярных соединений : учебное пособие для студентов химических факультетов, обучающихся по специальности "Химия" / С. В. Жильцова, В. М. Михальчук, Н. Г. Леонова. -Винница: ДонНУ, 2016. - 194 с. 8. Швед О.М., Беспалько Ю.М., Сінельникова М.А. Кинетика органических реакций: учебное пособие/ сост.:Е.Н. Швед, Ю.Н, Беспалько, М.А. Синельникова. -Винница: ДонНУ имени Васыля Стуса, 2016. -87с.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Проректор з наукової роботи Хаджинов Ілля Васильович

Перелік осіб-виконавців

Беспалько Юлія Миколаївна

Жильцова Світлана Віталіївна

Калінський Олександр Михайлович

Леонова Наталя Геннадіївна

Ситник Наталія Сергіївна

Швед Олена Миколаївна

Шпанько Ігор Вальович

Ютілова Ксенія Сергіївна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

