

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U000019

Державний реєстраційний номер: 0124U000244

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез пластифікаторів для ПВХ на основі похідних жирних кислот та гідрофобних онієвих солей. Дослідження фізико-хімічних властивостей та антимікробної активності пластифікованих полімерних композицій.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442960409, 380445732552

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1556.120

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез і дослідження поліфункціональних модифікуючих домішок на основі рослинної і нафтохімічної сировини для промислових полімерів.

Назва роботи англійською:

Synthesis and study of multifunctional modifying additives based on vegetable and petrochemical raw materials for engineering polymers.

Реферат українською:

Синтезовано нові поліфункціональні модифікуючі домішки для полівінілхлориду (ПВХ), які включають третинні амід жирних кислот (олеїнової, ундеценової, лауринової і себацінової) та гідрофобні онієві солі на основі катіонів 1,3-діалкілімідазолію, тетраалкіламонію та алкілтрифенілфосфонію. Будову отриманих сполук підтверджено методами ЯМР- та ІЧ-спектроскопії. Отримано гомогенні композиційні плівки ПВХ з модифікуючими домішками. Методом ІЧ-спектроскопії встановлено фізико-хімічну взаємодію між карбонільними групами домішок та групами С-Сl полімеру з утворенням молекулярних комплексів. Більшість синтезованих сполук має високу стійкість до міграції з ПВХ, на рівні традиційного пластифікатора БЕГФ. Методом диференційної сканувальної калориметрії встановлено, що третинні амід знижують температуру склування (Tg) ПВХ на 70-90 °С за вмісту 20-30 % і відповідно проявляють властивості первинних пластифікаторів. Онієві солі мають слабший пластифікаційний ефект на ПВХ і знижують величину Tg на 40-70 °С за вмісту 20 %. Результати механічних досліджень підтверджують пластифікаційні властивості модифікуючих домішок, які проявляються у значному збільшенні видовження при розриві композиційних полімерних плівок (10-40 разів) у порівнянні з чистим ПВХ. Згідно з результатами термогравіметричного аналізу, композиції ПВХ мають температуру початку деструкції вище 200 °С і є придатними для переробки промисловими методами. За допомогою мікробіологічних досліджень встановлено, що композиції ПВХ з третинними амідом ундеценової кислоти проявляють антибіоплівкову активність проти грам-негативної (*Escherichia coli*) і грам-позитивної (*Staphylococcus aureus*) бактерій за вмісту домішок 30 %. Гідрофобні онієві солі мають ширший спектр антимікробної активності у порівнянні з третинними амідом і ефективно пригнічують утворення мікробних біоплівок на поверхні ПВХ за вмісту 20-30 %.

Реферат англійською:

New polyfunctional modifying additives for polyvinyl chloride (PVC) including tertiary amides of fatty acids (oleic, undecylenic, lauric and sebacic), as well as hydrophobic onium salts based on 1,3-dialkylimidazolium, tetraalkylammonium and alkyltriphenylphosphonium cations, have been synthesized. The structure of the synthesized compounds was confirmed by NMR spectroscopy, as well as IR spectroscopy. Homogeneous composite films of PVC with modifying additives have been prepared. The results of IR-study revealed physicochemical interaction between carbonyl groups of additives and C-Cl groups of polymer matrix with the formation of molecular complexes. Most of the synthesized compounds have high resistance to migration from PVC, at the level of common plasticizer BEHP. It was established by differential scanning calorimetry that tertiary amides reduce the glass transition temperature (Tg) of PVC by 70-90 °C at a content of 20-30 % and, accordingly, exhibit the properties of primary plasticizers. Onium salts have a weaker plasticizing effect on PVC and reduce the Tg value by 40-70 °C at a content of 20 %. The results of mechanical studies confirm the plasticizing properties of the modifying additives, which are manifested in a significant increase in the elongation at break of composite polymer films (in 10-40 times) compared to pure PVC. According to the results of thermogravimetric analysis, PVC compositions have a thermal degradation point above 200 °C and are suitable for processing by industrial methods. Microbiological studies have shown that PVC compositions with tertiary amides of undecenoic acid

exhibit antibiofilm activity against gram-negative (*Escherichia coli*) and gram-positive (*Staphylococcus aureus*) bacteria at a content of 30 %. Hydrophobic onium salts have a broader spectrum of antimicrobial activity compared to tertiary amides and effectively inhibit the formation of microbial biofilms on the surface of PVC at a content of 20-30 %.

Індекс УДК: 547.595, 547.7/.8, 678.5.03, 667.6:678.03

Коди тематичних рубрик: 31.21.21.15, 31.21.27, 61.61.09, 61.65.09

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Рогальський Сергій Петрович

Науковий ступінь: к. х. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Модифікована фенолформальдегідна смола новолачного типу.

Назва НТП англійською: Modified phenol-formaldehyde resin of the novolach type.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Машинобудування, будівництво, медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезовано нові поліфункціональні модифікуючі домішки до ПВХ, які включають третинні аміди жирних кислот (олеїнової, ундеценової, лауринової, себацинової) та гідрофобні онієві солі на основі катіонів 1,3-діалкілімідазолію, тетраалкіламонію, алкілтрифенілфосфонію. Сполуки мають високу або помірну сумісність з ПВХ і утворюють гомогенні композиційні плівки за вмісту домішок 20-40 %. Аміди жирних кислот проявляють властивості первинних пластифікаторів для ПВХ і знижують температуру склування полімеру на 70-90 °С. Основною потенційною перевагою амідних пластифікаторів над традиційними є висока стійкість до мікробіологічної деструкції. Гідрофобні онієві солі знижують температуру склування ПВХ на 40-70 °С і проявляють властивості вторинних пластифікаторів. Важливими перевагами цих сполук є відсутність леткості, а також широкий спектр антимікробної активності проти грам-позитивних і грам-негативних бактерій, грибів та біоплівок.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія матеріалів, Виготовлення композитних матеріалів з покращеними властивостями.

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Підприємства – виробники гнучких виробів з ПВХ технічного, медичного і побутового призначення

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

- 1) Semenyuta I., Kovalishyn V., Hodyna D., Startseva Y., Rogalsky S., Metelytsia L. New QSTR models to evaluation of imidazolium- and pyridinium-contained ionic liquids toxicity. Computational Toxicology. 2023. Vol. 30. 100309. DOI: 10.1016/j.comtox.2024.100309
- 2) Kobrina L., Boiko V., Shtompel V., Hudzenko N., Rogalsky S., Frasinuk M., Kozitskiy A., Riabov S. Inclusion complex of ionic liquid 1-dodecylpyridinium tetrafluoroborate with sulfobutyl ether- α -cyclodextrin: preparation and characterization. Journal of Molecular Structure. 2024. Vol. 1309. 138137. DOI: 10.1016/j.molstruc.2024.138137
- 3) Zubova G., Melnyk H., Zaets I., Sergeyeva T., Havryliuk O., Rogalsky S., Khirunenko L., Zaika L., Ruban T., Antonenko S., Kozyrovska N. Halochromic bacterial cellulose/anthocyanins hybrid polymer film with wound-healing potential. Polymers. 2024. Vol. 16. 2327. DOI: 10.3390/polym16162327
- 4) Gryniukova A., Borysko P., Myziuk I., Aliksieieva D., Hodyna D., Semenyuta I., Kovalishyn V., Metelytsia L., Rogalsky S., Tcherniuk S. Anticancer activity features of ester-functionalized imidazole-based ionic liquids and lysosomotropic detergents: in silico and in vitro studies. Molecular Diversity. 2024. DOI: 10.1007/s11030-023-10779-4

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Броварець Володимир Сергійович
д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Аксеновська Олеся Анатоліївна
(к.х.н., 02.00.06)

Джужа Олег Віталійович
(к.т.н., 21.06.01)

Тарасюк Оксана Петрівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Бондаренко О.М.

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

