Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0210U003246

Державний реєстраційний номер: 0107U001102

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-01-2010

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка теоретичних і практичних основ синтезу похідних димерів а-алкілкролеїнів

Початок етапу: 01.2007

Закінчення етапу: 12.2009

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (032)2582025, (032)2375089

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 307.819

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка теоретичних і практичних основ синтезу похідних димерів а-алкілкролеїнів

Назва роботи англійською:

Elaboration theoretical and practical basis of a-alkylacrolein dimers derivatives synthesis

Реферат українською:

Вперше проведено квантово-хімічне обґрунтування механізму сумісного синтезу натрієвих солей 2,5 диметил- та 2,5-діетил-3,4-дигідро-2Н-піран-2-карбонових кислот і 2,5-диметил та 2,5-діетил-3,4-дигідро-2Н-піран-2-метанолів за реакцією Канніццаро за допомогою напівемпіричної програми MOPAC2009 в різних розчинниках. Розроблено методики синтезу та аналітичного контролю, вивчено вплив температури на швидкість реакції та вихід цільових продуктів. Встановлено оптимальні умови синтезу та одержано лабораторні взірці 2,5 диметил- та 2,5-діетил-3,4-дигідро-2Н-піран-2-карбонових кислот та їх натрієвих солей і 2,5-диметил та 2,5-діетил-3,4-дигідро-2Н-піран-2-метанолів за реакцією Канніццаро. Методами ІЧ- та ЯМР-спектроскопії підтверджено будову синтезованих речовин. Методом рентгеноструктурного аналізу монокристалу було встановлено, що молекула 2,5-диметил-3,4-дигідро-2Н-піран-2-карбонової кислоти перебуває в виді пів-крісла ендо-діастеромера. Характер розміщення піків на дифрактограмах рентгеноструктурного аналізу порошків натрієвих солей 2,5-диметил- і 2,5-діетил-3,4-дигідро-2Н-піран-2-карбонових кислот та їх інтенсивність вказує на те, що вони ізоструктурні та мають подібну молекулярну будову. Встановлено, що димери а-алкілакролеїнів та їх спиртові похідні володіють високою біологічною активністю, завдяки чому можуть використовуватись для створення нових вітчизняних ветеринарних препаратів.

Реферат англійською:

The quantum-chemical ground of joint synthesis mechanism of sodium salts of 2,5-dimethyl- and 2,5-diethyl-3,4-dihydro-2H-pyran-2-carboxylic acids and 2,5-dimethyl- and 2,5-diethyl-3,4-dihydro-2H-pyran-2-methanols is first conducted on the Cannizzaro reaction by the semiempiric program MOPAC2009 in different solvents. The methods of synthesis and analytical control are developed, influence of temperature on speed of reaction and output products is studied. The optimum terms of synthesis are set and the laboratory standards of 2,5-dimethyl- and 2,5-diethyl-3,4-dihydro-2H-pyran-2-carboxylic acids and their sodium salts and 2,5-dimethyl- and 2,5-diethyl-3,4-dihydro-2H-pyran-2-methanols are got on the Cannizzaro reaction. The structures of the synthesized matters are confirm by the IR- and NMR-spectroscopies methods. It was set by the single-crystal X-ray method, that a molecule of 2,5-dimethyl-3,4-dihydro-2H-pyran-2-carboxylic acid is as an armchair of endo-diasteromer. Character of placing of peaks on the diffractograms of X-ray analysis of sodium salts powders of 2,5-dimethyl- and 2,5-diethyl-3,4-dihydro-2H-pyran-2-carboxylic acids and their intensity specifies that they are isostructuric and have a similar molecular structure. It is set that the a-alkylacrolein dimers and their alcoholic derivatives have high biological ability, which will allow to use them for obtaining new national veterinary drugs.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547. 7/8

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Маршалок Галина Олексіївна

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методики синтезу та аналізу похідних димерів а-алкілкролеїнів

Назва НТП англійською: Synthesis and analysis methods of derivative dimers of a-alkylacrolein

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Лабораторні взірці 2,5-диметил- та 2,5-діетил-3,4-дигідро-2Н- піран-2-карбонових кислот та їх натрієвих солей і 2,5-диметил- та 2,5-діетил-3,4-дигідро- 2Н-піран- 2-метанолів. Методами ІЧ- та ЯМР-спектроскопії підтверджено будову синтезованих речовин. Встановлено, що та їх спиртові похідні димерів володіють високою біологічною активністю.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 5 років

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: хімічна промисловість, ветеринарія

Перспективні ринки: Україна, ЄС

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 500

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): 5

Додаткова інформація: згідно договору

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Піх Зорян Григорович

Перелік осіб-виконавців

Карп'як Наталія Миронівна

Ковальський Ярослав Петрович

Полюжин Ігор Петрович

Федевич Марія Дмитрівна

Ятчишин Йосип Йосипович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

