Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U008683

Державний реєстраційний номер: 0110U001105

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-12-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Розробка теоретичних і практичних основ синтезу естерів алкілциклогексенових кислот за реакцією Дільса-Альдера

Початок етапу: 01.2012

Закінчення етапу: 12.2012

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, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (032)237-50-89

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.): 180.876

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка теоретичних і практичних основ синтезу алкілциклогексенових кислот та їх естерів

Назва роботи англійською:

Elaboration theoretical and practical basis of synthesis of alkylcyclohexenic acids and their esters

Реферат українською:

Розроблено теоретичні і практичні основи процесів одержання 2,3-диметилбутадієну-1,3 з пінакону та його гексагідрату, алкілциклогексенових кислот і їх естерів з дієну та алкілакрилових кислот або їх метилових естерів, відповідно. Вперше проведено квантово-хімічне моделювання реакцій дегідратації пінакону та його гексагідрату, [4+2]-циклоприєднання 2,3-диметилбута-1,3-дієну з метакриловою кислотою та метилакрилатом за реакцією Дільса-Альдера за допомогою напівемпіричної програми MOPAC2009. Встановлено оптимальні умови одержання 2,3-диметилбутадієну-1,3, алкілциклогексенових кислот та їх естерів. Розроблено методики їх синтезу та аналізу. Синтезовано лабораторні взірці.

Реферат англійською:

Elaboration theoretical and practical basis of synthesis of dehydratation reaction of pinacol and it's hexahydrate, of alkylcyclohexenic acids and their esters. For the first time held the quantum-chemical motivation of mechanism of dehydratation reaction of pinacol and it's hexahydrate, of [4+2]-cycloaddition of 2,3-dimethylbuta-1,3-diene with methacrylic acid and methylacrylate by the Diels-Alder reaction by means of the semiempiric program MOPAC2009. The optimal terms of synthesis of 2,3-dimethylbuta-1,3-diene, of alkylcyclohexenic acids and their esters were obtained. The synthetic methodics and analysis were developed. The it's laboratory samples were synthesized.

Індекс УДК: 547.51, 547.51

Коди тематичних рубрик: 31.21.23

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: Теоретичні та практичні основи синтезу алкілциклогексенових кислот та їх естерів

Назва НТП англійською: Theoretical and practical bases of synthesis of 3,4-dimethyl-1-alkylcyclohex-3-encarboxylic acids and them esters

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 24.14.0 Виробництво іншої основної органічної хімічної продукції

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Квантово-хімічне моделювання рекакцій є теоретичною основою прогнозування реакційної здатності сполук, механізмів взаємодії, взаємного впливу функціональних груп і замісників у молекулі на їхню реакційну здатність та фізико-хімічні властивості. Лабораторні взірці 2,3-диметилбутадієну, 3,4-диметил-1-алкілциклогекс-3-єнкарбонових кислот та їх естерів є вихідними речовинами для одержання широкого асортименту вітчизняних пластифікаторів, ароматизаторів, поліфункціональних мономерів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 5 років

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: хімічна промисловість

Перспективні ринки: Україна, ЄС, СНД

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

д. х. н.

Перелік осіб-виконавців

Ковальський Ярослав Петрович

Маршалок Галина Олексіївна

Маршалок Ольга Ігорівна

Польова Ірина Світозарівна

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

