

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005435

Державний реєстраційний номер: 0119U002032

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Виявлення оптимальних схем переробки гліцерину (відходу виробництва БД) та його похідних в сполуки з корисними властивостями, що мають практичну та комерційну перспективу. Створення наукових основ для розробки вітчизняних технологій та матеріалів на основі гліцерину і його похідних.

Початок етапу: 09.2022

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

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, 01061, 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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1626.870

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Продукти тонкого органічного синтезу на основі каталітичних перетворень гліцерину та його похідних.

Назва роботи англійською:

Products of fine organic synthesis based on catalytic transformations of glycerin and its derivatives.

Реферат українською:

Об'єкти дослідження – природні алюмосилікати, гліцерин і його каталітичні перетворення. Мета роботи – розробка наукових основ комплексу каталітичних методів перетворень гліцерину та його похідних (естерів, етерів, карбонатів, ацеталів, кеталів ін.) у т.зв. «малотоннажні продукти», які уявляють зацікавленість у якості присадок для моторних палив, фармації, косметичі, харчової промисловості. Методи дослідження: потенціометрія, спектрофотометрія, тонкошарова (ТШХ) і газорідинна (ГРХ) хроматографія, мас-спектрометрія, УФ і ЯМР спектроскопія. Виявлено основні чинники, що визначають каталітичну активність кислотно-модифікованих Н-СЛІ, Н-Бент та Н-Тр в реакції гліцерину (ГЛ) з ацетоном (Ас). Основним продуктом реакції є 2,2-диметил-4-гідроксиметил-1,3-діоксолан. Каталітичні властивості вивчених зразків залежать від способу приготування, кислотності поверхні і об'єму реакційної суміші. Виявлено оптимальні умови отримання Н-СЛІ, Н-Бент та Н-Тр, що впливають на їх каталітичну активність в реакції ГЛ з бензальдегідом (БА). За інших рівних умов, зразки Н-Бент, як правило, більш активні, ніж Н-СЛІ та Н-Тр, а також сульфокатіоніт КУ-2. В реакції гліцерину (ГЛ) з циклогексаноном (СНоне) виявлено, що серед Н-зразків, на відміну від модифікованих аренсульфоновою кислотою, більшу активність проявляє бентоніт, тоді як трепел більш активний серед АС-зразків. Відганяючи воду, що утворюється в ході реакції ГЛ з пінаколіном (РС), можна збільшити конверсію ГЛ до 80%. Майже порівну утворюється п'яти- (53%) та шестичленний (47%) кеталі. Вивчені особливості тозилування 2-заміщених піримідин-4(3Н)-онів, що містять подвійний зв'язок в п-положенні бокового ланцюга. Встановлено, що реакція 2-вінілпіримідин-4(3Н)-онів та бензоїлпохідних 2-тіоурацилу з п-толуолсульфохлоридом здійснюється селективно по атому оксигену амідної групи з утворенням відповідних сульфонатів. На основі отриманих результатів розроблено метод амінування 1-амінопропан-2,3-діолом ряду похідних 2-тіоурацилів.

Реферат англійською:

Objects of research – natural aluminosilicates, glycerol and its catalytic transformations. Aim of work – develop scientific foundations of complex catalytic methods for converting glycerol and its derivatives (esters, ethers, carbonates, acetals, ketals, etc.) into so-called "low-tonnage products" that are interested as additives for motor fuels, pharmaceuticals, cosmetics, food industry. Research methods: potentiometry, spectrophotometry, thin-layer (TLC) and gas-liquid (GC) chromatography, mass spectrometry, UV-, NMR spectroscopy. Main factors determining catalytic activity of acid-modified H-CLI, H-Bent and H-Tr in reaction of glycerol (GL) with acetone (Ac) were founded. Main product is 2,2-dimethyl-4-hydroxymethyl-1,3-dioxolane. Catalytic properties of studied samples depend on preparation method, surface acidity, and volume of reaction mixture. Optimal conditions for obtaining H-CLI, H-Bent and H-Tr, which affect their catalytic activity in reaction of GL with benzaldehyde (BA), were founded. H-Bent samples are generally more active than H-CLI and H-Tr, also sulfocationite KU-2. In reaction of glycerol (GL) with cyclohexanone (CHone), it was found that bentonite more active among H-samples, unlike those modified with arenesulfonic acid, while trepel more active among AS-samples. By removing water formed during reaction of GL with pinacoline (PC), GL conversion can be increased to 80%. Five-membered (53%) and six-membered (47%) ketals are formed almost equally. Peculiarities tosylation of 2-substituted pyrimidine-4(3H)-ones containing a double bond in p-position of side chain were studied. It was established that reaction of 2-vinylpyrimidin-4(3H)-ones and benzoyl derivatives of 2-thiouracil with p-toluenesulfochloride is carried out selectively on oxygen atom of amide group with formation corresponding sulfonates. Based on obtained results,

method of amination with 1-aminopropane-2,3-diol of number 2-thiouracil derivatives was developed.

Індекс УДК: 547.9;577.1, 547.426.1; 547.426.2; 547-316; 547.582; 542.9417; 542.943-92; 544.47:544.342.

Коди тематичних рубрик: 31.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Камалов Герберт Леонович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Дослідження каталітичних властивостей модифікованих аренсульфоною (AS), нітратною (H) кислотами бентоніту (Bent), кліноптилоліту (CLI), трепелу(Tr) в реакції гліцерину (GL) з циклогексаном (CHone).

Назва НТП англійською: Study the catalytic properties of bentonite (Bent), clinoptilolite (CLI), trepel (Tr) modified with arenesulfonic (AS), nitric (H) acids in reaction of glycerol (GL) with cyclohexanone (CHone).

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В реакціях гліцерину (GL) з циклогексаном (CHone) та пінаколіном (PC) показано перспективність модифікованих аренсульфоною (AS) та нітратною (H) кислотою кліноптилоліту (AS-CLI, H-CLI), бентоніту (AS-Bent, H-Bent) та трепелу (AS-Tr, H-Tr) в якості каталізаторів трансформації GL до циклічних кеталів. Виявлено, що серед H-зразків, на відміну від модифікованих аренсульфоною кислотою, більшу активність проявляє бентоніт, тоді як трепел найбільш активний серед AS-зразків. Кінетика реакції GL з CHone задовільно описується моделлю Міхаеліса-Ментен. В залежності від того, скільки молекул GL бере участь в лімітуючій стадії, згідно концентраційного порядку реакції по GL, реалізується різний механізм. Виявлено, що реакцію GL з PC необхідно проводити з відгонкою води, що утворюється протягом реакції. В результаті, майже порівну утворюється п'яти- (53%) та шестичленний (47%) циклічний кеталь: 2-трет-бутил-2-метил-1,3-диоксолан-4-метанол та 2-трет-бутил-2-метил-1,3-диоксан-5-ол, відповідно.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 09.2022

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Підприємства хімічної галузі

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:

ІХ. Бібліографічний опис

1. Яволовський А.О., Давтян А.С., Гришук Л.В., Плужник-Гладир С.М., Ракіпов І.М., Іванов Ю.Е., Чіхічін Д.Г., Камалов Г.Л. Амінування похідних 2-(2-оксо-2-арілетилтіо)-піпимідин-4(3Н)-онів із використанням сульфонатного методу. УХЖ. – 2023. – Т. 89, № 1. – С. 60–67.
2. Давтян А.С., Камалов Г.Л. Каталітичні властивості кислотного-модифікованого трепелу в ацеталізації та ацилуванні гліцерину. Тези доп. XV Всеукраїнська конференція студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські читання – 2023» 24–26 квітня 2023 року. Харків. – С. 175–176.
3. Давтян А.С., Чіхічін Д.Г., Левченко О.О., Камалов Г.Л. Ацилування гліцерину у присутності модифікованих нітратною кислотою природних алюмосилікатів. Зб. тез доп. XIX наукової конф. «Львівські хімічні читання-2023»: – Львів, 29–31 травня 2023 року. Львів: – 2023. – С. 141.
4. Давтян А.С. Ацеталізація гліцерину циклогексаноном у присутності модифікованих аренсульфоновою кислотою природних алюмосилікатів. Тези доп. XXII Наукової молодіжної конференції «Проблеми та досягнення сучасної хімії» –14–15 вересня 2023 року. Одеса. – С. 8.
5. Давтян А.С. Ацеталізація гліцерину циклогексаноном у присутності кислотного-модифікованих природних алюмосилікатів. Тези доп. XI Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції здобувачів вищої освіти та молодих учених «Хімія і сучасні технології» – 6–7 грудня 2023 року. Дніпро. – С. 43.
6. Давтян А.С., Чіхічін Д.Г., Левченко О.О., Камалов Г.Л. Гліцерин як перспективна сировина для синтезу сполук з корисними властивостями. Зб. тез доп. Всеукраїнської науково-практичної конференції присвяченої повоєнному відродженню та євроінтеграції України «Співпраця науки, освіти, бізнесу та влади: Розвиток євроінтеграційних ідей та професійної спільноти в Україні» – 21 грудня 2023 року, Одеса. – С.76–79.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

Д. Х. Н.

Перелік осіб-виконавців

Гришук Лідія Володимирівна

(К. Х. Н.)

Давтян Аракся Сейранівна

(молодший науковий співробітник)

Камалов Герберт Леонович

(Д. Х. Н.)

Левченко Ольга Олександрівна

(молодший науковий співробітник)

Плужник-Гладир Сергій Михайлович

(К. Х. Н.)

Чіхічін Дмитро Герасимович

(К. Х. Н.)

Яволовський Аркадій Олександрович

(Д. Х. Н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Іллюшко Н. О.

Телефон

+38 (067) 724-39-55

Реєстратор

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

