Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U001348

Державний реєстраційний номер: 0121U110142

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-01-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Сумісний вплив структури і температури у реакції ацидолізу хлорметилоксирану

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380432508930, 380432508778

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380432508930

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7706 - безплатно (договір про науково-технічне співробітництво, тощо)

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Сумісний вплив температури та структури на каталітичний ацидоліз епіхлоргідрину

Назва роботи англійською:

Joint effect of temperature and structure on catalytic acidolysis of epichlorohydrin

Реферат українською:

Досліджено методами хімічної кінетики, спектроскопії, кореляційного аналізу систему «оксиран - органічна кислота – каталізатор основної природи», для якої встановлено умови виявлення унікального ізопараметричного ефекта, розроблено новий метод визначення концентрації аліфатичних третинних амінів в ході реакції. Узагальнено результати дослідження ентальпійно-ентропійного компенсаційного ефекту в некаталітичних та каталізованих піридинами реакціях арилоксиранів з органічними кислотами різних класів. Цей ефект проявляється в ізопараметричних (ізокінетичних, ізоенергетичних) реакційних серіях внаслідок взаємодії (неадитивності) спільних ефектів температури та структури. Наведено експериментальні докази його фізичної реальності у низці перехресних реакційних серій. Обговорено характер активаційних процесів без ентальпійно-ентропійної компенсації Описано спосіб спектрофотометричного визначення концентрації катіона четвертинного амонію у середовищі епіхлоргідрину, що дозволяє контролювати поточну концентрацію аміна / четвертинної амонієвої солі та надає інформацію стосовно поведінки каталізатора в ході реакції, що дає змогу для дослідження механізму реакції.

Реферат англійською:

The system "oxirane - organic acid - catalyst of basic nature" was studied using the methods of chemical kinetics, spectroscopy, and correlation analysis, for which the conditions for detecting a unique isoparametric effect were established, and a new method for determining the concentration of aliphatic tertiary amines during the reaction was developed. Results are summarized from a study of the enthalpy–entropy compensation effect in non-catalytic and pyridine-catalyzed reactions of aryloxiranes with organic acids of various classes. This effect is observed in isoparametric (isokinetic, isoenergetic) reaction series, due to the interaction (nonadditivity) of the joint effects of temperature and structure. Experimental evidence of its physical reality in a number of cross reaction series is considered. The character of activation processes when there is no enthalpy–entropy compensation is discussed. The method of spectrophotometric determination of quaternary ammonium cation concentration in epichlorohydrin medium is described, which allows to control the current concentration of amine / quaternary ammonium salt and provides information about the behavior of the catalyst during the reaction, which makes it possible to study the reaction mechanism.

Індекс УДК: 544.1;544.41, 547:544.18; 547:544.16; 547:544.12 , 547:544-42/.43 , 547-311:[(547.56 +547.29):547-304.2/544.476 +541.127:544.323.2]

Коди тематичних рубрик: 31.15.27.05, 31.21.15 , 31.21.18

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Спосіб спектрофотометричного визначення концентрації катіона четвертинного амонію у середовищі епіхлоргідрину

Назва НТП англійською: The method of spectrophotometric determination of quaternary ammonium cation concentration in epichlorohydrin medium

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук; 85.42 Вища освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: 1. Запатентовано спосіб спектрофотометричного визначення концентрації катіона четвертинного амонію у середовищі епіхлоргідрину, який відрізняється тим, що включає екстрагування четвертинної амонієвої солі водою з епіхлоргідрину, утворення комплексу з бромтимоловим синім у присутності цитратно-фосфатного буферного розчину з подальшою екстракцією хлороформом і спектрофотометруванням при довжині хвилі максимуму оптичного поглинання 407 нм.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Заклади вищої освіти, Наукові установи, Хімічні лабораторії

Перспективні ринки: Ринок освітніх послуг, Ринок хіміко-аналітичного контролю

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Розділи лекцій дисципліни «Будова речовини як основа реакційної здатності» для здобувачів вищої освіти денної форми з нормативним терміном навчання ІІ курсу ступеня освіти «Магістр», ОП «Хімія» факультету хімії, біології і біотехнологій.

Назва НТП англійською: Lecture sections of the discipline “The structure of a substance as the basis of reactivity” for full-time students with a standard term of study of the 2 grade of the Master level of study at the

Faculty of Chemistry, Biology and Biotechnologies.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методичні документи

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук; 85.42 Вища освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Узагальнено результати систематичного дослідження ентальпійно-ентропійного компенсаційного ефекту в некаталітичних та каталізованих піридинами реакціях арилоксиранів з органічними кислотами різних класів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення рівня підготовки студентів закладів вищої освіти

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Заклади вищої освіти, Наукові установи

Перспективні ринки: Ринок освітніх послуг

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Спосіб спектрофотометричного визначення концентрації катіона четвертинного амонію у середовищі епіхлоргідрину: пат. 152096: МПК G01N 21/33 (2006.01) C07C 211/62 (2006.01) / Ютілова Ксенія Сергіївна, Швед Олена Миколаївна, Червонченко Іван Дмитрович – № u 2022 01928 заявл. 07.06.2022; опубл. 26.10.2022, Бюл. № 43. – 4 с.

Казаков О.А., Бахалова Є. А., Швед О. М. Вплив природи аніону тетраалкіламонієвих солей у каталітичному ацидолізі хлорметилоксирану бензойною кислотою. Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2022): зб. тез доп. V Міжнар. (XV Українській) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених, м. Вінниця, 22-24 березня 2022 р. Вінниця, 2022. С. 66.

Evgeniia Bakhalova, Elena Shved, Anna Mishchenko, Liliia Lisova. Effect of structure of benzoic acids on catalytic acidolysis of 2-(chloromethyl) oxyrane. Open readings: March 15-18 Vilnius Lithuania. Vilnius University, 2022, P1-54, P. 158

I. V. Shpanko, I. V. Sadovaya Enthalpy–Entropy Compensation in Reactions of Oxirane Ring Opening. Russian Journal of Physical Chemistry A, 2022, Vol. 96, No. 11, pp. 2307–2317

Каталіз реакції 2-(хлорметил)оксирану з оцтовою кислотою металокомлексами на основі салофену / Соколовський Д. А., Марценюк Н. С., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей V Міжнародної (XV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 22–24 березня 2022 р., м. Вінниця. Вінниця, 2022. С. 70.

The effect of structure of tertiary amine on the acetolysis of 2-(chloromethyl)oxirane: ab initio and experimental study / K. Yutilova, E. Shved // Abstract book: 65th International Conference for students of physics and natural sciences «Open Readings-2022». Vilnius, Lithuania, March 15-18. Вільнюс, 2022. С. 106.

Спектрофотометричне визначення концентрації метилдиоктиламіну in situ у реакції розкриття циклу епіхлоргідрину оцтовою кислотою / Червонченко І. Д., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей V Міжнародної (XV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 22–24 березня 2022 р., м. Вінниця. Вінниця, 2022. С. 75

Дослідження впливу концентрації кислотного реагенту на кінетичні закономірності ацетолізу 2-(хлорметил)оксирану у присутності третинних амінів / Тарасенко В. В., Кравчук А. В., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей V Міжнародної (XV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 22–24 березня 2022 р., м. Вінниця. Вінниця, 2022. С. 72.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Гринюк Роман Федорович, д.ю.н., 12.00.01

Перелік осіб-виконавців

Бахалова Євгенія Анатоліївна

Беспалько Юлія Миколаївна
(к. х. н., 02.00.03)

Шпанько Ігор Васильович
(д. х. н., 02.00.03)

Ютілова Ксенія Сергіївна
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів — РАДІО Сергій Вікторович

Телефон — +38 (095) 397-43-17

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

