# Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0221U101568

**Державний реєстраційний номер:** 0120U100324

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 22-01-2021

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 1

**Назва етапу:** Вплив стеричного фактора та полярності розчинника на регіо-селективність реакції розкриття оксирано-вого циклу методами експериментальної та теоретичної хімії

**Початок етапу:** 01.2020

**Закінчення етапу:** 12.2020

**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:

Регіоселективність ацидолізу епіхлоргідрину: вплив стеричного фактора та полярності розчинника

### Назва роботи англійською:

Regioselectivity of epichlorohydrin acidolysis: effect of steric factor and solvent polarity

### Реферат українською:

Методами хімічної кінетики, комп'ютерного моделювання, ЯМР-спектроскопії досліджено ацидоліз 2-(хлорметил)оксирану (епіхлоргідрину) оцтовою та бензойною кислотами у присутності галогенідів тетраалкіламонію у розчиннику епіхлоргідрин: тетрагідрофуран (1:1 об.). Встановлено, що реакція має нульовий порядок за кислотою та перший за каталізатором. Продуктами реакції є хлоргідринові естери «нормальної» (n-P) та «аномальної» (a-P) будови. Визначено, що швидкість реакції залежить від природи і структури кислотного реагенту і каталізатора, полярності розчинника. Встановлено, що бензойна кислота виявляє більш високу реакційну здатність, ніж оцтова. Каталітична активність галогенідів тетраалкіламонію підвищується зі збільшенням радіусів іонів і нуклеофільності аніонів солі. Зниження полярності розчинника (епіхлоргідрин та епіхлоргідрин:тетрагідрофуран) сприяє підвищенню швидкості реакції та її регіоселективності – утворенню продукту «нормальної» будови n-P. Переважне утворення естера n-P відповідає внеску SN2-механізма у стадію нуклеофільного розкриття циклу. Регіоселективність реакції практично не залежить від природи кислоти та зростає зі збільшенням стеричного фактора і зниженням полярності розчинника. Симбатне збільшення реакційної здатності карбонових кислот і стеричного фактора у реакційній системі «карбонова кислота – 2-(хлорметил)оксиран – галогенід тетраалкіламонію» дозволяє ідентифікувати механізм каталізу, як механізм перенесення аніона нуклеофільного реагента іонною парою.

### Реферат англійською:

Acidolysis of 2-(chloromethyl)oxirane (epichlorohydrin) by acetic and benzoic acids in the presence of tetraalkylammonium halides in binary solvent epichlorohydrin:tetrahydrofuran (1:1 by volume) is investigated by the methods of chemical kinetics, computer modeling and NMR spectroscopy. It is found that this is a zero-order reaction with respect to the acid and a first-order one with respect to the catalyst. The products of the reaction are chlorohydrin esters with «normal» (n-P) and «abnormal» (a-P) structures. It is determined that the reaction rate depends on both the nature and structure of the acid reagent and catalyst and the polarity of the solvent. Benzoic acid is found to exhibit a higher reactivity than acetic acid. The catalytic activity of tetraalkylammonium halides increases with increasing ion radius and nucleophilicity of the salt anion. Reduction of the polarity of the solvent (epichlorohydrin and binary mixture of epichlorohydrin:tetrahydrofuran) contributes to the increase of the reaction rate and its regioselectivity (the formation of the «normal» product n-P). The regioselectivity of the reaction is almost independent of the nature of the acid and increases with an increase in the steric factor. A preferential formation of the ester n-P corresponds to the essential contribution of the SN2 mechanism to the nucleophilic opening of oxirane ring. A symbatic increase in the reactivity of carboxylic acids and the steric factor in the reaction system «carboxylic acid – 2-(chloromethyl)oxirane – tetraalkylammonium halide» allows to identifying the mechanism of the catalytic reaction, which corresponds to the mechanism of anion transfer of a nucleophilic reagent by anion pair.

**Індекс УДК:** 547, 547:544.424, 547:544.42/.43

**Коди тематичних рубрик:** 31.21, 31.21.17, 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:** Розділи лекцій дисциплін «Методи наукових досліджень в хімії» для здобувачів вищої освіти денної форми ступеня освіти «Доктор філософії» факультету хімії, біології і біотехнологій.

**Назва НТП англійською:** The parts of lecture course "Methods of scientific research in chemistry" for applicants for higher education full-time degree "Doctor of Philosophy " of 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:** Досліджено кінетичні та термодинамічні аспекти розкриття оксиранового циклу в присутності основ молекулярної будови при варіюванні полярності розчинника, методики спектральних кінетичних досліджень, встановлення будови продукту за даними 1Н ЯМР і хромато-мас спектроскопії.

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

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 01.2020

**Закінчення етапу:** 12.2020

**Споживачі продукції:** Заклади вищої освіти, Наукові установи

**Перспективні ринки:** Ринок освітніх послуг

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:** 50

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Спільні права на НТП

**Наявність бізнес-плану:** Ні

**Техніко-економічне обгрунтування:** Ні

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:** 70

**Очікуваний термін окупності (років):** 5

**Додаткова інформація:**

**Назва НТП українською:** Розділи лекцій дисциплін «Кінетика неорганічних реакцій. Дослідження складних реакцій в органічній хімії» для здобувачів вищої освіти денної форми з нормативним терміном навчання ІІ курсу ступеня освіти «Магістр» факультету хімії, біології і біотехнологій.

**Назва НТП англійською:** The parts of lecture course "Kinetics of inorganic reactions. Research of complex

reactions in organic chemistry" for applicants for higher education full-time with a standard term of study of the second year of the degree" Master" of 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:** Досліджено кінетичні та термодинамічні аспекти розкриття оксиранового циклу в присутності основ йонної будови при варіюванні полярності розчинника, методики кінетичних досліджень, встановлення регіоселективності реакції при варіюванні полярності розчинника

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

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 01.2020

**Закінчення етапу:** 12.2020

**Споживачі продукції:** Заклади вищої освіти, Наукові установи

**Перспективні ринки:** Ринок освітніх послуг

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:** 50

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Спільні права на НТП

**Наявність бізнес-плану:** Ні

**Техніко-економічне обгрунтування:** Ні

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:** 70

**Очікуваний термін окупності (років):** 5

**Додаткова інформація:**

## IX. Бібліографічний опис

Ютілова К.С., Бахалова Є.А., Швед О.М., Марценюк Н.С., Марчук Л.С. Структурні ефекти та вплив полярності розчинника на каталітичний ацидоліз 2-(хлорметил)оксирану. Voprosy khimii i khimicheskoi technologii. 2020. No. 2. P. 148–154. http://dx.doi.org/10.32434/0321-4095-2020-129-2-148-154

Bakhtin S., Shved E., Bespal'ko Yu., Tyurina T., |Palchykov V. Detailing the elementary stages in the oxirane ring opening reactions with carboxylic acids catalyzed by tertiary amines. J. Phys. Org. Chem. 2020. Vol. 30, No 9. P. e4071. DOI: 10.1002/poc.4071 https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/poc.4071

Shpan'ko Igor, Sadovaya Irina. Non-additive Effects of Structural Factors in Pyridine Catalyzed Reactions of Phenyloxirane with N-aroylbenzenesulfonamides. Croatica Chemica Acta. 2020. Vol. 93. No. 1. P. CCA3658. https://doi.org/10.5562/cca3658

Bespalko Yuliia, Sinel'nikova Marina, Shved Elena, Bakhalova Evgeniia Experimental and computational studies of the mechanism of base-catalyzed ring-opening of 2-(chloromethyl)oxirane by benzoic acid. Int J Chem Kinet., 2020, P. 1-13. https://doi.org/10.1002/kin.21448

Bakhalova E., Hembaruk V., Kazakov O., Shved E. The influence of the solvent polarity on the catalytic activity of tetrabutylamony chloride in the system "benzoic acid – chloromethylorine". Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 70.

Бахалова Є. А., Волос О. Я., Міщенко А. О., Ситник Н. С., Швед О. М., Діденко Н. О. Вплив природи каталізатору на співвідношення продуктів розкриття циклу епіхлоргідрину бензойною кислотою. Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 75.

Корж О. Б., Ютілова К. С., Швед О. М. Спектрофотометричне дослідження поведінки третинних амінів у реакціях ацидолізу 2-(хлорметил)оксирану. Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 82.

Кравчук А. В., Ютілова К. С., Швед О. М. Вплив розчинника на реакцію ацидолізу епіхлоргідрину пропановою кислотою в присутності тетра-н-бутиламоній йодиду. Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 84.

Макоцька О. Ю., Гнатюк Г. В., Ютілова К. С., Швед О. М. Вплив структури тетраалкіламонієвих солей на швидкість ацетолізу епіхлоргідрину у бінарних розчинниках. Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 89.

Марценюк Н. С., Ютілова К. С., Швед О. М. Кінетичні закономірності та регіоселективність ацетолізу епіхлоргідрину в присутності тетраетиламоній броміду у бінарних розчинниках. Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 90.

Марчук Л. С., Дідух О. М., Бахалова Є. А., Кулібаба І. І., Швед О. М. Солі тетраалкіламонія як каталізатори нуклеофільного розкриття оксирану бензойною кислотою: вплив природи йонів. Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 91.

Тарасенко В. В., Ютілова К. С., Швед О. М. Ефект структури третинного аміну у реакції ацетолізу епіхлоргідрину у бінарному розчиннику. Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 95.

Кальна К. В., Ситник Н. С., Бахалова Є. А., Швед О. М. Розробка анімаційних моделей для підвищення якості освоєння дисципліни «основи стереохімії» на платформі дистанційного навчання MOODLE. Хімічні проблеми сьогодення: тези доп. III міжнар. (XIII укр.) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених (м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р.). Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса. 2020. С. 148.

Гнатюк Г.В., Макоцька О.Ю., Ютілова К.С., Швед О.М. Солі тетралкіламонію як каталізатори реакції ацетолізу 2- хлорометилоксирану у бінарних розчинниках. Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи: тези

доп. IV Всеукр. наук. конф. (м.Житомир, 29 квітня 2020 р.). Житомир: Видавець О.О.Євенок, 2020. С.191.

Марценюк Н.С., Ютілова К.С., Крисько Л.В., Швед О.М. Вплив полярності розчинника на кінетику і регіоселективність ацетолізу епіхлоргідрину в присутності тетраетиламоній броміду. Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи: тези доп. IV Всеукр. наук. конф. (м.Житомир, 29 квітня 2020 р.). Житомир: Видавець О.О.Євенок, 2020. С.205.

Бахалова Є.А., Крисько Л.В., Вакулюк Ю.А., Швед О.М. Вплив полярності розчинника на каталітичну активність n,n-диметиланіліну і галогенидів тетраетиламонію у реакції хлорметилоксирану з бензойною кислотою. Проблеми та досягнення сучасної хімії: збірник тез доп. XXI Наук. молодіжної конф. (Одеса, 7-8 травня 2020 р.) / ред. Семенішин М. М. – Одеса, Бондаренко М. О., 2020. С.10.

Elena Shved, Yuliia Bespalko, Oksana Gorban, Kseniia Yutilova, Evgeniia Bakhalov. The Influence of Nanosized Zirconium (IV) Oxide on the Catalytic Curing of Epoxy Resin ED-20 with Isomethyltetrahydrophthalic Anhydride. IEEE International Conference on “Nanomaterials: Applications & Properties” (NAP-2020). Sumy, Ukraine, 9-13 Nov. 2020

## X. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи** Хаджинов Ілля Васильович
д. е. н., 08.00.02

**Перелік осіб-виконавців**

Бахалова Євгенія Анатоліївна

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

Ситник Наталія Сергіївна

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

Ютілова Ксенія Сергіївна

**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**

