

Інформація до проекту

Секція: нові технології виробництва матеріалів, їх оброблення, з'єднання, контролю якості; матеріалознавство; наноматеріали та нанотехнології

Назва проекту

“Розробка теоретичних і практичних основ для створення технології одержання алкілциклогексенкарбонових сполук з різноманітними експлуатаційними можливостями”

(не більше 15-ти слів)

Тип роботи: науково-технічна (експериментальна) розробка

Організація виконавець: Національний університет «Львівська політехніка»

АВТОРИ ПРОЕКТУ

Керівник проекту Костів Ірина Світозарівна, к.т.н., доцент кафедри хімічної інженерії Національного університету «Львівська політехніка»

Проект розглянуто й ходжено рішенням наукової (вченої, науково-технічної) ради Національного університету «Львівська політехніка» від « 05 » вересня 2019р., протокол № 9/1

Інші автори проекту:

Добровецька Оксана Ярославівна

Гнатів Зоряна Ярославівна

Нагурський Андрій Олегович

Пропоновані терміни виконання проекту (до 36 місяців):
з 01.01.2020 по 31.12.2022

Орієнтовний обсяг фінансування проекту: 1935000.00 грн
Капітальні видатки : 0.00 грн

1. АНОТАЦІЯ

У проекті передбачається розроблення нової технології на основі результатів експериментального дослідження селективних процесів синтезу алкілциклогексенкарбонових сполук з широким спектром застосування. Для досягнення поставленої мети необхідно буде вирішити такі основні задачі: запропонувати новий спосіб одержання алкілциклогексенкарбонових сполук методом каталітичного циклоприєднання ДМБ і алкілкарбонових сполук; експериментально дослідити кінетичні закономірності та встановити механізм каталітичних реакцій [4+2]-циклоприєднання ДМБ і алкілкарбонових сполук; на основі одержаних кінетичних закономірностей вивчених реакцій запропонувати оптимальні умови промислового синтезу алкілциклогексенкарбонових сполук; здійснити синтез лабораторних взірців у лабораторних умовах; дослідити властивості синтезованих

речовин та запропонувати найбільш раціональні шляхи їх практичного використання; для практичної реалізації енергоефективної технології одержання цільового продукту в промислових умовах розробити принципову технологічну блок-схему виробництва з розрахунком, вибором та оптимізацією основних технологічних процесів та відповідного технологічного обладнання методами комп'ютерного моделювання.

2. ПРОБЛЕМАТИКА ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ЇЇ АКТУАЛЬНІСТЬ

Розробка та вдосконалення технологічних процесів одержання нових продуктів органічного синтезу є однією з найактуальніших проблем хімічної промисловості. Незважаючи на широке застосування вже існуючих органічних сполук, пошук нових речовин постійно продовжується, оскільки зростаючі виробничі і споживчі потреби вимагають наявності матеріалів з новими фізичними та хімічними властивостями. Окрему нішу в технології органічного синтезу займають сполуки, які володіють у порівнянні з іншими унікально широким спектром властивостей, що суттєво збільшує області їх застосування і є надзвичайно економічно привабливим з точки зору організації їх виробництва у промислових умовах.

Алкілциклогексенкарбонові сполуки, як продукти органічного синтезу, відносяться до недостатньо вивченого класу речовин. Літературні відомості про методи синтезу, хімічні властивості, області застосування та технологію виробництва такого класу сполук практично відсутні і відносяться в основному до їх насичених аналогів. Поряд з цим вони є сировиною для одержання харчових ароматизаторів, парфумерних композицій, пластифікаторів, комономерів, активаторів росту рослин, лікарських препаратів та гідроароматичних вуглеводнів. Їх все частіше використовують, як сировину для одержання нових полімерних матеріалів і як основу для синтезу поліфункціональних мономерів різної будови з наперед заданим комплексом фізико-хімічних характеристик. Вони є структурними фрагментами вітамінів, гормонів та алкалоїдів.

Організація технологічного циклу для виробництва алкілциклогексенкарбонових сполук неможлива без проведення наукових досліджень, присвячених вивченню кінетичних закономірностей та механізму процесів їх одержання, встановленню оптимальних технологічних умов їх синтезу та розробки відповідного технологічного обладнання.

3 Мета і завдання, на вирішення яких спрямовано проект: Метою проекту є розробка теоретичних і практичних основ синтезу алкілциклогексенкарбонових сполук для створення енергоефективної технології виробництва цільового продукту.

Для досягнення цієї мети необхідно вирішити такі основні задачі:

- 1) запропонувати новий спосіб одержання алкілциклогексенкарбонових сполук шляхом каталітичного циклоприєднання ДМБ і алкілкарбонових сполук;
- 2) дослідити кінетичні закономірності та встановити механізм реакцій [4+2]-циклоприєднання ДМБ і алкілкарбонових сполук;
- 3) на основі одержаних кінетичних закономірностей вивчених реакцій створити кінетичну модель процесу для визначення оптимальних умов перебігу процесів синтезу алкілциклогексенкарбонових сполук;
- 4) здійснити випуск лабораторних взірців; дослідити властивості синтезованих речовин та визначити шляхи їх практичного використання.
- 5) здійснити випуск дослідних взірців.
- 6) на основі теоретичних і експериментальних досліджень розробити принципову технологічну блок-схему одержання алкілциклогексенкарбонових сполук,
- 7) Запропонувати ефективну конструкцію апарату-реактора для здійснення основної технологічної операції.
- 8) Методами комп'ютерного моделювання дослідити гідродинаміку запропонованого апарату, теплові та реакційні режими роботи, та оцінити ефективність запропонованої конструкції з врахування кінетичних особливостей відповідних хімічних процесів.
- 9) Визначити оптимальні режими проведення технологічного процесу та розробити методику інженерного розрахунку створеного апарату для промислового використання.

4. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ ВИКОНАННЯ ПРОЕКТУ ТА ЇХ НАУКОВА НОВИЗНА

За результатами проведених досліджень буде здійснено синтез гомологічного ряду нових речовин – алкілциклогексенкарбонових сполук та досліджено кінетичні закономірності каталітичних процесів їх одержання. На основі одержаних результатів кінетичних даних будуть встановлені оптимальні умови проведення процесів одержання алкілциклогексенкарбонових сполук. В межах проекту буде встановлений механізм каталітичного [4+2]-циклоприєднання 2,3-диметилбутадієну і алкілкарбонових сполук та запропоновано принципову технологічну блок-схему процесів одержання алкілциклогексенкарбонових сполук, а також розглянуті можливі шляхи їх практичної та промислової реалізації. Новизна одержаних результатів полягає в тому, що вперше буде розглянута кінетика [4+2]-циклоприєднання 2,3-диметилбутадієну і алкілкарбонових сполук за рівнянням Міхаеліса-Ментен, яка дозволить підтвердити або спростувати двостадійний механізм реакцій і утворення проміжного молекулярного комплексу, а також визначити лімітуючу стадію процесу. Вперше буде досліджена можливість каталітичного [4+2]-циклоприєднання 2,3-диметилбутадієну і алкілкарбонових сполук за участю нанокаталізаторів та розглянутий механізм каталітичної реакції з утворенням каталітичного комплексу, який дозволить активувати реакцію і зменшити її енергетичний бар'єр.

5. ПРАКТИЧНА ЦІННІСТЬ РЕЗУЛЬТАТІВ

Широкий асортимент таких реакційно-здатних функціональних алкілциклогексенкарбонових сполук є базою для одержання різноманітних матеріалів широкого спектру застосування, добавок та композицій, що виробляються в харчовому, косметичному, парфумерному та медичному виробництві, а також незамінні в будівництві. Відповідно в розробленій технології будуть зацікавлені хімічні заводи, будівельні підприємства, медичні підприємства, що займаються виготовленням медичних імплантів, парфумерно-косметологічні фабрики, та підприємства, які займаються виготовленням різноманітних полімерних матеріалів. Розробка даної технології одержання алкілциклогексенкарбонових сполук дозволить привернути увагу потенційних вітчизняних та світових виробників науково-технічної продукції, а саме, - будівельних матеріалів, медичних імплантів, парфумерно-косметологічних засобів, харчових добавок та нових полімерних матеріалів та поліфункціональних мономерів різної будови з наперед заданим комплексом фізико-хімічних характеристик. А в поєднанні з результатами каталітичного одержання алкілциклогексенкарбонових сполук, ще й дозволить суттєво здешевити кінцеві цільові продукти, і зробить їх доступнішими широкому колу побутових споживачів.

Керівник проекту

Костів І.С.

Проректор з
наукової роботи

Чухрай Н.І.

