

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U000365

Державний реєстраційний номер: 0124U003838

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Створення наукових та технологічних основ для розробки проточних реакторів з метою безпечного використання агресивних нестійких реагентів в масштабованому органічному синтезі на прикладі адаптації застосування металоорганічних сполук.

Початок етапу: 08.2024

Закінчення етапу: 11.2024

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут органічної хімії
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 5, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445527150, 380445510613, 380445732643

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

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): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1994.956

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Проточні технології в хімії як передовий підхід для масштабування небезпечних процесів.

Назва роботи англійською:

Flow chemistry as an advanced approach for scale up of hazardous processes

Реферат українською:

Широке використання метал-органічних реагентів в промисловості обмежується їх чутливістю до кисню повітря та вологи та небезпекою загоряння реагенту та/чи розчинника. Проведення синтезу таких сполук в проточному режимі дозволяє генерувати і оперувати лише з невеликою кількістю розчину таких реагентів, і, отже, уникати небезпечних інцидентів при роботі з ними. За звітний період на основі вітчизняного обладнання сконструйовано та зібрано проточну установку для синтезу та подальших перетворень літійорганічних сполук. Здійснена оптимізація умов літіювання ароматичних та гетероароматичних субстратів. На основі отриманих літійорганічних напівпродуктів проведені реакції формілювання, карбоксилювання, синтез боро- та оловоорганічних сполук. Зокрема, як результат, отримано бібліотеку гетероциклічних похідних боронових кислот. Створено та запущено проточний реактор для синтезу цинкорганічних сполук. Досліджено вплив температури, природи розчинника та присутності неорганічних солей на стабільність розчинів цинкорганічних продуктів. Використовуючи методи хемоінформатики, відібрано близько 100 перспективних об'єктів для напівпромислового металювання з використанням розроблених проточних технологій. В продовження розробки процесів мультиграмових синтезів на основі небезпечного реагенту діазометану розроблено прості підходи до препаративного синтезу заміщених циклопропанів – цінних напівпродуктів для фармацевтичної хімії та агрохімії. Їх синтезували взаємодією діазометану з метилакрилатами та фотоіндукованим видаленням азоту із утворених $\Delta 1$ -піразолінів у проточному фотореакторі. Розроблено протокол для масштабованого діастереоселективного синтезу циклопропанолів шляхом окисного гідролізу пінаколатів циклопропілбору. Протокол для Pd-каталізованого циклопропанування вінілборонових пінаколатів був адаптований для проточного режиму, який забезпечує безпечні умови роботи та високі виходи цільових продуктів.

Реферат англійською:

The widespread use of organometallic reagents in industry is limited by their sensitivity to atmospheric oxygen and moisture and the risk of ignition of the reagent and/or solvent. Synthesis of such compounds in a flow-through mode allows generating and operating with only a small amount of solution of such reagents, and, therefore, avoiding dangerous incidents when working with them. During the reporting period, a flow-through unit for the synthesis and further transformations of organometallic compounds was designed and assembled based on domestic equipment. The conditions for lithiation of aromatic and heteroaromatic substrates were optimized. Formylation, carboxylation, and synthesis of organometallic and tin compounds were carried out on the basis of the obtained organolithium semiproducts. In particular, as a result, a library of heterocyclic substituted boronic acids was prepared. A flow reactor for the synthesis of organozinc compounds was created and launched. The effect of temperature, solvent nature, and the presence of inorganic salts on the stability of solutions of organozinc products was investigated. Using chemoinformatics methods, about 100 promising objects for semi-industrial metallation using the developed flow technologies were selected. In continuation of the development of multigram synthesis processes based on the hazardous reagent diazomethane, simple approaches to the preparative synthesis of substituted cyclopropanes, valuable intermediates for pharmaceutical chemistry and agrochemistry, were developed. They were synthesized by the interaction of diazomethane with methyl acrylates and photoinduced nitrogen removal from the formed $\Delta 1$ -pyrazolines in a flow photoreactor. A protocol was developed for the scalable diastereoselective synthesis of cyclopropanols by oxidative hydrolysis of

cyclopropylboron pinacولات. The protocol for Pd-catalyzed cyclopropanation of vinylboron pinacولات was adapted for the flow regime, which provides safe ope

Індекс УДК: 547, 547:544.424 , 520

Коди тематичних рубрик: 31.21, 31.21.17, 43.01.06

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Волочнюк Дмитро Михайлович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Напівпромислові протоколи для безпечного та економічно вигідного генерування (гетеро)ароматичних похідних літію, магнію, цинку та аліфатичних похідних цинку з їх подільшою електрофільною функціоналізацією.

Назва НТП англійською: The intermediate protocols for the safe and cost-effective production of (hetero)aromatic lithium, magnesium, zinc and aliphatic zinc polymers with their enhanced electronic function.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, Методичні документи

Галузь застосування: органічний синтез, фізична органічна хімія, сучасні фізико-хімічні методи дослідження, хімічна інженерія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі аналізу поведінки різних типів субстратів, а також експериментальних та теоретичних досліджень у проєкті будуть створені критерії для визначення меж застосування і можливостей розроблених проточних процедур та прогнозування реакційної поведінки при масштабуванні.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

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:

IX. Бібліографічний опис

S. Shuvakin ,O. Serhieiev ,M. Dashko ,V. Pendiukh, S. Ivonin ,S. Shyshkina ,A. Rozhenko ,O. Pashenko, S. Ryabukhin,D. Volochnyuk Substituted Cyclopropanols via Sequential Cyclopropanation and Oxidative Hydrolysis of Vinylboronates / <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/6733fc707be152b1d0e2ce11>

S. Shuvakin ,S. Ivonin ,V. Pendyukh ,O. Pashenko ,S. Shishkina ,A. Kozytskiy ,A. Rozhenko, U. Manthe ,T. Spengler , D. Volochnyuk, S. Ryabukhin Preparative [3+2] cycloaddition of CH₂N₂ to acrylate derivatives: revising, scope and synthetic applications / <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/67566f6bf9980725cf798590>

Х. Заклучні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Михайло Володимирович
д.х.н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Андрушко Олесандр Петрович
Борисов Олександр Володимирович
(к. х. н., 02.00.03)
Демчук Олександр Петрович
(д.філософ)
Дмитрів Юрій Володимирович
(к. х. н., 02.00.08)
Друженко Тетяна Валеріївна
Пендюх В'ячеслав Володимирович
Шам Вадим Андрійович
Яковлева Ганна В'ячеславівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Горлова Аліна

Телефон

+38 (096) 501-50-18

Реєстратор

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

