

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U000810

Державний реєстраційний номер: 0123U103020

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-01-2024

## II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

**Назва етапу:** Вивчити реакцію [2+2] циклоприєднання алкенів з кетенами (що генеруються класичними непроточними підходами) методами експериментальної кінетики та квантово-хімічними розрахунками (DFT). Обрати пари «партнерів» реакції [2+2] циклоприєднання для подальших досліджень. Розробити протоколи моніторингу реакцій та контролю якості кінцевих продуктів для проточних процесів вивчених у даному проекті. Приготувати та надіслати до редакцій рукописи публікацій та заявок на патенти. Підготувати фінальний звіт та публікації результатів.

**Початок етапу:** 05.2023

**Закінчення етапу:** 11.2023

**Вид звітнього документа:** Остаточний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи:** Київський національний університет імені Тараса Шевченка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, 60, м. Київ, 01033, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380442393333, 380442393230

## IV. Відомості про співвиконавців ДіР

## V. Відомості про замовника ДіР

**Повне найменування юридичної 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

## VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

**Підстава для проведення ДіР:** 52 - договір з вітчизняною організацією (органами місцевої ради, фондом, асоціацією, концерном тощо)

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

**7722 - кошти підприємств, установ, організацій України**

<b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 362.649
--

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Вивчення реакції [2+2] циклоприєднання алкенів з кетенами, розробка протоколів її моніторингу та контролю якості кінцевих продуктів.

### Назва роботи англійською:

Study of the reaction [2+2] cycloaddition of alkenes with ketenes, development of protocols for its monitoring and quality control of final products.

### Реферат українською:

Мета роботи – Використовуючи модельні реакції розробити методології використання стабільних діазокетонів в реакціях циклоконденсації, що можуть бути придатними для використання в протокових технологіях. Методи дослідження – органічний синтез, препаративна хроматографія, фізичні методи дослідження, квантовомеханічні розрахунки, DFT. Об'єкт дослідження: стабільні діазокетони, реакції [2+2]- та [3+2]- циклоконденсації, функціоналізовані тіазоли, піразоліни. В процесі дослідження показано, що проточний синтез кетенів не має препаративних перспектив для впровадження в протокову технологію, тому в якості подальших модельних були обрані процедури на основі стабільних діазокетонів, що утворюються внаслідок протокового та безпечного використання діазометану. За допомогою методу DFT та квантовомеханічних розрахунків досліджено та уточнено механізм [3+2]-циклоконденсації діазокетонів з похідними акцепторних алкенів на прикладі заміщених акрилових кислот. Отримані результати дозволяють зробити висновок про можливість подальшого використання даної методології для адаптації до протокових технологій. За результатами нашої роботи та подальшого впровадження з боку замовника, за матеріалами дослідження підготовлено 2 статті. З іншого боку використовуючи в якості моделі [3+2] циклоконденсацію діазокетону з різноманітними тіоамідами було показано можливість та безпечність використання останніх у якості сурогатів галогенкетонів. Це відкриває широкі перспективи їх подальшого використання не лише в вищезазначеній реакції, а і в інших циклізаціях подібного типу. Визначені межі застосування розробленої методології. Показані перспективи масштабування та адаптації до протокових технологій. Визначена залежність напрямку реакції та ступеня конверсії кінцевих продуктів від замісників як в діазокетоні так і в тіоаміді. Запропоновані методи як керувати напрямком реакції в залежності від природи замісників в вихідних реагентах та цілей синтезу.

### Реферат англійською:

The aim – is to develop methodologies for the use of stable diazoketones in cyclocondensation reactions, which may be suitable for further adaptation to flow technologies. Methods – organic synthesis, preparative chromatography, physical research methods, quantum mechanical calculations, DFT. Objects: stable diazoketones, [2+2]- and [3+2]-cyclocondensation reactions, functionalized thiazoles, pyrazolines. In the course of the research, it was shown that the flow synthesis of ketenes has no preparative prospects for implementation into the flow technologies. Therefore, procedures based on stable diazoketones, which are formed due to the flow and safe use of diazomethane, were chosen as further model examples. Applying the DFT method and quantum mechanical calculations, the mechanism of [3+2]-cyclocondensation of diazoketones with diverse acceptor alkenes was investigated and clarified using various substituted acrylic acids as model substrates. The obtained results allow us to conclude the possibility of further use of this methodology for adaptation to flow technologies. According to the results of our work and different implementations by the customer, 2 articles were prepared based on the research materials. On the other hand, using the 3+2 cyclocondensation of diazoketone with diverse thioamides as a model, we showed the possibility and safety of using the latter as surrogates of halogen ketones. This opens broad prospects for their further use in the above-mentioned reaction and other cyclizations of a similar type. The scope for the application of the developed methodology is determined. The possibilities of scaling and adaptation to flow

technologies are shown. The relationship between the reaction pathway and level of conversion to the target product and the substituents in both reagents - diazoketone and thioamide as well was also detected.

**Індекс УДК:** 543.062

**Коди тематичних рубрик:** 31.19.15.07

**Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Рябухін Сергій Вікторович

**Науковий ступінь:** д. х. н.

**Наукове звання:** доц.

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Методології для адаптації до протокових технологій.

**Назва НТП англійською:** Methodologies for adaptation to pipeline technologies.

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Методики для проведення стандартних операційних процедур

**Галузь застосування:** 72. Наукові дослідження та розробки

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** В процесі дослідження показано, що проточний синтез кетенів не має препаративних перспектив для впровадження в протокову технологію, тому в якості подальших модельних були обрані процедури на основі стабільних діазокетонів, що утворюються внаслідок протокового та безпечного використання діазометану. За допомогою методу DFT та квантовомеханічних розрахунків досліджено та уточнено механізм [3+2]-циклоконденсації діазокетонів з похідними акцепторних алкенів на прикладі заміщених акрилових кислот. Отримані результати дозволяють зробити висновок про можливість подальшого використання даної методології для адаптації до протокових технологій. За результатами нашої роботи та подальшого впровадження з боку замовника, за матеріалами дослідження підготовлено 2 статті. З іншого боку використовуючи в якості моделі [3+2] циклоконденсацію діазокетону з різноманітними тіоамідами було показано можливість та безпечність використання останніх у якості сурогатів галогенкетонів. Це відкриває широкі перспективи їх подальшого використання не лише в вищезазначеній реакції, а і в інших циклізаціях подібного типу. Визначені межі застосування розробленої методології. Показані перспективи масштабування та адаптації до протокових технологій. Визначена залежність напрямку реакції та ступеня конверсії кінцевих продуктів від замісників як в діазокетоні так і в тіоаміді. Запропоновані методи як керувати напрямком реакції в залежності від природи замісників в вихідних реагентах та цілей синтезу.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** 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:**

## **ІХ. Бібліографічний опис**

## **Х. Заключні відомості**

**Керівник юридичної особи**

Толстанова Ганна Миколаївна  
д. б. н., 03.00.04

**Перелік осіб-виконавців**

Носик Павло Сергійович  
(к. х. н., 02.00.03)

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Катасонова В.В.

**Телефон**

+38 (044) 239-31-88

**Реєстратор**

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

