

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U000524

Державний реєстраційний номер: 0124U003838

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-01-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Демонстрація переваг та визначення недоліків такого підходу порівняно з класичними методами з використанням реакторів постійного об'єму.

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 11.2025

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.): 3987.299

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:

Завершено збірку та кваліфікацію проточного модуля UOSlab® Flow Reactor LI3 з трьома послідовними зонами (генерація LDA $\rightarrow$ літіювання $\rightarrow$ електрофільне перетворення) для роботи з літіюорганічними сполуками. На основі систематичного дослідження понад 100 комбінацій субстратів та електрофілів визначено області застосування та обмеження стратегій спрямованого орто-металювання і галоген-літієвого обміну. Реалізовано препаративні синтези гетероарилкарбонових кислот, боронових естерів і гідроксильованих похідних (виходи 57–96%) у масштабах до кілограмів із продуктивністю до 1 кг/год. Ідентифіковано критичні «заборонені зони», пов'язані з осадоутворенням, термічною нестабільністю та побічними реакціями. Створено та введено в експлуатацію спеціалізований проточний цинковий реактор Zincrius-8 для генерування RZnX із картриджів металевого цинку, інтегрований з HTE-платформою. Проведено 116-точковий HTE-скринінг реакцій Негіші, сформульовано практичні правила вибору комбінацій ArX–RZnX–каталізатор–розчинник та визначено працездатні й непридатні класи субстратів. Визначено кінетичні профілі деградації цинкорганічних реагентів у THF і DMF, встановлено три класи стабільності та розроблено протоколи зберігання, транспортування і стандартизовані методики титрування. Проведено порівняння проточних і періодичних режимів для низки модельних перетворень (сполучення Негіші, гомологація α -амінокислот, каталітичне карбонілювання), що показало кращий температурний контроль, підвищення робочих температур на 20–40 °C та скорочення часу реакцій у проточному режимі. Результати робіт з діазометаном доведено до публікацій у рецензованих журналах.

Реферат англійською:

The assembly and qualification of the UOSlab® Flow Reactor LI3 flow module with three sequential zones (LDA generation $\rightarrow$ lithiation $\rightarrow$ electrophilic conversion) for working with organolithium compounds has been completed. Based on a systematic study of more than 100 combinations of substrates and electrophiles, the areas of application and limitations of targeted ortho-metallation and halogen-lithium exchange strategies have been determined. Preparative syntheses of heteroarylcarboxylic acids, boronic esters, and hydroxylated derivatives (yields of 57–96%) were carried out on a kilogram scale with a productivity of up to 1 kg/h. Critical “forbidden zones” associated with precipitation, thermal instability, and side reactions have been identified. A specialized Zincrius-8 zinc flow reactor for generating RZnX from metal zinc cartridges, integrated with the HTE platform, has been created and put into operation. A 116-point HTE screening of Negishi reactions was performed, practical rules for selecting ArX–RZnX–catalyst–solvent combinations were formulated, and viable and unsuitable substrate classes were identified. The kinetic profiles of degradation of organozinc reagents in THF and DMF were determined, three stability classes were established, and storage and transportation protocols and standardized titration methods were developed. A comparison of continuous and batch modes was performed for a series of model transformations (Negishi coupling, homologation of α -amino acids, catalytic carbonylation), which showed better temperature control, an increase in operating temperatures by 20–40 °C, and a reduction in reaction times in continuous mode. The results of the work with diazomethane have been published in peer-reviewed journals.

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 подальшою 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: Не створено

Причини, через які НТП не було створено: Розробка НТП триває

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези, 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

Shuvakin S. I., Serhieiev O. M., Dashko M. O., Pendiukh V. V., Ivonin S. P., Shishkina S. V., Rozhenko A. B., Pashenko O. Ye., Volochnyuk D. M., Ryabukhin S. V. Substituted cyclopropanols via sequential cyclopropanation and oxidative hydrolysis of vinylboronates. *Organic & Biomolecular Chemistry*. 2025. Vol. 23. P. 6343–6348. DOI: 10.1039/d5ob00691k

Pashko M. O., Pashkov K. V., Granat D. S., Yagupolskii Yu. L., Ryabukhin S. V., Volochnyuk D. M. Methyl chlorothioformate as a convenient reagent for thionoester synthesis. *RSC Advances*. 2025. Vol. 15. P. 15116–15120. DOI: 10.1039/d5ra01538c

Pendiukh V. V., Yakovleva H. V., Stadniy I. A., Pashenko O. Ye., Volovenko O. B., Rozhenko A. B., Ryabukhin S. V., Volochnyuk D. M. Up-Scale Pseudotelescopic Photoinduced Arndt–Eistert α -Amino Acid Homologation in a Flow Reactor Cascade. *Organic Process Research & Development*. 2025. Vol. 29. P. 1476–1485. DOI: 10.1021/acs.oprd.5c00061

Ivonin S. P., Shuvakin S. I. The Theoretical and Experimental Study of Diazomethane–Styrene [3+2]-Cycloadditions. *Journal of Organic and Pharmaceutical Chemistry*. 2025. Vol. 23, No. 1. P. 49–55. DOI: 10.24959/ophcj.25.326552

Levchenko V., Andrushko A., Stefanishin V., Stambirskyi M., Otsaliuk O., Dmytriv Yu., Pashenko O. Ye., Ryabukhin S. V., Volochnyuk D. M. Practical multigram synthesis of 4- and 5-pyrazolylacetic acids. *ChemRxiv*. 2025. DOI: 10.26434/chemrxiv

Nechayev M., Ivanytsya M., Dymura S., Filippov M., Kamalova E., Tretiak D., Salamakha O., Doronina D., Kolotilov S., Ryabukhin S., Volochnyuk D. Organozinc Compounds in N,N- Dimethylformamide: Stability Towards Degradation and Reactivity in Negishi Cross-Coupling Reactions *ChemRxiv*. 2025. DOI: 10.26434/chemrxiv-2025-sgb20

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Михайло Володимирович
д.х.н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Борисов Олександр Володимирович
(к. х. н., с.д., 02.00.03)

Демчук Олександр Петрович
(д.філософ)

Дмитрів Юрій Володимирович
(к. х. н., 02.00.08)

Друженко Тетяна Валеріївна

Пендюх В'ячеслав Володимирович

Яковлева Ганна В'ячеславівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Герасимюк Ірина Петрівна

Телефон

+380976897665

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна