

Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0120U104008

Відкрита

Дата реєстрації: 25-09-2020

Статус виконавця: 17 - головний виконавець



1. Загальні відомості

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 2201300

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 10798.229

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2020	1983.930
2021	4699.100
2023	4115.200

2. Замовник

Назва організації: Національний фонд досліджень України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 42734019

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

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442981622

Телефон: 380442981622

3. Виконавець

Назва організації: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Підпорядкованість: Національна академія наук України

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

Телефон: 380445527150

Телефон: 380445510613

Телефон: 380445732643

E-mail: ioch@ioch.kiev.ua

WWW: <http://ioch.kiev.ua>

4. Співвиконавець

Назва організації: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070944

Адреса: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380442393333

Телефон: 380442393230

E-mail: office@knu.ua

WWW: <http://www.univ.kiev.ua>

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Розробка методології безпечного та масштабованого застосування нестабільних діазоалканів як реагентів для органічного синтезу з використанням проточних реакторів

Назва роботи (англ)

Development of continuous-flow approach of safe and scalable utilization of non-stabilized diazoalkanes as reagents for organic synthesis

Мета роботи (укр)

1. Розробити безпечні та ефективні напівпромислові протоколи для генерації та синтетичного застосування нестабільних діазоалканів у проточних реакторах в мультиграмових масштабах. 2. Розробити та налагодити проточну фотохімічну установку власного виробництва, придатну для дослідження та розробки проточних хімічних реакцій з використанням нестабільних та небезпечних хімічних речовин для промислових потреб. 3. Сформулювати на основі досліджень кінетики та комп'ютерного моделювання структурно орієнтоване практичне керівництво щодо визначення, меж застосування та можливостей розроблених проточних процедур та прогнозування їх реакційної поведінки під час масштабування. 4. Удосконалити сучасне розуміння механізмів реакцій за участю діазоалканів шляхом аналізу отриманих кінетичних результатів та DFT-моделювання.

Мета роботи (англ)

1. To develop safe and efficient semi-industrial protocols for generation and synthetic application of non-stabilized diazoalkanes

by a flow approach in multigram scales. 2. To design and assemble an in-house-made flow-through photochemical device suitable for investigations and developments of flow chemical approaches with unstable, hazardous chemicals for industrial needs. 3. To formulate based on kinetic and computational chemistry studies, the substrate-based guidelines for the scope and limitations and capabilities of the developed flow procedures and predicting the reaction behavior during scaling. 4. To improve the modern mechanistic understanding of the diazoalkanes reaction pathways through the analysis of the obtained kinetic results and DFT-modeling outcomes.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 48 – прикладна

Очікувані результати: Технології, Матеріали

Галузь застосування: фармацевтика, агрохімія та хімічні технології

Експерти

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	11.2020	12.2020	Проміжний звіт	Оптимізація методів генерування CH2N2 з використанням пілотної установки, початок монтажу напівпромислової установки, що включає модуль синтезу прекурсору НДА (нестабілізованих діазоалканів), модуль генерування та використання НДА, та вивчення експериментальної кінетики та теоретичне (DFT) дослідження реакції CH2N2 з активованими похідними карбонових кислот.
2	05.2021	08.2021	Проміжний звіт	Телескопічний проточний процес, що включає: синтез прекурсору CH2N2 – генерування CH2N2 – реакція з активованим похідним карбонової кислоти – фотохімічне перегрупування Вольфа.
3	09.2021	12.2021	Проміжний звіт	Вивчення реакцій генерування нестабільних діазоалканів, їх стабільності та реакційної здатності у реакціях [3+2]-циклоприєднання.
4	07.2021	09.2021	Проміжний звіт	Телескопічний проточний процес, що включає: синтез прекурсору нестабільних діазоалканів; генерування нестабільних діазоалканів; [3+2] циклоприєднання та вивчення реакцій циклопропанування алкенів нестабільними діазоалканами.
5	10.2021	12.2021	Проміжний звіт	Телескопічний проточний процес циклопропанування алкенів нестабільними діазоалканами та вивчення реакції гомологізації циклічних кетонів з CH2N2.
6	05.2023	12.2023	Остаточний звіт	Дослідження меж застосування реакції збільшення циклу на основі нестабільних діазоалканів та механістичні дослідження реакції [2+2]-циклоприєднання кетенів з алкенами. Оптимізація умов реакції для телескопічного процесу: синтез прекурсору CH2N2 – генерування CH2N2 – синтез діазокетону – перегрупування Вольфа – [2+2]-циклоприєднання. Розробка стандартних робочих протоколів вивчених проточних процесів. Фіналізація проекту, тестування розроблених протоколів в напівпромисловому масштабі.

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.17

Індекс УДК: 547:544.424, 547-304.4

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Вовк Михайло Володимирович (д.х.н., член-кор.)

Керівники роботи:

Волочнюк Дмитро Михайлович (д. х. н., професор)

Відповідальний за подання документів: Горлова Аліна Олексіївна (Тел.: +38 (096) 501-50-18)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.