Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0410U004898

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-12-2010

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Токар Андрій Володимирович
2. Tokar Andrey Vladimirovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.03

Назва наукової спеціальності: Органічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 05-11-2010

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: 49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна 72

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: 49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна 72

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21.23

Тема дисертації:

1. Квантово-хімічне дослідження реакційної здатності каркасних амінів, їх N-заміщених та епоксидних похідних

2. Quantum-chemical investigation of cage amines reactivity, their N-substituted and epoxy derivatives

Реферат/анотація:

1. Об’єкт дослідження – механізми арилфосфорилювання та арилсульфонілювання каркасних амінів, а також внутрішньомолекулярної циклізації N-заміщених амінопохідних ряду епоксинорборнану. Мета роботи – вивчення реакційної здатності каркасних амінів та встановлення кількісних характеристик і закономірностей перебігу обраних реакцій. Методи дослідження – для розрахунку геометричних параметрів сполук й перехідних станів реакцій використовували ab initio методи у наближеннях B3LYP/6-31G(d), BHandHLYP/6-31G(d) та MP2/6-31+G(d). Результати – на основі аналізу взаємодії метиламіну з дифенілхлорфосфатом встановлено перевагу "некласичної" фронтальної атаки нуклеофілу. Проведено кількісне оцінювання нуклеофільної реакційної здатності атомів Нітрогену N-заміщених похідних ендо-5-амінометил-екзо-2,3-епоксибіцикло[2.2.1]гептану в реакціях внутрішньомолекулярного розкриття епоксидного циклу. Досліджено електронну провідність молекулярних систем "епоксид-кислота" N-карбонілвмісних похідних ендо-5-

амінометил-екзо-2,3-епоксибіцикло[2.2.1]гептану з амідними та карбамоїльними фрагментами. Галузь використання – теоретична органічна хімія.

2. The objects are mechanisms of cage amines arylphosphorylation and arylsulfonylation reactions as well as intramolecular cyclization of N-substituted aminoderivatives of epoxynorbornane row. The purpose of the work is to investigate of cage amines reactivity and to establish of the quantitative characteristics and regularities for these type reactions. Methods – the geometrical parameters of compounds and transition state structures of reactions have been calculated at ab initio B3LYP/6-31G(d), BHandHLYP/6-31G(d) and MP2/6-31+G(d) levels of theory. – The results of investigation for aminolysis of diphenylchlorophosphate by methylamine have demonstrated the decisive role of “non-classic” front-side attack of nucleophile in this reaction. The nucleophilic reactivity of Nitrogen atoms in structures of N-substituted endo-5-aminomethyl-exo-2,3-epoxybicyclo[2.2.1]heptane derivatives in epoxide ring-opening reactions have been estimated. The electronic conductivity for «epoxide-acid» molecular systems of N-carbonyl derivatives of endo-5-aminomethyl-exo-2,3-epoxybicyclo[2.2.1]heptane with amido- and carbamoyl- fragments have also been investigated. Area of application – theoretical organic chemistry.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Оковитий Сергій Іванович
2. Okovytyy Sergey Ivanovich

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дорошенко Андрій Олегович

2. Дорошенко Андрій Олегович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кузьмін Віктор Євгенович

2. Кузьмін Віктор Євгенович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Орлов Валерій Дмитрович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні

Орлов Валерій Дмитрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.