Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U003027

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-05-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бондарчук Сергій Вікторович
2. Bondarchuk Sergey Viktorovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 21-04-2016

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: 18031, м. Черкаси, бульвар Шевченка,81

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: Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: 18031, м. Черкаси, бульвар Шевченка,81

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Спін-залежна реакційна здатність арильних катіонів

2. Spin-dependent reactivity of the aryl cations

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню електронної будови та параметрів реакційної здатності арильних катіонів у контексті її кількісного описання зокрема у реакціях з пі-нуклеофілами, внутрішньомолекулярної циклізації деяких орто-похідних та рекомбінації. У роботі показано, що електрофільність синглетних іонів Ar+ є значно вищою у порівнянні з триплетними катіонами. На основі порівняння індексів електрофільності реагентів та продуктів, а також ентальпій реакцій циклізації деяких орто-заміщених катіонів Ar+ у синглетному стані розкрито термохімічний зміст принципу максимальної жорсткості та мінімальної електрофільності, що визначають найбільш енергетично вигідний напрямок реакції. Особливу увагу у роботі було приділено механізму реакцій арильних катіонів з пі-нуклеофілами і знайдено, що енергія синглет-триплетного розщеплення останніх корелює із бар'єром активації. Існування даної кореляції стає зрозумілим при об'єднанні рівняння Майра-Патца та основного рівняння теорії перехідного стану. Цей факт розкриває багатоконфігураційну природу перехідного стану реакцій АЕ пі-

нуклеофілів. У роботі показано, що при взаємодії з парамагнітними каталізаторами, зокрема атомом Купруму, енергія синглет-триплетного розщеплення етилену зменшується до 0.47 еВ. Це можливо за рахунок механізму обмінного змішування в рамках моделі Дьюара-Чата-Дункансона на відстанях, що не перевищують 3 ангстреми між частинками, що взаємодіють. Особлива увага була приділена структурі, спектрам та індексам реакційної здатності дикатіонів, що утворюються при рекомбінації триплетних катіонів Ar+. Розкрито вплив аніонів на їх УФ-спектри, запропоновано шляхи подальших хімічних перетворень дикатіонів у нейтральних та слабколужних розчинах, а також знайдено ряд потенційних дескрипторів «структура-активність» канцерогенної дії бензидину.

2. The thesis is devoted to study of the electronic structure and reactivity parameters for the aryl cations in context of its quantification, especially in the reactions with pi-nucleophiles, in the intramolecular cyclization of some ortho-substituted derivatives, and the recombination reaction. It is shown in the thesis, that the electrophilicity of the singlet Ar+ ions is much higher compared to the triplet ones. Based on the comparison of the electrophilicity indexes of the reagents and products as well as the cyclization reaction enthalpies of the singlet ortho-substituted Ar+ cations, the thermochemical sense of both the ‘maximum hardness’ and ‘minimum electrophilicity’ principles, which specify the most favorable reaction path was determined. The particular attention was paid to the mechanism of the reaction of the Ar+ cations with pi-nucleophiles. It has been found that the singlet-triplet splitting of the Ar+ cations correlates with the activation barrier height. The existence of such correlation is clear when combine the Mayr-Patz equation and the transition state theory equation. This fact reveals a multi-configuration nature of the transition state of the AE ractions with pi-nucleophiles. It has been shown in the thesis, that the ethylene interaction with a paramagnetic catalyst, in particular with the copper atom, leads to a decrease in the singlet-triplet splitting energy down to 0.47 eV. It becomes possible due to the exchange mixing mechanism in terms of the Dewar-Chatt-Duncanson model at the distances between the interacting species being not higher than 3 angstrom. Special attention has been paid to the structure, spectra and reactivity parameters of the dications formed upon recombination of the triplet Ar+ cations. The influence of the anions on the UV-spectra of the dications as well as the degradation paths of the dications in neutral and weak alkaline media has been determined. Also, a number of potential «structure-activity» descriptors of carcinogenic activity of benzidine have been found.

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. Мінаєв Борис Пилипович

2. Minaev Boris Filippovich

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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. Баб'юк Дмитро Петрович
2. Баб'юк Дмитро Петрович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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. Фокін Андрій Артурович
2. Фокін Андрій Артурович

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 Дорошенко Андрій Олегович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Дорошенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.