Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U000401

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-02-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ляпунов Олександр Юрійович
2. Lyapunov Alexander Yurievitch

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: 20-01-2006

Спеціальність за освітою: 7.070.301

Місце роботи здобувача: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 41.219.02

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21.15

Тема дисертації:

1. Флуоренонокраунофани і катенани на їх основі: синтез, структура і властивості

2. Fluorenonocrownophanes and catenanes on their base: synthesis, structure and properties

Реферат/анотація:

1. Об’єкт дослідження: Краунофани і катенани, що містять фрагмент 2,7-діоксифлуоренону. Мета дослідження: Розробка методів синтезу нового класу краунофанів – флуоренонокраунофанів та [2]катенанів на їх основі; вивчення структури й властивостей отриманих сполук. Методи дослідження та апаратура: Органічний синтез, спектроскопія ЯМР, УФ, ІЧ, мас-спектрометрія, рентгеноструктурний аналіз, методи комп’ютерного молекулярного моделювання. Теоретичні результати та їх новизна: Уперше синтезовані краунофани, що включають фрагмент 2,7-діоксифлуоренону, як елемент макроциклічного каркасу. На підставі даних ЯМР 1Н спектроскопії й молекулярного моделювання встановлено, що в розчинах флуоренонокраунофани переважно знаходяться у конформаціях із закритою внутрішньомолекулярною порожниною, які стабілізовані внутрішньомолекулярними взаємодіями ароматичних фрагментів молекули. Комплексом спектральних методів, таких як мас-спектрометрія, ЯМР та УФ спектроскопія, вивчено взаємодію флуоренонокраунофанів з паракватом. Виявлено лінійну кореляцію між величиною вільної енергії комплексоутворення та положенням смуги поглинання, викликаної переносом заряду у комплексах.

Встановлено, що флуоренонокраунофани перспективні як молекулярні матриці для синтезу катенанів. На прикладі флуоренонокраунофану, у якому фрагменти флуоренону й нафталену зв'язані залишками триетиленгліколю, вперше показана можливість існування катенану у вигляді одного "замороженого" трансляційного ізомеру при кімнатній температурі. Практичні результати і новизна: Розроблено зручні методи синтезу нового класу краунофанів – флуоренонокраунофанів, які є перспективними лігандами для електронодефіцитних молекул типу параквату. Знайдені залежності величин індукованих хімічних зсувів сигналів протонів субстрату та краунофану в ЯМР 1Н спектрах їхніх сумішей, а також положень максимумів смуг поглинання КПЗ від стійкості комплексів, що утворюються, дозволяють легко оцінювати стійкість комплексів краунофанів з тим або іншим субстратом, не вдаючись до трудомістких експериментів з визначення констант. Показано, що незалежно від природи другого ароматичного фрагменту найбільш стійкі комплекси з паракватом утворюють флуоренонокраунофани, що включають фрагменти тетраетиленгліколю. Розроблено методи синтезу і вперше отримано ряд [2]катенанів, циклічними компонентами яких виступають флуоренонокраунофани та циклобіс(паракват-п-фенілен). Предмет та ступінь впровадження: Публікації, доповіді на наукових конференціях, використання результатів роботи у науково-педагогічній практиці ВУЗів та НДІ України. Ефективність впровадження полягає в розробці методів синтезу нового типу краунофанів – флуоренонокраунофанів та [2]катенанів на їх основі. Сфера використання: Хімія.

2. Object of investigation: Crownophanes and catenanes containing fragment of 2,7-dioxyfluorenone. Aim of investigation: Elaboration of method of synthesis of a new class of the crownophanes – fluorenonocrownophanes and catenanes on their base; studying of structure and properties of obtained compounds. Methods of investigation and equipment: organic synthesis, IR, UV, NMR spectroscopy, mass spectrometry, X-ray crystal structure analysis, methods of computer aided molecular modeling. Theoretical results and their novelty: Crownophanes including 2,7-dioxyfluorenone fragment as macrocyclic element have been synthesized for the first time. In solution, according to NMR 1H spectroscopy and molecular modeling data, fluorenonocrownophanes mainly possess conformations with the closed intramolecular cavity which are stabilized by intramolecular interactions of aromatic fragments of a molecule. A variety of spectral methods including mass spectrometry, UV and NMR spectroscopy used to study of interactions betweenthe crownophanes and paraquat. A linear correlation was found between a free energy of complexation and position of the charge-transfer band associated with the complex formation. It was found that fluorenonocrownophanes are perspective molecular matrixes for catenanes synthesis. On an example fluorenonocrownophane containing fluorenone and naphthalene fragments connected triethylene glycol units, an opportunity of existence of the catenane in the one "frozen" translation isomer at ambient temperature for the first time has been shown. Practical results and their novelty: The methods of synthesis of a new class of the crownophanes – fluorenonocrownophanes which are perspective ligands for electron deficient substrates like paraquat have been elaborated. The dependences which were found between induced chemical shifts of protons of paraquat and crownophanes in NMR 1H spectra their mixtures and between charge-transfer band position and stability constants of corresponding complexes let us easy to evaluate complexes stability with different substrates without routine measurements. It is shown, that the most stable complexes with paraquat are formed by crownophanes containing tetraethylene glycol units and not dependent of second aromatic fragment. The methods of synthesis have been elaborated and for the first time synthesized [2]catenanes which cyclic components are fluorenonocrownophanes and cyclobis(paraquat-p-phenylene). Subject and the degree of introduction: Publications, reports at the scientific conferences, using the results of work in the scientific and pedagogical practice of establishments of higher education and Scientific Research Institutes of Ukraine. Efficiency of introduction is provided by elaboration of methods of synthesis of a new class of the crownophanes – fluorenonocrownophanes and [2]catenanes on their base. Sphere of use: 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. Лук'яненко Микола Григорович
2. Lukyanenko Nikolay Grigorievitch

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. Ганін Едуард Вікторович
2. Ганін Едуард Вікторович

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 Андронаті Сергій Андрійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Андронаті Сергій Андрійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.