Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0414U003788

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-07-2014

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Міхеєнко Вікторія Михайлівна
2. Mikheenko Viktoriya Mihaylivna

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: 27-06-2014

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Донбаська державна машинобудівна академія

Код за ЄДРПОУ: 02070789

Місцезнаходження: 84313, Краматорськ, вул. Академічна (Шкадінова), 72

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 08.078.03

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження: просп. Гагаріна, 8, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49005, 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: Донбаська державна машинобудівна академія

Код за ЄДРПОУ: 02070789

Місцезнаходження: 84313, Краматорськ, вул. Академічна (Шкадінова), 72

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Синтез, будова та реакційна здатність N-арил(фенокси, бензіліден)ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів

2. Synthesis, structure and reactivity of N-aryl(phenoxy, benzylidene)acetyl-1,4-benzoquinonmonoimines

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено виявленню особливостей Z,E-ізомеризації, просторової будови, реакційної здатності N-арил(фенокси, бензіліден)ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів по відношенню до нуклеофільних реагентів та встановленню механізмів цих реакцій. Синтезовані нові N-арил(фенокси, бензіліден)ацетил-1,4-бензохінонмоноіміни, розроблені оптимальні методики їх синтезу. Знайдено, що введення акцепторного замісника PhOCH2 до групи C=O 1,4-бензохінонмоноімінів призводить до зниження їх енергії НВМО, що сприяє переважному перебігу реакції з арилсульфінатами натрію за аніон-радикальним механіз-мом і домінуванню орбітального контролю при роданування. Наявність більш донорного замісника PhCH=CH біля групи C=O 1,4-бензохінонмоноімінів веде до збільшення їх енергії НВМО, що знижує вклад аніон-радикального механізму у реакціях з арилсульфінатами натрію, а при роданування призводить до зростання ролі зарядового контролю. Виявлено, що введення алкільних замісників в орто-положення до зв'язків C=N

або C=O хіноїдного ядра N-арил(фенокси, бензіліден)ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів веде до значного зниження енергії МОпі*-розпушуючої орбіталі даного зв'язку, що збільшує її активність в реакціях приєднання нуклеофілів. Встановлено, що реакція N-арил(фенокси, бензіліден)ацетил-1,4-бензо-хінонмоноімінів з хлороводнем перебігає через початкове протонування атому Нітрогену з наступним приєднанням хлорид-аніону та ароматизацією циклу. Утворення продуктів 1,2-пре́днання спиртів до 3,5-диметил-N-арил(фенокси, бензіліден)ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів обумовлене термодинамічною стійкістю хінолідних структур за рахунок стабілізуючої взаємодії nO3 з сігма*(C4-N). Напрямок транс-приєднання молекули галогену до зв'язку C=C хіноїдного ядра 4-бензіліденацетилоксиіміно-2,5-циклогексадієн-1-онів залежить в основному від положення та об'єму замісників у хіноїдному ядрі.

2. In this thesis Z,E-isomerization, structural features, reaction ability of N-aryl(phenoxy, benzylidene)acetyl-1,4-benzoquinonmonoimines in relation to nucleophile reagents and mechanisms of these reactions have been studied. The new N-aryl(phenoxy, benzylidene)acetyl-1,4-benzoquinonmonoimines have been synthesized, the optimal synthesis methods have been developed. It is found the introduction of acceptor substituent PhOCH2 to C=O group of 1,4-benzoquinonmonoimines results to the decrease in their LUMO energy. As result the reaction with sodium arylsulfinate proceeds mainly under anion-radical mechanism, and or-bital control predominates in thiocyanation of these quinonimines. Presence of more donor substituent PhCH=CH at C=O group of 1,4-benzoquinon-monoimines leads to the increase of their LUMO energy. That reduces the contribution of anion-radical mechanism in reaction with sodium arylsulfinate and increase the role of charge control in thiocyanation. It is revealed the introduction of alkyl substituents to ortho-position towards C=N or C=O bond of quinoid ring of N-aryl(phenoxy, benzylidene)acetyl-1,4-benzoquinon-monoimines decreases the energy of MO pi*-antibinding orbital of this bond that increases its activity to addition reactions. It is ascertained the reactions of N-aryl(phenoxy, benzylidene)acetyl-1,4-benzoquinonmonoimines with HCl run through initial protonation of nitrogen atom. In second stage the addition of chloride anion and cycle aromatization proceeds. Possibility of 1,2-addition of alcohols to 3,5-dimethyl-N-aryl(phenoxy, ben-zylidene)acetyl-1,4-benzoquinonmonoimines is conditioned by thermodynamic stability of quinolyd structure which depends on stabilizing interaction nO3 with sigma *(C4-N). Direction of trans-addition of halogen molecule to C=C bond of quinoid ring of 4-benzylideneacetyloxyimino-2,5-cyclohexadien-1-ones depends mainly on position and volume of substituents in quinoid ring.

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. Коновалова Світлана Олексіївна

2. Konovalova Svetlana Alekseevna

Кваліфікація: к.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. Просяник Олександр Васильович

2. Просяник Олександр Васильович

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. Аніщенко Андрій Олександрович

2. Аніщенко Андрій Олександрович

Кваліфікація: к.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 Марков Віктор Іванович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Марков Віктор Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.