Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0403U001316

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-04-2003

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Брянцев В'ячеслав Сергійович

2. Bryantsev Vyacheslav Sergeevich

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: 08-04-2003

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Донбаська державна академія будівництва і архітектури

Код за ЄДРПОУ: 02070795

Місцезнаходження: Україна, 86123, Донецька обл.,м. Макіївка, вул. Державіна, 2

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 11.216.01

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: Донбаська державна академія будівництва і архітектури

Код за ЄДРПОУ: 02070795

Місцезнаходження: Україна, 86123, Донецька обл.,м. Макіївка, вул. Державіна, 2

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.03

Тема дисертації:

1. Квантово-хімічний опис фізико-хімічних характеристик радикалів та іон-радикалів з супряженими зв'язками

2. Quantum chemical description of physicochemical characteristics of conjugated radicals and ion-radicals

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена розвитку і узагальненню на основі зв'язаного варіанта р-електронної теорії збурень у необмеженому методі Хартрі-Фока надійної методики розрахунку фізико-хімічних молекулярних характеристик для систем із незамкнутими електронними оболонками. Виявлені закономірності впливу структури на ентальпії утворення, енергії дисоціації зв'язків, потенціали іонізації, константи НТВ в спектрах ЕПР, довжини зв'язків, електричні дипольні поляризовності, діамагнітні сприйнятливості, наведені р-електронні кільцеві струми та енергії нижчих електронних переходів радикалів, іон-радикалів та іон-радикал карбенів з супряженими зв'язками. У рамках індексного підходу Фукуі описані електроциклізації непарних полієн-радикалів, іон-радикалів парних полієнів, полієнів у нижчому триплетному стані і похідних триметиленметану. Проведено аналіз впливу хімічного заміщення на логарифми констант швидкостей реакцій з радикальним характером перехідного стану. Запропоновано квантово-хімічну модель неспецифічної адсорбції молекул і радикалів на поверхні металу в розчинах електролітів. Результати

розрахунків добре узгоджуються з наявним експериментом

2. The thesis is devoted to development and extension of reliable procedure for calculation of physicochemical characteristics of systems with open electronic shell. Quantum chemical calculations were carried out in terms of coupled p-electronic perturbation theory using unrestricted Hartree-Fock method. There have been revealed conformities of changing the enthalpies of formation, bond dissociation energies, ionization potentials, ESR coupling constants, bond lengths, electrical dipole polarizabilities, diamagnetic susceptibilities, induced p-electron ring currents and energies of the lowest electronic transitions on the structure of the conjugated radicals, radical ions and radical ion carbenes studied. Electrocyclization of the radicals of odd polyenes, radical ions of even polyenes, polyenes in the lowest triplet state and methylencyclopropane derivatives have been described in terms of the Fukuy index approach. Analysis of substituent effects on reaction rate constants with radical character of Transition State has been done. Quantum chemical model of adsorption of organic molecules and radicals on metal surface in solutions of electrolyte is proposed. The results of calculations are in agreement with available experiment.

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. Висоцький Юрій Борисович

2. Vysotsky Yuri Borisovich

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. Шендрик Олександр Миколайович

2. Шендрик Олександр Миколайович

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. Іванов Володимир Венедиктович

2. Іванов Володимир Венедиктович

Кваліфікація: к.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. Ярим-Агаєв Микола Лук'янович

2. Ярим-Агаєв Микола Лук'янович

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Попов Анатолій Федорович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Попов Анатолій Федорович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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