Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U003189

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-10-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Фарафонов Володимир Сергійович
2. Farafonov Volodymyr

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: 13-09-2018

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: 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

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: 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

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Локалізація та гідратація органічних барвників в міцелах поверхнево-активних речовин за даними молекулярно-динамічного моделювання

2. Localization and hydration of organic dyes in surfactant micelles by molecular dynamics simulations

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена встановленню методами обчислювальної хімії особливостей впливу природи поверхнево-активної речовини (ПАР) на локалізацію, орієнтацію та гідратацію молекул органічних барвників, що адсорбовані міцелами ПАР, у нейтральній та іонізованій формах. Крім того, досліджені властивості міцел ПАР без барвників та проведена робота по створенню повноатомних потенціальних моделей згідно з методологією загальновживаних силових полів. На прикладі додецилсульфату натрію (ДСН) показано, що поведінка мономерів ПАР в моделюванні може визначатися не тільки параметрами потенціальної моделі для атомів головної групи ПАР, протиіона та води, але й для параметрами зв'язків у вуглеводневому радикалі. Для останніх рекомендоване використання параметрів, що отримані спеціально для вищих алканів та жирів. Для ряду іонних ПАР визначено, що концентрація води в поверхневих шарах їх міцел є дуже близькою, що свідчить про малий вплив на неї знаку заряду і природи головної групи та розміру міцели. Розвинений підхід до обчислення мікроскопічних характеристик молекул органічних барвників, що

адсорбовані міцелами ПАР (локалізації, орієнтації та складу мікрооточення). Цей підхід був застосований до ряду сольватохромних та кислотно-основних індикаторних барвників у міцелах загальновживаних катіонних, аніонних та цвітер-іонних ПАР. Визначено, що локалізація молекули стандартного сольватохромного барвника Райхардта в міцелах ДСН і ЦТАБ є близькою, а різниця в параметрах полярності розчинів цих ПАР є наслідком взаємодії молекули з головними групами ПАР. Оцінена придатність ряду кислотно-основних барвників для використання в індикаторному методі визначення поверхневого електростатичного потенціалу міцел. Показано, що одночасно для міцел із різним знаком заряду найменша різниця в локалізації та складі мікрооточення молекул двох форм має місце для 4-н-додецил-2,6-динітрофенолу. Окремо в міцелах ЦТАБ це має місце також для стандартного барвника Райхардта, а в ДСН — для 4 н гептадецил-7-амінокумарина.

2. The thesis is devoted to determining the effect of surfactant nature and protonation state on localization, orientation, and hydration of molecules of organic dyes in neutral and ionized states, adsorbed on surfactant micelles, by means of computational chemistry methods. Properties of surfactant micelles without dyes were examined and all atom potential models in frameworks of common force fields were developed, as well. On the example of sodium dodecyl sulfate (SDS) it was shown that the behavior of surfactant monomers during simulation can be determined not only by the parameters of head group atoms, counter-ion, and water, but by the ones of the hydrocarbon tail, as well. The standard force field parameters, derived for the lower alkanes, lead to computational artifacts when micelles with aggregation numbers >100 are simulated. The improved parameters, derived for higher alkanes and lipids, allows obtain correct results. For a series of ionic surfactant micelles, it was determined that the water concentration in surface layers of these micelles is similar that indicates the weak impact of the charge sign and nature of head group and the length of hydrocarbon radical on this quantity. The approach for calculating the microscopic characteristics (localization, orientation and microenvironment composition) of organic dye molecules adsorbed on surfactant micelles was developed. It was applied to a series of solvatochromic and acid-base indicator dyes in micelles of commonly used cationic, anionic and zwitter-ionic surfactants. Analysis of characteristics of a molecule of the standard solvatochromic Reichardt's dye adsorbed by SDS and CTAB micelles showed that the localization of the molecule is similar in both micelles. Consequently, the difference between the polarity parameters of these surfactant solutions is a result of interactions between the dye molecule and surfactant head groups. The comparison of characteristics of neutral and ionized forms for a series of acid-base indicator dyes allowed assessing the appropriateness of each dye for its use in the indicator method of determination of micelle surface electrostatic potential. It was shown that for both cationic and anionic micelles, the smallest difference in localization and microenvironment of two forms takes place for 4-n-dodecyl-2,6-dinitrophenol. In CTAB micelles only this also takes place for the standard Reichardt's dye, and in SDS micelles only for 4-n-heptadecyl-7-aminocoumarin.

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. Лебідь Олександр Валентинович

2. Lebed Oleksandr

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ільницький Ярослав Миколайович

2. Ilnytskyi Jaroslav Mykolaiovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.24

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. Горб Леонід Григорович

2. Gorb Leonid

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	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.