Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0417U003335

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-06-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Аніщенко Віктор Миколайович
2. Anishchenko Viktor Mykolayovych

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: 14-06-2017

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження: 02160, Київ-160, вул. Харківське шосе, 50

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 35.051.10

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, 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: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження: 02160, Київ-160, вул. Харківське шосе, 50

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Інверсійний трансфазний каталіз реакції фосфорилхлоридів з фенолами та структура реагентів
2. Inverse phase-transfer catalysis and reagents structure in reaction between phosphoryl chloride and phenols

Реферат:

1. Методом інверсійного трансфазного каталізу (ІТК) проведена реакція між пара-заміщеними фенолами і хлордіфенілфосфатом в двофазній системі вода/ дихлорметан. Для підтвердження перебігу каталітичного процесу через іонний інтермедіат були синтезовані хлорид, перхлорат і тетрафенілборат N-(дифеноксифосфорилокси)-4-диметиламінопіридинію. Методами ІЧ і ЯМР спектроскопій підтверджена структура синтезованих солей. На підставі зібраних експериментальних даних, запропонована розширена схема процесу, що враховує утворення тетрафенілпірофосфату. Використовуючи залежність, виведену з запропонованої схеми, були розраховані значення констант швидкостей взаємодії хлордіфенілфосфату з піридин-N-оксидами при різних температурах. Встановлено, що проведення процесу фосфорилювання при 5 С з використанням диметиламінопіридин-N-оксиду дозволило досягти практично кількісного виходу цільового продукту. Згідно з результатами моделювання реакції взаємодії хлордіфенілфосфату та піридин-N-оксидів структура перехідного стану відповідає геометрії тригональной біпіраміди, а вільна енергія

активації Гіббса істотно залежить від конформації хлордіфенілфосфата. Використовуючи метод ІТК і знайдені оптимальні реакційні умови, синтезували ряд арилдифенілфосфатів. Будову синтезованих сполук підтвердили методами ІЧ і ЯМР спектроскопій. Шляхом аналізу розрахованих ІЧ і ЯМР спектрів встановлено вплив просторового розташування замісників на частоти окремих коливань і екранування ядра 31P.

2. Inverse phase-transfer catalysis (IPTC) was used to perform reaction between reagents in two-phase medium water/dichloromethane. (N-diphenoxyphosphoryloxy)-4-dimethylaminopyridinium chloride, perchlorate and tetraphenylborate were synthesized to confirm that reaction paths through ionic intermediate. Structure of synthesized salts were confirmed with IR and NMR spectroscopy The extended scheme of process that includes formation of tetraphenyl pyrophosphate was proposed based on the collected experimental data. Reaction rate constants of interaction between pyridine N-oxides and diphenyl phosphoryl chloride for different temperatures were determined using equations based on proposed scheme. It was found that the process of phosphorylation at 5 °C using dimethylaminopyridine N-oxide possible to achieve almost quantitative yield the desired product. According to the simulation of reaction between diphenyl phosphoryl chloride and pyridine-N-oxides transition state have geometry of triangular bipyramid and Gibbs free energy of activation essentially depends on the conformation of diphenyl phosphoryl chloride. Several phosphates were synthesized with using IPTC method and optimal reaction condition. The structure of the synthesized compounds was confirmed by IR and NMR spectroscopes'. The influence of spatial arrangement of substituent on vibrational frequencies and shielding of 31P were determined by analysis of the calculated IR and NMR spectra.

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. Рибаченко Володимир Іванович
2. Rybachenko Volodymyr Ivanovych

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. Манк Валерій Веньямінович
2. Манк Валерій Веньямінович

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	Каличак Ярослав Михайлович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Каличак Ярослав Михайлович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.