Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0410U000683

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-03-2010

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шишкіна Світлана Валентинівна
2. Shishkina Svitlana Valentunivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 26-02-2010

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Державна наукова установа "Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: 61001, Харків, пр. Леніна, 60

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: Державна наукова установа "Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: 61001, Харків, пр. Леніна, 60

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Молекулярна структура та конформаційний аналіз похідних і гетероциклічних аналогів циклогексену

2. The molecular structure and conformational analysis of derivatives and heterocyclic analogues of cyclohexene

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена вивченню конформаційних характеристик циклу та внут-рішньомолекулярних взаємодій, що їх визначають, в циклогексені, його похідних та Гете-роциклічних аналогах. Особливу увагу приділяли процесу інверсії циклу та характеру пе-рехідних станів. В роботі виявлено незвичний сплощений характер ППЕ для циклогексену, що при-водить до переходу між двома симетричними конформаціями твіст-ванна без зміни енергії молекули. Аналіз профілю процесу інверсії цикла для похідних циклогексену з екзоцик-лічним подвійним зв'язком або метильними замісниками, а також для гетероаналогів циклогексену показав, що сплощений характер ППЕ зберігається в усіх циклах, де мети-ленові групи в а-положенні до ендоциклічного подвійного зв'язку є незаміщеними. Дослідження внутрішньомолекулярних взаємодій в рамках методу натуральних орбіталей (NBO) виявило, що гіперкон'югаційні взаємодії між неподіленою парою електронів гетероатома та рі-орбіталлю подвійного зв'язку або s*-антизв'язуючою орбіталлю одинарного зв'язку можуть помітно впливати на геометричні характеристики циклу. В той же час

гіперкон'югаційні взаємодії між рі-орбіталлю подвійного зв'язку та псевдо-рі фрагментарними орбіталями сусідніх метиленових груп визначають профіль інверсії циклу в циклогексені і його похідних з незаміщеними метиленовими групами в а-положенні до ендоциклічного подвійного зв'язку. Комплексні дослідження показали, що рівноважна конформація напівкрісло в шестичленних тетрагідроароматичних циклах є конформаційно гнучкою і може легко змі-нюватися в сторону софи під впливом різних факторів. Ключові слова: тетрагідроароматичний цикл, конформаційні характеристики, процес інверсії циклу, рі-рі супряження, гіперкон'югаційні взаємодії, рі- та s*-анти-зв'язуючі орбіталі.

2. The thesis is devoted to study of conformational characteristics and intramolecular interactions in cyclohexene, its derivatives and heterocyclic analogues. The special attention was focused on the ring inversion process and the character of transition states. Unusual top-flattened character of the potential energy surface for cyclohexene was disclosed in the work. This leads to the transition between two symmetric conformations of twist-boat via boat conformation without change in energy. Analysis of the energy profile for ring inversion process for cyclohexene derivatives containing an exocyclic double bond or methyl substituents and for heterocyclic analogues demonstrates that the flattened character of the potential energy surface is kept for all rings where methylene groups in a-position relatively endocyclic double bond are non-substituted. The investigation of intramolecular interactions using NBO theory reveals the influence of hyperconjugation interactions between lone pair of heteroatom and s-orbital of double bond or s-antibonding orbitals of neighboring C-C bond on the geometric characteristics of the tetrahydrocycle. At the same time the hyperconjugation interactions between s-orbital of the endocyclic double bond and pseudo-pi-fragment orbital of neighboring methylene groups influences the energy profile of ring-inversion process in cyclohexene and its derivatives with non-substituted methylene groups in a-position relatively double bond. The combined study by experimental and theoretical methods demonstrates that the half-chair equilibrium conformation of six-membered tetrahydroaromatic rings is conformational flexible. The half-chair conformation may be deformed easily toward a sofa conformation under the influence of different factors. Key words: tetrahydroaromatic ring, conformational characteristics, the ring-inversion process, pi-pi conjugation, hyperconjugation, pi- and s*-antibonding orbitals.

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. Десенко Сергій Михайлович
2. Desenko Sergiy Mikhaylovich

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. 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Михайлов Василь Олександрович
2. Михайлов Василь 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	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.

