Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0409U005529

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-11-2009

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бєляєва Олена Олександрівна
2. Elena Belyaeva

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: 19-11-2009

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Донецький національний технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070826

Місцезнаходження: 85300, Україна, м. Покровськ, пл. Шибанкова, 2

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 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: Донецький національний технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070826

Місцезнаходження: 85300, Україна, м. Покровськ, пл. Шибанкова, 2

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.21.09

Тема дисертації:

1. Квантово-хімічний аналіз кластеризації амінів, тіоспиртів і цис-моноєнових карбонових кислот на поверхні розділу фаз вода/пара

2. Quantum-chemical analysis of clusterization of amines, thioalcohols and cis-monoenic acids at water/air interface.

Реферат/анотація:

1. В роботі наведено результати квантово-хімічних розрахунків в рамках напівемпіричного методу PM3 ентальпії, ентропії і енергії Гіббса утворення і кластеризації амінів, тіоспиртів і цис-моноєнових карбонових кислот на міжфазній поверхні вода/пара. Спонтанна кластеризації тіоспиртів починається при довжині вуглеводневого радикала в 14-15 атомів вуглецю, амінів - при 18-19, цис-моноєнових кислот - при 17-19. Розраховані параметри добре узгоджуються з відповідними експериментальними. Величини термодинамічних характеристик кластеризації моноєнових кислот не залежать від положення подвійного зв'язку в радикалі, за виключенням його крайнього розташування, коли змінюється число міжмолекулярних H-H взаємодій. В рамках запропонованої моделі виділено п'ять типів межмолекулярних взаємодій між CH2-групами, що відповідають різному взаємному розташуванню атомів водню в них. Показано, що "а"-тип таких взаємодії найкращим чином описує наявні експериментальні дані. Запропоновано "Простий" метод

попередньої оцінки термодинамічних параметрів кластеризації ПАР на поверхні розділу фаз вода/пара, який добре відтворює як термодинамічні параметри кластеризації, одержані в рамках адитивних схем, так і відповідні експериментальні параметри.

2. In the work results of quantum-chemical calculations of entalpy, entropy and Gibbs energy of formation and clusterization of amins, thioalcohols and cis-monoenic carbon acids on a water/air interface within the framework of semiempiric method of PM3 have been held. Spontaneous clusterization of thioalcohols starts at length of hydrocarbon radical in 14-15 atoms of carbon, amins - at 18-19, cis-monoenic acids - at 17-19. Calculated parameters conform with proper experimental well. The values of thermodynamics parameters of clusterization of monoenic acids do not rely on position of double bond in a radical, except for its extreme position, when the number of intermolecular H-H bonds changes. Five types of intermolecular interactions between CH2-groups were defined. It is shown, that "a"-type of such interactions describes experimental data the best. The "Simple" method of preliminary estimation of thermodynamics parameters of clusterization of surface-active compounds on the surface was offered, it reproduces the thermodynamics parameters of clusterization, got within the framework of additive scheme, and proper experimental parameters well.

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 Yurii

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. Александров Валерій Дмитрович

2. Александров Валерій Дмитрович

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. Дмитрук Олександр Філаретович

2. Дмитрук Олександр Філаретович

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 Анатілий Федорович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні

Попов Анатілий Федорович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.