Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U101480

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Святенко Людмила Костянтинівна

2. Svjatenko Ludmila K.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: так

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: 13-05-2021

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Донецький національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010698

Місцезнаходження: вул. Привокзальна, буд. 27, м. Лиман, Краматорський р-н., Донецька обл., 84404, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров`я 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, буд. 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: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 72, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Реакційна здатність нітроароматичних сполук і циклічних нітроамінів. Квантово-хімічне моделювання
2. Reactivity of nitroaromatic compounds and cyclic nitroamines. Quantum-chemical modeling

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена розробці теоретичних підходів до вивчення механізмів і кінетики реакцій нітроароматичних сполук і циклічних нітроамінів, що дозволяє прогнозувати методи ефективного вилучення їх з навколишнього середовища. Проведено детальний аналіз різних теоретичних наближень і сольватаційних моделей на предмет точності розрахунку потенціалів відновлення і окиснення нітроароматичних сполук і азациклічних сполук. В обраних наближеннях, які забезпечують точність розрахунку 0,1-0,2 еВ для даних класів сполук, розраховано величини потенціалів відновлення і окиснення сполук, для яких експериментальні дані відсутні. З'ясовано, що адсорбція знижує здатність гідратованих нітроароматичних сполук і циклічних нітроамінів до окисно-відновних перетворень. Розроблено підхід для моделювання кінетики багатостадійної реакції за різних умов із залученням усіх, теоретично прогнозованих, інтермедіатів. Встановлено механізм відновлення нітрогрупи у нітрозогрупу за допомогою нітроредуктаз.

Змодельовано механізм початкових стадій лужного гідролізу таких нітроароматичних сполук і циклічних нітроамінів, як TNT, DNT, DNAN, RDX, HMX, CL-20. Показано, що гідроліз нітросполук перебігає у напрямку приєднання гідроксид-іону і заміщення нітрогруп гідроксильними групами з побічним депротонуванням, яке призводить до утворення комплексів Яновського і, в подальшому, до сполук з високою молекулярною масою. Фотоактивація значно прискорює процес лужного гідролізу DNAN. Гідроліз нітроамінів складається з початкового депротонування і відщеплення нітрит-іону, приєднання гідроксид-іону з одночасним розривом циклу, подальшим перетворенням шляхом розриву зв'язків C-N і приєднання гідроксид-іону. Змодельовано кінетичні криві для лужного гідролізу TNT, DNT, DNAN, RDX, HMX, що дає інформацію про швидкість розкладу вихідних сполук і накопичення продуктів. Змодельовано механізми окиснення синглетним киснем нітроароматичних сполук DNAN і NTO та механізми окиснення гідроксид-радикалом сполук DNT, DNAN, NTO, RDX. Показано, що окиснення сполуками, які генерують гідроксид-радикал, є високоекзотермічним процесом. Розуміння механізму процесу деградації нітросполук шляхом лужного гідролізу, під дією синглетного кисню та гідроксид-радикалу сприятиме вдосконаленню технологій для видалення нітросполук з навколишнього середовища.

2. The dissertation is devoted to the development of theoretical approaches to the study of the mechanisms and kinetics of reactions of nitroaromatic compounds and cyclic nitroamines, which allows predicting the methods of their effective removal from the environment. A detailed analysis of different theoretical approximations and solvation models on the accuracy of reduction and oxidation potentials calculation for nitroaromatic compounds and azacyclic compounds is performed. The best approximations provide reproduction of experimental values with an accuracy of 0.1-0.2 eV for these classes of compounds. The MPWB1K/tzvp approximation using SMD(Pauling) model to describe the solvation of molecule and PCM(Pauling) model to describe the solvation of anion radical as well as the M06-2X/6-31+G(d) approximation taking into account the solvation of molecule and anion radical using models SMD(Pauling) and PCM(Bondi), respectively, can be proposed to calculate the reduction potentials for a wide range of nitrocompounds in aqueous solution. The combinations of SMD(UAHF) solvation model for molecule and PCM(Bondi) and SMD (Bondi) models for cation radical with MPW1K functional and 6-31+G(d) basic set were the most accurate for calculating the oxidation potential of azacyclic compounds in acetonitrile and were used to predict the oxidation potentials of a number of azacyclic nitrocompounds with no experimental data. The adsorption complexes of nitroaromatic compounds TNT (1-methyl-2,4,6-trinitrobenzene), DNT (1-methyl-2,4-dinitrobenzene), DNAN (1-methoxy-2,4-dinitrobenzene), NTO (5-nitro-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-one), ANTA (5-amino-3-nitro-1H-1,2,4-triazole), and nitroamines RDX (1,3,5-trinitro-1,3,5-triazacyclohexane), HMX (1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetraazacyclooctane), CL-20 (2,4,6,8,10,12-hexanitro-2,4,6,8,10,12-hexaazatetracyclo[5.5.0.03,11.05,9]dodecane) with hydroxylated surface of □-quartz (001) were modeled. Adsorption was found to reduce the ability of hydrated nitroaromatic compounds and cyclic nitroamines to redox transformations.

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. немає

2. no

Кваліфікація: д.б.н., 03.00.02

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. Оковитий Сергій Іванович

2. Okovytyy Sergey Ivanovich

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. Оковитий Сергій Іванович

2. Okovyty Sergiy I.

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. Роженко Олександр Борисович
2. Rozhenko Oleksandr B.

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. Швед Олена Миколаївна
2. Shved Olena Mykolayvna

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. Обушак Микола Дмитрович

2. Obushak Mykola D.

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

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.