Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0413U003009

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-05-2013

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дем'яненко Євгеній Миколайович
2. Demianenko Eugeniy Mikolaiovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 25-04-2013

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: 03164, Київ, вул. Генерала Наумова, 17

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 26.210.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: 03164, Київ, вул. Генерала Наумова, 17

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. Квантовохімічне дослідження деструкції ацетилсаліцилової та аскорбінової кислот і гістаміну, адсорбованих на поверхні кремнезему

2. Quantum chemical study on the destruction of acetylsalicylic acid, ascorbic acid, and histamine adsorbed on silica surface

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено теоретичному дослідженню механізмів деструкції молекул органічних речовин, що адсорбовані на поверхні кремнезему, неемпіричним методом Хартрі-Фока та методом теорії функціонала густини (DFT) з використанням різних базисних наборів та функціоналів за допомогою програм USGAMESS, PCGAMESS та GAUSSIAN 09. Досліджено дисоціацію молекули ортосилікатної кислоти у водних кластерах. Розраховано термодинамічні характеристики реакції перенесення протона від молекули ортосилікатної кислоти до молекули води та константа рівноваги цього процесу. Розглянуто механізми гідролітичної деструкції ацетилсаліцилової кислоти у водному розчині при pH від 4 до 8,5, а також за участю поверхні кремнезему. Показано, що внаслідок специфічної взаємодії поверхні кремнезему з молекулами води і ацетилсаліцилової кислоти енергія активації її гідролізу менша, ніж у водному розчині. Дослідження механізмів окиснення молекулярним киснем молекули та моноаніона аскорбінової кислоти у водному

середовищі показало, що за звичайних умов молекула O2 краще взаємодіє з частково дисоційованою молекулою аскорбінової кислоти, ніж із її недисоційованою формою. На поверхні кремнезему енергія активації окиснення аскорбінової кислоти є вищою, ніж у водному розчині. Досліджено механізми термодеструкції гістаміну у вільному та в хемосорбованому на поверхні кремнезему станах, яка відбувається в умовах температурно-програмованого десорбційного мас-спектрометричного експерименту.

2. The thesis is devoted to the theoretical study on the mechanisms of degradation of organic substances adsorbed on silica surface by ab initio Hartree-Fock and density functional theory methods using various basis sets and functionals (USGAMESS, PCGAMESS and GAUSSIAN 09 program packages). The dissociation of orthosilicic acid molecule in water clusters has been studied. Thermodynamic properties of the reactions of proton transfer from orthosilicic acid molecule to water molecules and the equilibrium constant of this process have been calculated. It has been shown that the values of dissociation constants of orthosilicic acid in water closest to the experimental findings are those given by DFT calculations involving the effect of solvent. The mechanisms of hydrolytic degradation of acetylsalicylic acid in aqueous solution at the pH values within 4 to 8.5 as well as those involving silica surface have been considered by quantum chemical methods. It has been shown that due to specific interaction of silica surface with water molecules and acetylsalicylic acid ones, the activation energy of its hydrolysis is lower than that in aqueous solution. The oxidation mechanisms of ascorbic acid molecule and its monoanion in aqueous medium by molecular oxygen have been studied. It has been shown that under normal conditions oxygen molecule favourably interacts with partially dissociated ascorbic acid molecule rather than with its non-dissociated form. Silica surface hinders oxidation of ascorbic acid with air oxygen due to its proton-donor properties and dissociation of silanol groups; in aqueous solution within the surface layer, the equilibrium dissociation of ascorbic acid is shifted toward the formation of its molecular forms. The mechanisms of thermal degradation have been examined for both free histamine and chemisorbed one on silica surface, occuring in a temperature-programmed desorption mass spectrometry experiment. It has been shown that adsorption of histamine on silica surface promotes its thermal degradation via the concerted mechanism of pyrolytic elimination with formation of fragments m/z 82 and 94.

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. Гребенюк Анатолій Георгійович
2. Grebenyuk Anatoliy Georgiyovich

Кваліфікація: к.х.н., 01.04.18, 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. Стрижак Петро Євгенович
2. Стрижак Петро Євгенович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.15, 02.00.15

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. Роженко Олександр Борисович
2. Роженко Олександр Борисович

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.03, 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	Тьортих Валентин Анатолійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Тьортих Валентин Анатолійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.

