

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U100930

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гордеева Ірина Олександрівна

2. Hordieieva Iryna Oleksandrivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 18-05-2021

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

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): ДФ 11.051.019

Повне найменування юридичної особи: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, 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: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, 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, 31.21

Тема дисертації:

1. Реактивність N оксильних радикалів в реакціях відриву H атома від молекул бензилових спиртів
2. The reactivity of N oxyl radicals in the H atom abstraction reactions from molecules of benzyl alcohols

Реферат:

1. Запропоновано модель для прогнозування констант швидкості реакцій переносу атома Гідрогену (НАТ) від а-С-Н зв'язків п-заміщених бензилових спиртів N-оксильними радикалами різної будови. Для кількісної оцінки факторів, що контролюють реакційну здатність N-оксильних радикалів і бензилових спиртів, був проведений багатофакторний регресійний аналіз з використанням різних комбінацій параметрів реакційної здатності реагентів. Він базується на двовимірному масиві з 35 реакцій НАТ, константи швидкості яких змінюються в межах 4 порядків. Вперше запропоновано поліпараметричне регресійне рівняння, яке дозволяє з високою достовірністю прогнозувати величини констант швидкості реакцій при використанні трьох незалежних параметрів: електрофільних p+ констант замісників Брауна-Окамото у молекулах бензилових спиртів та спінових заселеностей за Маллікеном на атомах O і N в N-O фрагментах N оксильних радикалів. Величини спінових заселеностей розраховано квантово-хімічно з використанням базисного набору DFT/B3LYP/6-31G(d,p). Константи швидкості реакцій розпаду нітроксильних радикалів та реакцій НАТ пара-заміщених бензилових спиртів з арилзаміщеними фталімід-N-оксильними радикалами з

електроноакцепторними (4-Cl, 4-HOOC) або електронодонорним замісником (4-CH₃O), хінолінімід-N-оксильним, бензотріазол-N-оксильним радикалами і радикалом віолурової кислоти були експериментально визначені за температури 30 °C в ацетонітрилі.

2. A predictive model for the rate constants of hydrogen atom transfer (HAT) from the α-C-H bond of p-substituted benzyl alcohols by N-oxyl radicals of different structures is proposed. A multivariate regression analysis was carried out to quantitatively evaluate the factors that control the reactivity of N-oxyl radicals and benzyl alcohols using various combinations of the reactivity parameters of the reagents. The regression analysis was based on a 2D array of 35 HAT reactions, the rate constants of which varied in the range of 4 orders. The proposed final polyparameter equation approximates with high reliability the experimental rate constants of reactions when using three independent parameters: Brown-Okamoto ρ+ constants of substituents in alcohol molecules and the spin populations on O and N atoms of N-O fragments in N-oxyl radicals, which calculated by method DFT/B3LYP/6-31G(d,p). The absolute rate constants of HAT reactions from para substituted benzyl alcohols by a series of aryl-substituted phthalimide-N-oxyl radicals containing either electron-withdrawing groups (4-Cl, 4-HOOC) or electron-donating group (4-CH₃O), quinolinimide-N-oxyl, benzotriazole-N-oxyl and violuric acid radical were experimentally determined at 30 °C in acetonitrile.

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 ОПВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шендрік Олександр Миколайович
2. Shendryk Oleksandr Mykolaiovych

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. Ранський Анатолій Петрович
2. Ranskyi Anatolii Petrovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.01

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. Лявинець Олександр Семенович
2. Liavynets Oleksandr Semenovych

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шпанько Ігор Васильович
2. Shpanko Ihor Vasylovych

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. Радіо Сергій Вікторович

2. Radio Serhii Viktorovych

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Розанцев Георгій Михайлович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Розанцев Георгій Михайлович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Т.А.