# 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. Гордєєва 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/анотація:**

1. Запропоновано модель для прогнозування констант швидкості реакцій переносу атома Гідрогену (HAT) від a-C-H 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 HAT, 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 □+ 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 HAT пара-заміщених бензилових спиртів з арилзаміщеними фталімід-N-оксильними радикалами з

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

2. A predictive model for the rate constants of hydrogen atom transfer (HAT) from the a-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 □+ 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 □ 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 ОПІВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Шендрик 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.