

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0401U002590

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 04-10-2001

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Шуфлетюк Володимир Миколайович

2. Shufletyuk Volodymyr Mykolajovych

**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:** 11-09-2001

**Спеціальність за освітою:** 7.070301

**Місце роботи здобувача:** Донецький національний університет імені Василя Стуса

**Код за ЄДРПОУ:** 02070803

**Місцезнаходження:** 21021, м.Вінниця, вул. 600-річчя, 21

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти 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 університет імені Василя Стуса

**Код за ЄДРПОУ:** 02070803

**Місцезнаходження:** 21021, м.Вінниця, вул. 600-річчя, 21

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.15.27

**Тема дисертації:**

1. Кінетика розпаду третинних гідропероксидів в присутності галогенідів тетраетиламонію
2. The kinetics of tertiary hydroperoxides decomposition in the presence of tetraethylammonium halogenides

**Реферат:**

1. Встановлено, що галогеніди четвертинного амонію та фосфонію прискорюють розпад гідропероксидів в порівнянні з їх термолізом і проявляють каталітичні властивості в досліджених реакціях. Кінетичні дослідження розпаду гідропероксидів в присутності четвертинних солей показали, що реакція протікає з утворенням комплексу між реагентами. Розглянута кінетична схема каталітичного розпаду гідропероксидів придатна для пояснення перебігу реакції субстрату з каталізатором в дослідженому інтервалі концентрацій останнього. Розраховано основні кінетичні та активаційні параметри каталітичного розпаду гідропероксидного субстрату. Виявлено, що на перебіг реакції гідропероксидів з четвертинними солями впливає природа як катіону, так і аніону каталізатора, а також будова вуглеводневих замісників в молекулі субстрату. Розпад гідропероксидів в ацетонітрилі відбувається за радикальним шляхом, і основним продуктом реакції є кетон. Квантовохімічний аналіз взаємодії між субстратом та каталізатором підтвердив можливість утворення комплексу молекули гідропероксиду з іонами четвертинних солей. В комплексі молекула гідропероксиду зазнає ряд суттєвих змін в просторовій будові та розподілі електронної густини на

атомах, що і призводить до активації її розпаду.

2. It is shown that quaternary onium salts activate the decomposition of hydroperoxides at temperatures below thermolysis one. In the investigated reaction quaternary salts possess of catalytic properties. Results of decomposition of hydroperoxides investigations have showed that the intermediate complex was formed between reactants. For description of catalytic decomposition of hydroperoxides kinetic scheme, including thermal substrate decomposition is proposed. For reaction of hydroperoxides with quaternary salts values of equilibrium constants of complex formation and constants of its decomposition at different temperatures and activation parameters were obtained. The hydroperoxide catalytic decomposition depend on from a nature both anion and cation salt and structure of hydrocarbon substitute in molecule substrate. The investigations of reaction of hydroperoxide with quaternary salts have shown that the process of decomposition of peroxide bond proceeded with formation of radicals. A main product of tertiary hydroperoxides and decomposition is ketone. The quantum-chemical analysis of interaction of hydroperoxide with onium salt has confirmed the formation of the complex between reactants. In the complex the hydroperoxide molecule undergoes a series of essential changes of stereochemical structure and allocation of electron density on atoms. These changes activate hydroperoxide decomposition.

**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. Ніколаєвський Алім Микитович

2. Ніколаєвський Алім Микитович

**Кваліфікація:** к.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. Висоцький Юрій Борисович

2. Висоцький Юрій Борисович

**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. Никипанчук Михайло Васильович

2. Никипанчук Михайло Васильович

**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. Мітченко Сергій Анатолійович

2. Мітченко Сергій Анатолійович

**Кваліфікація:** к.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 Анатолій Федорович

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

Попов Анатолій Федорович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.