Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U002631

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-06-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дьяконенко Вікторія Володимирівна
2. Diakonenko Viktoriia Volodymyrivna

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: 04-06-2018

Спеціальність за освітою: фізика

Місце роботи здобувача: Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів"

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61001, Україна

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 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 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: Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів"

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61001, Україна

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. Будова органічних кристалів на основі аналізу енергій взаємодій між молекулами
2. The structure of organic crystals based on the analysis of interaction energies between molecules

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена розробці нового методу вивчення кристалічної будови органічних сполук, яка ґрунтується на аналізі енергій взаємодій між молекулами в кристалі. На серіях модельних кристалів показано, що створений метод досить універсальний і може бути застосований для вивчення кристалічної структури органічних сполук різних типів з точки зору супрамолекулярної хімії (таких, що можуть утворювати декілька близьких за характеристиками міжмолекулярних взаємодій; або таких, що зовсім не утворюють специфічні взаємодії), а також структур макромолекул. Запропоновано спосіб візуалізації розрахованих квантово-хімічними методами енергій парних взаємодій за допомогою енергетично-векторних діаграм. В рамках цього способу аналізуються не абсолютні значення енергій, а їх відносні величини, нормалізовані на відстань між взаємодіючими молекулами та енергію найсильнішої взаємодії в кристалі. Це робить розроблений метод майже незалежною від методу розрахунку енергій. Аналіз участі одного або обох компонентів змішаних кристалів в утворенні базового структурного мотиву дає підстави для

їх розділення на сольвати та со-кристали. Показано, що в кристалічній структурі сольватів базовий структурний мотив утворюється тільки одним з компонентів, а в со-кристалах обидва компоненти входять до базового структурного мотиву. Застосування запропонованого методу для аналізу кристалічної структури ряду модельних органічних сполук дозволило виділити різні рівні організації молекулярних кристалів: сильно зв'язані енергетично ланцюжки/колонки або шари як первинні базові структурні мотиви, шари сильно взаємодіючих колонок як вторинні структурні мотиви. Виділення рівнів організації структури створює передумови до класифікації всіх органічних кристалів. У разі неможливості виділення будь-якого структурного мотиву кристал можна класифікувати як ізотропний. Відповідно до типу первинного базового структурного мотиву, кристал може бути колончатим або шаруватим. При існуванні двох рівнів організації (колонок як первинного базового структурного мотиву і шарів як вторинного структурного мотиву) кристал є колончато-шаруватим. Забезпечуючи подальший розвиток теорії синтонів, можна запропонувати їх класифікацію в рамках окремого кристалу відповідно до того, який структурний мотив вони утворюють. Можна виділити базові синтони, що утворюють асоціат молекул як будівельну одиницю кристала; первинні та вторинні, що відповідають за формування відповідного структурного мотиву, та допоміжні, що забезпечують взаємодію між вторинними структурними мотивами.

2. The thesis is devoted to the development of a new method for studying of a crystal structure of organic compounds, based on the analysis of the interaction energies between molecules in a crystal. Using series of model crystals it was shown that the proposed procedure is quite universal and can be used to study the crystal structure of organic compounds of various types (contained intermolecular interactions with close geometrical characteristics, without any specific interactions or structures of macromolecules). It has been proposed the new method of visualization of the pairwise interaction energies calculated by quantum-chemical methods using energy-vector diagrams. The use of the proposed method for analyzing of the crystal structures of organic compounds has made it possible to distinguish the different levels of organization of molecular crystals (chains/columns, layers, layers consisting of strongly interacting columns), which creates the prerequisites for classifying all organic crystals into isotropic, columnar, layered or columnar- layered. As a further development of the synthon theory it is possible to propose the classification of synthon within the framework of an individual crystal in accordance with what basic structural motif they form (basic, primary, secondary, auxiliary).

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. Шишкін Олег Валерійович

2. Shishkin Oleh

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. Горб Леонід Григорович
2. Gorb Leonid

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. Іванов Володимир Венедиктович
2. Ivanov Volodymyr

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

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.