Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0599U000426

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-05-2000

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Матвієнко Анатолій Григорович
2. Matviyenko Anatolij Grygorovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 22-10-1999

Спеціальність за освітою: 2018

Місце роботи здобувача: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження: 83114, Україна, Донецьк-114, вул. Р. Люксембург, 70

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 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: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження: 83114, Україна, Донецьк-114, вул. Р. Люксембург, 70

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.27

Тема дисертації:

1. Рідиннофазне співокиснення алкіларенів, реакційна здатність їх молекул і пероксирадикалів.
2. Liquid-phase cooxidation of alkylarenes, reactivity of their molecules and peroxyradicals.

Реферат:

1. Реакції окиснення, співокиснення алкілпохідних бензолу, біфенілу, нафталіну, піридину, піридин-N-оксиду, тіофену. Реакційна здатність молекул і пероксирадикалів у реакції відриву атома водню; пероксирадикалів у реакції рекомбінації. Методи волюметричний, газо-рідинної хроматографії ("Chromatograf-504", "ЛХМ-8МД"), ЕПР-спектроскопія (RADIOPAN SE/X-2544); кінетичні методи співокиснення, хемілюмінесцентний; квантовохімічний метод PM3. Встановлено загальні кінетичні закономірності окиснення бінарних сумішей алкіларенів у залежності від хімічної структури молекул, визначено параметри співокиснення, розраховано константи швидкості реакцій пероксирадикалів із молекулами. Показано, що в залежності від структури молекул чинниками, що визначають їх реактивність, можуть бути термодинамічний, полярний, стеричний, ентропійний або їх комбінація. Встановлено, що реактивність О-центрованих радикалів у реакції відриву атома водню визначається енергією нижньої вільної молекулярної орбіталі радикала, що характеризує його електроноакцепторні властивості, у реакції

рекомбінації - залежить від заряду на кінцевому атому кисню. Квантовохімічними розрахунками показано, що перехідні стани реакцій пероксильних радикалів із молекулами алкіларенів є структурами з поділом заряду, причому перенос негативного заряду з молекули на радикал є більшим для молекул із меншим потенціалом іонізації і для радикала із більшою спорідненістю до електрона. Результати роботи можуть бути використані при розробці технологічних процесів рідиннофазного окиснення алкіларенів, при викладанні курсів з кінетики радикально-ланцюгових реакцій, реакційної здатності органічних сполук.

2. Reactions of oxidation and cooxidation of benzene, biphenyl, naphtalene, pyridine, pyridine-N-oxide, thiophene alkylderivatives. Reactivity of molecules and peroxyradicals in hydrogen atom abstration reaction, peroxyradicals in recombination reaction. Volumetric, gas-liquid chromatography ("Chromatograf - 504", ЛХМ - 8МД), EPR - spectroscopy (RADIOPAN SE/X - 2544) methods; kinetic methods of cooxidation, chemiluminescence; quantum chemical method PM3. There have been established general kinetic regularities of alkylarenes binary mixtures oxidation depending on molecules chemical structure; the parameters of cooxidation being determined and the rate constants for reaction of peroxyradicals with molecules calculated. It was shown that in respect with the structure of molecules the responsible for their reactivity factors are thermodynamic, polar, steric, entropy ones or their combination. As it was stated the reactivity of O-centered radicals in hydrogen atom abstration reaction is determined by the rad ical lower free molecular orbital energy which is characteristic of its electrone accepting ability and reactivity in recombination reaction depends on the value of charge at the end oxygen atom. As it follows from quantum chemical calculations transition states of peroxyradicals reactions with alkylarene molecules are structures with charge separation and negative charge transition from the molecule to the radical is greater for molecules with less ionization potential and for radical with greater electron affinity. Results of the work can be used in alkylarenes liquid-phase oxidation technological process development as well as in radical-chain reaction kinetics and organic compounds reactivity studies.

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. Опейда Й.А.

2. Опейда Й.А.

Кваліфікація: д.х.н., 0.00.15

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кошечко В.Г.
2. Кошечко В.Г.

Кваліфікація: д.х.н., 02..

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. Висоцький Ю.Б.
2. Висоцький Ю.Б.

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 М.В
2. Никипанчук М.В

Кваліфікація: д.т.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 А. Ф.
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Попов А. Ф.
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.