Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U004224

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-10-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мокшина Олена Георгіївна

2. Mokshyna Olena Georgyyivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.03

Назва наукової спеціальності: Органічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 07-10-2016

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

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 41.219.02

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: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Критичні властивості та другі віріальні коефіцієнти органічних речовин та їх сумішей. QSPR аналіз з урахуванням міжмолекулярних взаємодій

2. Critical properties and second virial coefficients of organic compounds and their mixtures. QSPR analysis with the account for the intermolecular interactions

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці системи прогнозування термодинамічних властивостей органічних речовин та їх бінарних сумішей на основі QSPR аналізу у рамках симплексного підходу до опису молекулярної структури на прикладі критичних властивостей, фактора Пітцера та других віріальних коефіцієнтів. Розроблено дескрипторний опис індивідуальних органічних сполук, що неявно відображує міжмолекулярні взаємодії - "псевдосумішевий" підхід та дескриптори парних взаємодій. Розроблено та валідовано QSPR моделі, що описують та прогнозують досліджувані термодинамічні властивості органічних сполук та їх бінарних сумішей. Проведено каузальний аналіз молекулярних параметрів, що впливають на фактор Пітцера. Показано, що використання "псевдосумішевих" дескрипторів у QSPR моделях дозволяє зменшити середньоквадратичну помилку (RMSE) прогнозування критичних властивостей та других віріальних коефіцієнтів індивідуальних органічних сполук різних класів. Визначені структурні та фізико-

хімічні фактори, що впливають на досліджувані властивості. Вперше проведено розрахункову оцінку других віріальних крос-коефіцієнтів (B12), які безпосередньо характеризують різнорідні міжмолекулярні взаємодії у сумішах. Розраховані криві залежності B12 = f(T). За допомогою зовнішньої валідації показано, що отримані моделі придатні для прогнозування властивостей нових сполук та раніше недосліджених сумішей.

2. The main purpose of the thesis was to develop a system to predict thermodynamic properties (critical properties, acentric factor, second virial coefficient) of organic compounds and their binary mixtures using QSPR analysis based on the simplex representation of molecular structure. Novel descriptor representations were developed able to account for intermolecular interactions - "quasi-mixture" approach and pair interaction descriptors. The developed QSPR models were validated and proved able to describe and predict investigated thermodynamic properties of individual compounds and their binary mixtures. The causal analysis was performed for molecular parameters that influence the acentric factor. Usage of "quasi-mixture" descriptors proved to decrease a root-mean-square prediction error for critical properties and second virial coefficients of individual compounds. Influential structural and physic-chemical factors were detected. For the first time the second virial cross-coefficients (B12) were successfully modeled and predicted. Temperature dependence curves for B12 were restored from predictions and compared to the initial data. The external validation showed that the obtained models are applicable towards a prediction of new compounds and previously unstudied mixtures.

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. Кузьмін Віктор Євгенович

2. Kuz'min Viktor Yevgenovych

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. Оковитий Сергій Іванович

2. Оковитий Сергій Іванович

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. Танчук Всеволод Юлійович

2. Танчук Всеволод Юлійович

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.10

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	Андронаті Сергій Андрійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Андронаті Сергій Андрійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.