Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101189

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-04-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ютілова Ксенія Сергіївна

2. Yutilova Kseniia

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: 23-04-2021

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): Д 08.078.03

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження: просп. Гагаріна, буд. 8, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49005, 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

Тема дисертації:

1. Солі тетраалкіламонію і третинні аміни як нуклеофільні каталізатори ацетолізу хлорметилоксирану.
2. Tetraalkylammonium salts and tertiary amines as nucleophilic catalysts of (chloromethyl)oxirane acetolysis

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню каталітичного ацетолізу хлорметилоксирану у надлишку останнього в бінарних розчинниках ЕХГ : тетрагідрофуран, ЕХГ : нітробензол. Вивчено регіоселективність і кінетичні закономірності реакції в залежності від структури каталізатора та полярності розчинника при каталізі галогенідами тетраалкіламонію і третинними амінами. Показано, що каталітична активність останніх визначається їх нуклеофільністю. Доведено, що при каталізі аліфатичними третинними амінами на першій стадії відбувається їх кватернізація з утворенням in situ карбоксилатів четвертинного амонію. Досліджено вплив температури на кінетику реакції у розчинниках різної полярності, знайдено ентальпійно-ентропійний компенсаційний ефект. Виділено й охарактеризовано продукти реакції. Показано, що регіоселективність реакції зростає із зниженням полярності розчинника, збільшенням нуклеофільності галогенід-аніону та радіусів іонів солей тетраалкіламонію. Здійснено квантовохімічне моделювання розкриття циклу

хлорметилоксирану амінами MenEt3–nN, бромідами та ацетатами лужних металів (електрофіл-нуклеофіл). Деталізовано механізм нуклеофільного розкриття оксиранового циклу протонодонорними реагентами. Встановлено сприятливу роль електрофільної активації, оптимальні напрями стерео- та регіо-атаки нуклеофіла на цикл.

2. The thesis is devoted to the research of catalytic acetolysis of (chloromethyl)oxirane under excess of the latter in the binary solvents ECH : tetrahydrofuran and ECH : nitrobenzene. The regioselectivity and kinetic regularities of the reaction depending on the catalyst structure and the solvent polarity under catalysis by tetraalkylammonium halides and tertiary amines were studied. It was shown that the catalytic activity of the latter is determined by their nucleophilicity. It was proved that the first stage of the reaction under catalysis by aliphatic tertiary amines includes their quaternization with the in situ formation of the quaternary ammonium carboxylates. The temperature effect on the reaction kinetics in solvents of different polarity was studied, the enthalpy-entropy compensation effect was established. The reaction products were isolated and characterized. It was shown that the regioselectivity of the reaction rises with the decrease of solvent polarity, increase of nucleophilicity of the halide anion and radii of ions of tetraalkylammonium salts. Quantum chemical modelling of the ring opening of (chloromethyl)oxirane by amines MenEt3–nN, bromides and alkali metal acetates (electrophile-nucleophile) was performed. The mechanism of nucleophilic oxirane ring opening by proton-donating reagents was detailed. The favorable role of electrophilic activation, the optimal directions of stereo- and regio-attack of the nucleophile on ring were established.

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. Швед Олена Миколаївна

2. Shved Olena

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. Коротких Микола Іванович
2. Korotkikh Mykola

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. Оковитий Сергій Іванович
2. Okovytyi Serhii

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Просяник Олександр Васильович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Просяник Олександр Васильович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.