Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0411U001990

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-04-2011

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Фоміна Олена Сергіївна

2. Elena Fomina

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: 17-03-2011

Спеціальність за освітою: 8.070801

Місце роботи здобувача: Донецький національний технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070826

Місцезнаходження: 85300, Україна, м. Покровськ, пл. Шибанкова, 2

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 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 технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070826

Місцезнаходження: 85300, Україна, м. Покровськ, пл. Шибанкова, 2

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Квантово-хімічний аналіз кластеризації а-амінокислот на поверхні розділу фаз вода/повітря

2. Quantum-chemical analysis of cluster formation of a-amino acids at water/air interface

Реферат/анотація:

1. В роботі наведено результати квантово-хімічних розрахунків у рамках напівемпіричного методу PM3 ентальпії, ентропії і енергії Гіббса утворення і кластеризації а-амінокислот на міжфазній поверхні вода/повітря. Самочинна кластеризації гомохіральної та рацемічної форми а-амінокислот починається за однакової довжини вуглеводневого радикала в 11-12 атомів вуглецю у рамках похибки розрахунку за температури 278 К, що добре узгоджується з відповідними експериментальними даними. Результати квантово-хімічного моделювання показали, що параметри елементарних комірок кристалічної гратки заміщених алканів (у т.ч. і а-амінокислот) визначаються "а"-типом міжмолекулярних CH-HC-взаємодій, а кут нахилу молекул відносно міжфазної поверхні - об'ємом та структурою функціональних груп. Отримані розрахункові параметри елементарних комірок гомо- та гетерохіральних моношарів а-амінокислот добре відповідають експериментально визначеним значенням. У рамках суперпозиційно-адитивного підходу термодинамічні параметри утворення та кластеризації а-амінокислот можуть бути розраховані як сума відповідних параметрів амінів та карбонових кислот за вирахуванням відповідних параметрів алканів.

2. The results of quantum-chemical calculations within the frameworks of semiempirical method PM3 of the enthalpy, entropy and Gibbs' energy of formation and clusterization of a-amino acids at the water/air interface are presented in this thesis. Spontaneous cluster formation threshold either for enantiomerical pure or racemic a-amino acids is 11-12 carbon atoms in the molecular chain at 278 K. These values agree well with existing experimental data.The results of quantum-chemical calculations shows that the geometric parameters of the unit cell of the substituted alkanes (including a-amino acids) are determined by the 'a' type of intermolecular CH-HC-interactions, and the tilt of moleculas with respect to the interface is defined by the volume and structure of the functional groups. Calculated parameters of the unit cells of the homo- and heterochiral monolayers of a-amino acids agree well with existing experimental values. The usage of the superimposed-additive approach shows that values of enthalpy, entropy and Gibbs' energy of formation and cluster formation of a-amino acids can be calculated as sum of corresponding values of amines and carboxylic acids deducting corresponding values of alkanes.

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. Висоцький Юрій Борисович
2. Vysotsky Yurii

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лобанов Віктор Васильович

2. Лобанов Віктор Васильович

Кваліфікація: д.х.н., 01.04.18

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. Дмитрук Олександр Філаретович

2. Дмитрук Олександр Філаретович

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 Попов Анатолий Федорович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Попов Анатолий Федорович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.