Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0403U003240

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-10-2003

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шубіна Тетяна Євгенівна

2. Shubina Tatyana Evgen'evna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 25-09-2003

Спеціальність за освітою: 8.091601

Місце роботи здобувача: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут"

Код за ЄДРПОУ: 24571351

Місцезнаходження: 03056, м. Київ, проспект Перемоги - 37

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д.217.01

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: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут"

Код за ЄДРПОУ: 24571351

Місцезнаходження: 03056, м. Київ, проспект Перемоги - 37

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21.23

Тема дисертації:

1. Квантово-хімічне дослідження механізмів реакцій алканів з електрофілами

2. Quantym-chemical study of alkane activation with electrophiles

Реферат/анотація:

1. Був проведений структурний аналіз катіон-радикалів, які утворюються при іонізації ряду каркасних вуглевод- нів (адамантан та його алкілпохідні, протоадамантан). Оцінені можливі шляхи перетворення вуглеводневих ка- тіон-радикалів (конкурентні С-Н та С-С фрагментації), як в газовому, так і в конденсованому середовищах. В реакціях С-Н зв'язків алканів з карбокатіонами і пози- тивованими галогенами були локалізовані ключові міні- муми і перехідні структури, оцінені роль переносу елек- трона в цих перетвореннях, значення бар'єрів, порядків реакцій та кінетичних ізотопних ефектів. Виявилось, що перехідні структури мають лінійні геометрії, значний пе- ренос заряду з вуглеводню на електрофіл (Н-зв'язаний електронний перенос). З незарядженими електрофілами (метал-оксо реагенти) реалізується аналогічний механізм.

2. Geometries and reaction paths for the radical cations, which form after the ionization of model cage compounds were analyzed. Possible fragmentation pathways for the hydrocarbon radical cations (breaking the C-H and C-C

bonds) in the gas phase and in condensed state were studied. The key intermediates and transition structures were loca- lized in the reactions of the C-H bonds with carbocations and positivated halogens to estimate the kinetic isotopic effects (KIE), activation barriers and reaction orders. The linear geometries of the transition structures as well as significant charge transfer from alkane to the reagent is observed (H-coupled electron-transfer). Reactions with uncharged oxidizers (metal-oxo reagents) proceed via similar mechanism.

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. Фокін Андрій Артурович
2. Fokin Andrey Arturovich

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. Сергучов Юрій Олексійович

2. Сергучов Юрій Олексійович

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. Гунько Володимир Мойсейович
2. Гунько Володимир Мойсейович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.17

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. Комаров Ігор Володимирович
2. Комаров Ігор Володимирович

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