

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0506U000500

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-10-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Оковитий Сергій Іванович

2. Okovytyy Sergiy Ivanovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор 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: 29-09-2006

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: 49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна 72

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 64.051.14

**Повне найменування юридичної особи:** Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

**Код за ЄДРПОУ:** 02071205

**Місцезнаходження:** майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, 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:** Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

**Код за ЄДРПОУ:** 02066747

**Місцезнаходження:** 49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна 72

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.21.18

**Тема дисертації:**

1. Квантово-хімічне дослідження механізмів реакцій утворення та розкриття епоксидного циклу
2. Quantum-chemical investigation of reaction mechanisms of the epoxy ring formation and opening

**Реферат:**

1. Об'єкт дослідження: механізми замикання й розкриття епоксидного циклу в ряду аліциклічних сполук. Мета: розробка підходів до вивчення механізмів реакцій епоксидування олефінів пероксикислотами і трансформації епоксидних сполук за участю нуклеофільних реагентів, встановлення стерео- і регіохімічних закономірностей перебігу реакцій. Методи: наближення багато- конфігураційного самоузгодженого поля, Хартрі-Фока, Мьоллера-Плессета, функціоналу густини і методи AM1 і PM3. Результати: встановлення бірадикального механізму реакції олефінів з пероксикислотами; розробка моделі для дослідження у супермолекулярному наближенні механізму метанолізу епоксидних сполук; створення фізично адаптованих для розрахунку магнітних властивостей молекул наборів базисних функцій; встановлення стереохімічного складу епоксидування біциклічних олефінів. Ступінь впровадження: впроваджено на хімічному факультеті ДНУ. Галузь використання: органічна хімія.

2. The objects are mechanisms of forming and cleaving of epoxidic ring in the row of alicyclic compounds. Aim: developing of approaches for investigation of mechanisms of olefins epoxidation reaction and transformation of epoxides with nucleophilic reagents, establishment of stereo- and regiochemical particularities of reactions. Methods: multiconfiguration selfconsistent field, Hartre-Fock, Meller-Plesset, density functional, AM1, PM3 approaches. Results: establishment of biradical mechanism of olefins with peroxyacids reaction, developing of model for investigation in supermolecular approach of mechanisms of epoxides methanolysis; developing of physically adapted for calculations of magnetic properties of molecules basis sets; establishment of stereochemical composition of bicyclic olefins epoxidation. Extent of application: introduced on department of chemistry of DNU. Area of application: organic chemistry.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Кас'ян Лілія Іванівна

2. Kasyan Liliya Ivanivna

**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. Шишкін Олег Валерійович
2. Шишкін Олег Валерійович

**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. Висоцький Юрій Борисович
2. Висоцький Юрій Борисович

**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. Кузьмін Віктор Євгенович
2. Кузьмін Віктор Євгенович

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.03

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

