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/анотація:

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 departmrnt of chemistru 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 ОПІВ:

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:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Орлов Валерій Дмитрович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Орлов Валерій Дмитрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.