Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0499U003140

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-04-2001

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Горбань Оксана Олександрівна

2. Gorban' Oksana Oleksandrivna

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: 04-11-1999

Спеціальність за освітою: 2018

Місце роботи здобувача: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження: 02160, Київ -160, вул. Харківське шосе, 50

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук 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: Донбаська державна академія будівництва і архітектури

Код за ЄДРПОУ: 02070795

Місцезнаходження: Україна, 86123, Донецька обл.,м. Макіївка, вул. Державіна, 2

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.03

Тема дисертації:

1. Електронна сруктура, фізико-хімічні властивості та перегрупування сінглетних карбенів з супряженими зв'язками

2. .Electronic structure, physico-chemical properties and rearrangements of planar conjugated carbenes

Реферат/анотація:

1. У межах багатопараметричної теорії збурень розвинуто (або модифіковано) методики розпрахунків фізико-хімічні властивостей; проведено порівняльний аналіз цих величин та роз розрахованих у всевалентних методах, їх зіставлення з експериментом. Виявлено закономірності зміни термохімічних, електричних та магнітних властивостей від структури карбенів, що досліджуються. На підставі розрахунків наведених (-електронних струмів та відносних діамагнітних сприйнятливостей циклічні карбени та гетерокарбени віднесені до єдиної шкали ароматичності-антиароматичності органічних сполук. У межах індексного підходу Фукуї дано квантовохімічне трактування ряду реакцій електроциклізації та фотоелектроциклізації нафтил-карбенів,фенілкарбенів та ациклічних поліен-карбенів, проведено їх порівняльний аналіз.

2. Within the conjugated variant of the perturbation theory there have been developed design procedures of physico-chemical characteristics/ There have been revealed requlariteS of changing thermochemical, electrical and magnetic characteristics on the structure of the singlet carbenes studied. On the base calculations of relative

diamagnetic susceptibilities and induced (-electron currents the carbenes studied were related to a single scale of aromaticity-antiaromaticity of organic compounds. The rearrangements of planar conjugated carbenes were been described and compared in terms of the Fukui index approach.

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 Ю.Б.

2. .Висоцький Ю.Б.

Кваліфікація: д.х.н., 0.00.04

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. Лузанов А. В.

2. Лузанов А. В.

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 0.04.17

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. Рибаченко В. І

2. Рибаченко В. І

Кваліфікація: д.х.н., 0.00.04

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 А.Ф.

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Попов А.Ф.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.