Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U001501

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-04-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Святенко Людмила Костянтинівна
2. Svjatenko Ludmila Konstantinovna

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: 11-03-2005

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Кіровоградський державний університет ім.В.Винниченка

Код за ЄДРПОУ: 02125415

Місцезнаходження: 25000, Україна, м.Кропивницький, вул.Шевченка,1

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: 31.21.01

Тема дисертації:

1. Електронна структура і магнітне екранування ядер молекул епоксидів та олефінів аліциклічного ряду

2. The electronic structure and nuclear magnetic shielding of molecules of alicyclic epoxides and olefins

Реферат/анотація:

1. Об'єкт - епоксиди та олефіни аліциклічного ряду; мета - отримання нових даних про структуру, розподіл густини електронів, магнітні властивості епоксидів та олефінів аліциклічного ряду за допомогою теоретичних методів. Методи - для розрахунку хвильової функції використані наближення Хартрі-Фока, Мюллера-Плессета другого порядку і метод функціонала густини (функціонали PBE1PBE і B3LYP); величини хімічних зсувів розраховані методами "градієнтно-інваріантних атомних орбіталей" і "безперервного ряду трансформацій початку відліку"; вплив розчинника врахований методом континуума, що поляризується. Новизна - розроблено нові набори атомних базисних функцій. Встановлено закономірності залежності величин хімічних зсувів алі- і ациклічних епоксидів і олефінів від структури молекули. Ступінь впровадження - результати роботи використовуються для аналізу спектрів ЯМР епоксидних сполук, які синтезуються на кафедрі органічної хімії ДНУ в рамках держбюджетної наукової тематики, а також у навчальному процесі ДНУ при викладанні спеціальних дисциплін на кафедрах органічної та фізичної хімії.

2. The object is alicyclic epoxides and olefins; the aim to obtain new data about the structures, electron distributions, magnetic properties of alicyclic epoxides and olefins using theoretical methods. The Hartree-Foka, Mollera-Plesseta second level and density functional theory (PBE1PBE and B3LYP functionals) are methods for calculation of wave function; "gauge independent atomic orbital" and "continue set gauge transformation" are methods for calculation of the values of chemical shifts; the polarisation continue method is method for acount of solution effects. The new approach is development the new atomic basis sets. The regularity in change of chemical shifts of alicyclic epoxides and olefins on molecular structure have been established. Degree of application - the results the work use in analysis of NMR spectra of epoxidic compounds, which have been obtained at the organic chemistry department of DNU in the fild of state scientific themes, as well as in the special courses at the organic and physical chemistry departments of DNU.

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. Оковитий Сергій Іванович

2. Okovytyy Sergey Ivanovich

Кваліфікація: к.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. 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. Лузанов Анатолій Віталійович

2. Лузанов Анатолій Віталійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.17

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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.