Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0510U000219

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-03-2010

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Іванов Володимир Венедиктович
2. Ivanov Volodymyr Venedyktovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 04-03-2010

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: Україна, 61022, м. Харків, майдан Свободи,4

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: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: Україна, 61022, м. Харків, майдан Свободи,4

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.03

Тема дисертації:

1. Лінійні моделі та мультиреференсна теорія зв'язаних кластерів для заданого стану в проблемі багаточастинкових кореляцій у молекулах

2. Linear models and multireference state specific coupled cluster theory of many particle correlations in molecules

Реферат/анотація:

1. У рамках напівемпіричних і неемпіричних квантовохімічних підходів розроблено методики точного урахування ефектів електронних кореляцій у молекулярних системах. Розроблено та тестовано новий мультиреференсний метод теорії зв'язаних кластерів, який ураховує однократні та двократні збудження відносно всіх референсних детермінантів (CASCCSD). Розвинуто і програмно реалізовано напівемпіричну та ab initio методику FCI, що основана на "ітеративних просторах Крилова". Показано, що методика дозволяє ефективно розрахувати ряд станів та зовнішніх збурень молекул. З використанням розвинутого алгоритму FCI досліджено вплив пі-електронних багаточастинкових кореляційних ефектів на ряд дисперсійних констант. Зроблено висновок про ефективність FCI пі-електронного наближення при розрахунках частотно-залежних поляризовностей з урахуванням ефектів середовища за Кірквудом.

2. New methods capable of the exact account of electron correlation effects in molecules have been developed in the frameworks of both semiempirical and nonempirical quantum chemistry. The new multireference coupled cluster approach takes into account single and double excitations from all the reference determinants (CASCCSD). Efficient semiempirical and ab initio FCI approaches based on "iterative Krylov space" have been developed and implemented as a program code. They were shown to work well in calculating molecular states and external perturbations. Also the new FCI method has been used to examine the pi-electron correlation effects in calculations of dispersion constants. The FCI pi-electron method has been adapted for taking media effects into account using Kirkwood model and frequency-dependent polarizabilities calculations have been carried out to illustrate its potential.

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)

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лобанов Віктор Васильович
2. Лобанов Віктор Васильович

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. Дмитрук Олександр Філаретович
2. Дмитрук Олександр Філаретович

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. Качковський Олексій Дмитрович
2. Качковський Олексій Дмитрович

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.