Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0409U000842

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-03-2009

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лях Дмитро Іванович

2. Liakh Dmytro Ivanovich

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: 19-02-2009

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. Теорія зв'язаних кластерів у ab initio розрахунках поверхні потенційної енергії малих молекул

2. The coupled-cluster theory in ab initio calculations of potential energy surfaces for small molecules

Реферат/анотація:

1. Об'єкти дослідження: малі молекулярні системи як моделі для опису розриву/виникнення хімічних зв'язків. Мета дослідження: розробити на базі теорії зв'язаних кластерів ефективну методику розрахунку поверхонь потенційної енергії з хімічною точністю (? ккал/моль). Методи: мультиреференсна теорія зв'язаних кластерів, теорія конфігураційної взаємодії. Вивчено: динаміку зміни структури та складності хвильової функції при квантово-хімічному описі розриву/виникнення хімічного зв'язку. Запропоновано комплексний підхід, що дозволяє систематично будувати хвильову функцію, необхідну для коректного (з хімічною точністю) опису розриву/виникнення хімічного зв'язку. Ступінь впровадження: методики квантово-хімічного опису процесів розриву/виникнення хімічного зв'язку та побудови відповідних поверхонь потенційної енергії впроваджені в навчальний процес хімічного факультету Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна за спеціалізацією «Дизайн матеріалів і хімічна інформатика» в рамках курсу «Прикладна квантова хімія».

2. Investigation objects: small molecules as models for describing breaking/formation of chemical bonds. Purpose: to develop an effective approach for calculating potential energy surfaces with chemical accuracy (? kcal/mol) on the base of the coupled cluster theory. Methods: multireference coupled cluster theory, configuration interaction theory. Results: Dynamics of changing of wave function structure and complexity with respect to bond stretching has been studied. An effective approach for building a proper wave function has been suggested. The approach is capable for describing breaking/formation of chemical bonds with chemical accuracy. Application: the quantum-chemical approaches for modeling breaking/formation of chemical bonds and building appropriate potential energy surfaces have been adopted within the course “Applied Quantum Chemistry” at the department of chemistry of V.N. Karazin Kharkiv National University.

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. Іванов Володимир Венедиктович
2. Ivanov Volodymyr Venedyktovych

Кваліфікація: к.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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

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. 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.