Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U003785

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-07-2008

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ящук Людмила Борисівна

2. Yashchuk Lyudmila Borisovna

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: 08-07-2008

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Черкаський державний технологічний університет

Код за ЄДРПОУ: 05390336

Місцезнаходження: 18006, м. Черкаси, бульвар Шевченка, 460

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): Д26.190.01

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: Черкаський державний технологічний університет

Код за ЄДРПОУ: 05390336

Місцезнаходження: 18006, м. Черкаси, бульвар Шевченка, 460

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.29

Тема дисертації:

1. Спінові ефекти в молекулах кисню, озону та міжмолекулярних комплексах за участю кисню

2. Spin effects in the oxygen and ozone molecules and in collision complexes with molecular oxygen

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена з'ясуванню ролі спінових ефектів при формуванні інтенсивності заборонених переходів в молекулі кисню та посиленню цих переходів в комплексах зіткнень з молекулами He, H2, C2H4, C6H6. Вияснена роль спін-орбітальної взаємодії в розщепленні низькозбуджених термів молекули кисню, а також 3A2 стану молекули озону. Вперше запропоновані механізми формування інтенсивності забороненого c1Sigma u- - b1Sigma g+ переходу в ізольованій молекулі кисню і на підставі квантово-хімічних розрахунків оцінена його інтенсивність. Теорія формування інтенсивності заборонених за спіном переходів у молекулі кисню застосована для більшої кількості молекул в комплексах зіткнень. Оцінені інтенсивності смуги Вульфа в молекулі озону при використанні різних методів розрахунку, базисних наборів та активних просторів для конфігураційної взаємодії.

2. Dissertation is devoted to the finding the role of spin effects in the mechanisms of intensity borrowing for the forbidden transitions in the oxygen molecule and also in intensity enhancement of these transitions in the collision complexes with the He, H2, C2H4, C6H6 molecules. The role of spin-orbit coupling in zero-field splitting of low-

lying excited states of the oxygen molecule and of the 3A2 states of the ozone molecule is found out. The mechanisms of the forbidden c1Sigma u- - b1Sigma g+ transition intensity borrowing in the isolated oxygen molecule is proposed for the first time and its intensity is appraised on the ground of quantum-chemical calculations. The theory of intensity formation of the spin-forbidden transitions in the oxygen molecule is applied to number of molecules in the collision complexes. Intensities of the Wulf band in the ozone molecule are estimated with the use of different methods of calculation, basic sets and active spaces.

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. Мінаєв Борис Пилипович
2. Minaev Boris Filippovich

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гунько Володимир Мусійович

2. Гунько Володимир Мусійович

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. Герда Василь Іванович

2. Герда Василь Іванович

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.01

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 Кошечко Вячеслав Григорович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Кошечко Вячеслав Григорович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.