Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U003348

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-06-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Захаров Антон Борисович
2. Zakharov Anton Borisovich

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: 26-05-2016

Спеціальність за освітою: 8.070301

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

Тема дисертації:

1. Оптичні та нелінійно-оптичні властивості π-спряжених олігомерів в локальній теорії зв'язаних кластерів

2. Optical and non-linear optical properties of π-conjugated oligomers in local coupled cluster theory

Реферат/анотація:

1. Розроблено, програмно реалізовано (пакет HELIOS), та випробувано новий π-електронний квантово-хімічний підхід, що оснований на PPP варіанті нерелаксованого локального методу зв'язаних кластерів (cue-CCSD). Продемонстровано високу ефективність методу cue-CCSD при описі електронних (зарядовий розподіл, індекси реакційної здатності), оптичних (поляризовності, енергії електронних переходів) та нелінійно-оптичних (перші та другі гіперполяризовності) властивостей широкого ряду π-спряжених вуглеводнів (від квазіодновимірних систем до наносистем). Отримано граничні значення дипольних моментів, поляризовностей, перших та других гіперполяризовностей транс-полієнів, поліінів, конденсованих та неконденсованих поліфульвенів, полікаліценів, лінійних поліаценів, полібензоциклобутадієнів, полі(пара-хінодіметанів), поліфеніленвініленів та полістільбенів. Отримані граничні значення енергій найнижчого дозволеного електронного переходу для полієнів та поліфульвенів.

2. A new π-electron quantum-chemical approach basing on the PPP variant unrelaxed CCSD method and using the ideas of the local theory of electron correlation was developed (in HELIOS package) and tested. The high efficiency

of the developed cue-CCSD method describing electronic (charge distribution, indices of reactivity), optical (polarizability, energy of electronic transitions) and nonlinear optical effects (first and second hyperpolarizability) for wide range of π-conjugated hydrocarbons (from quasi- to nano) is demonstrated. The reliable limit values of polarizabilities, first and second hyperpolarizabilities for trans-polyenes, polyynes, condensed and non-condensed polyfulvenes, polycalicenes, linear polyacenes, polybenzocyclobutadienes, poly(p quinodimethanes), polyphenylenevinylenes and polystilbenes were obtained.

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 Vladymir Venedictovich

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. Стрижак Петро Євгенович

2. Стрижак Петро Євгенович

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. Степаньян Степан Григорович

2. Степаньян Степан Григорович

Кваліфікація: к.ф.-м.н., 01.04.14

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	Дорошенко Андрій Олегович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Дорошенко Андрій Олегович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.