

# 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  $\pi$ -спряжених олігомерів в локальній теорії зв'язаних кластерів
2. Optical and non-linear optical properties of  $\pi$ -conjugated oligomers in local coupled cluster theory

**Реферат:**

1. Розроблено, програмно реалізовано (пакет HELIOS), та випробувано новий  $\pi$ -електронний квантово-хімічний підхід, що оснований на PPP варіанті нерелаксованого локального методу зв'язаних кластерів (cse-CCSD). Продемонстровано високу ефективність методу cse-CCSD при описі електронних (зарядовий розподіл, індекси реакційної здатності), оптичних (поляризованості, енергії електронних переходів) та нелінійно-оптичних (перші та другі гіперполяризованості) властивостей широкого ряду  $\pi$ -спряжених вуглеводнів (від квазіодновимірних систем до наносистем). Отримано граничні значення дипольних моментів, поляризованостей, перших та других гіперполяризованостей транс-полієнів, поліінів, конденсованих та неконденсованих поліфульвенів, полікаліценів, лінійних поліаценів, полібензоциклобутадиєнів, полі(пара-хінодіметанів), поліфеніленвеніленів та полістільбенів. Отримані граничні значення енергій найнижчого дозволеного електронного переходу для полієнів та поліфульвенів.
2. A new  $\pi$ -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  $\pi$ -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 ОПВ:**

**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**

