Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U005050

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-12-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шевченко Євген Віталійович

2. Shevchenko Yevgen Vitaliyovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.02

Назва наукової спеціальності: Теоретична фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 20-12-2005

Спеціальність за освітою:

Місце роботи здобувача: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: 03143, вул.Метрологічна, 14-Б

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.191.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: вул. Метрологічна, буд.14-Б, м. Київ, Київська обл., 03143, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: 03143, вул.Метрологічна, 14-Б

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.03

Тема дисертації:

1. Кінетика неадіабатичних переходів у молекулярних системах з сильною релаксацією

2. The kinetics of nonadiabatic transitions in molecular systems with strong relaxation

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню квантової кінетики неадіабатичного донорно-акцепторного електронного переносу через молекулярний місток. Пропонується модель, що дозволяє в рамках спільного набору параметрів в умовах сильної релаксації провести одночасний опис як послідовного, так і суперобмінного механізмів переносу. Показано, що багатоекспоненційна кінетика процесу місткового електронного переносу може бути в деяких випадках зведена до одноекспоненційної. Показано, що кімнатних температурах, незважаючи на малу заселеність містка електроном, що переноситься, послідовний механізм є ефективнішим за суперобмін, якщо місток довший за 4-6 ланок. Для системи з регулярним містком отримані необхідні та достатні умови, за яких кінетика електронного переносу може вважатися одноекспоненційною та умови, за яких вклади двох механізмів у повну швидкість електронного переносу розділюються. Пояснено експерименти по дистанційній залежності швидкості електронного переносу. Пропонуються нові механізми суперобмінного двоелектронного переносу, прямий та повторний, та аналізуються умови домінування одного з цих механізмів.

2. The thesis deals with the study of quantum kinetics of nonadiabatic donor-acceptor electron transfer through a molecular bridge. The theory that allows to describe sequential as well as superexchange transfer pathways employing the closed set of parameters is proposed. For the bridges that consist of more than 4-6 units, it is shown that at room temperature a superexchange mechanism is superimposed by sequential one even at a very small bridge population. For systems with a regular bridge, the necessary and sufficient conditions at which the kinetics of electron transfer can be considered as a single-exponential one are obtained. Moreover, the conditions are obtained at which contributions to the electron transfer rate from the two mechanisms are independent. The experiments on the electron transfer rate distance dependence are explained. Two new mechanisms (direct and repeated) of superexchange two-electron transfer are proposed and the conditions at which one mechanism dominates over another one arespecified.

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. Петров Ельмар Григорович

2. Petrov Elmar Grygorovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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. Висоцький Володимир Іванович

2. Висоцький Володимир Іванович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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. Золотарюк Олександр Васильович

2. Золотарюк Олександр Васильович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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 Загородній Анатолій Глібович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Загородній Анатолій Глібович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.