Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0411U006570

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-11-2011

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кліменко Тетяна Олександрівна
2. Klimenko Tetyana Olexandrivna

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: 14-10-2011

Спеціальність за освітою: 8.070300

Місце роботи здобувача: Державна наукова установа "Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: 61001, Харків, пр. Леніна, 60

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 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: 31.15.15

Тема дисертації:

1. Електронно-збуджені та збурені стани молекул у теорії зв'язаних кластерів

2. Coupled-cluster theory of excited and perturbed electronic states

Реферат/анотація:

1. Об'єкт дослідження: двохатомні молекулярні системи: BH, FH, LiH, Li2, O2, пі-спряжені молекули. Мета дослідження - встановити переваги концепції фіксованого стану мультиреференсної теорії СС в розрахунках електронно-збуджених станів малих молекул на рівні експериментальної точності. Розробити напівемпіричний варіант теорії СС для вирішення проблеми врахування електронної кореляції при розрахунках параметрів збурення пі-спряжених систем електричним полем. Методи дослідження та апаратура - неемпіричні та напівемпіричні методи квантової хімії, програмний пакет GAMESS; програмний пакет CLUSTER; авторський програмний комплекс обробки чисельних даних ППЕ та розв'язання радіального рівняння Шредінгера (HERZBERG); авторський програмний комплекс розрахунку дипольних (гіпер)поляризовностей спряжених молекул у пі-електронному наближенні (пі-СС). Теоретичні і практичні результати - розроблено напівемпіричний варіант теорії зв'язаних кластерів для вирішення проблеми врахування електронної кореляції при розрахунках параметрів збурення пі-спряжених систем електричним полем. Розроблена методика ab initio розрахунку та аналізу поверхні потенціальної енергії двохатомних

систем забезпечує високоточне оцінювання спектральних характеристик молекул в основному та електронно-збуджених станах. Новизна - в чисельному та аналітичному вигляді отримано CASCCSD адіабатичні криві потенціальної енергії ряду двохатомних молекул для основного та збуджених електронних станів. Деталізовано метод заданого (фіксованого) стану в CASCCSD розрахунках електронно-збуджених станів малих молекул. Створено та протестовано програмний комплекс HERZBERG для аналітичної обробки чисельних даних ППЕ. Встановлено значну ефективність методу СС (в особливості в не релаксованому варіанті теорії) при дослідженні нелінійно-оптичних характеристик спряжених молекул. Створено відповідний програмний комплекс для пі-електронних розрахунків (пі-СС). Ступінь впровадження - упроваджено в учбовий процес. Сфера (галузь) використання - фізична хімія.

2. Object of study: diatomic molecular systems: BH, FH, LiH, Li2, O2, pi-conjugated molecules. The purpose of the study - set the advantages of the concept of a fixed state in CC multireference theory in calculations of electronically excited states of small molecules at the level of experimental accuracy. Develop a semi empirical version of the CC theory to solve the problem of electron correlation treatment in calculations of the parameter of pi-conjugated systems perturbation with electric field. Research methods and apparatus - ab initio and semi empirical methods of quantum chemistry, software package GAMESS; software package CLUSTER; author's software package of numerical data processing of PES and solutions of the radial Schrodinger equation (HERZBERG); author's software package for calculation of the dipole (hyper)polarizabilities of conjugated molecules in the pi-electron approximation (pi-CC). Theoretical and practical results - developed a semi empirical variant of coupled cluster theory for solving the problem of electron correlation treatment in calculations of the parameter of pi-conjugated systems perturbation with electric field. The developed ab initio method for calculation and analysis of the potential energy surface of diatomic systems provides highly accurate estimates of the spectral characteristics of molecules in the ground and electronically excited states. Novelty - a numerical and analytical forms of CASCCSD adiabatic potential energy curves for several diatomic molecules for the ground and electronically excited states were obtained. The method of the given (fixed) state CASCCSD calculations of electronically excited states of small molecules was detailed. Software package HERZBERG for analytical processing of the numerical curves of PES was created and tested. It was established significant efficacy of the CC (in particular, in the unrelaxed version of the theory) in the study of nonlinear-optical properties of conjugated molecules. It was created the appropriate software package for the pi-electron calculations (pi-CC). The degree of implementation - implemented in the educational process. Field (area) of use - physical chemistry.

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: 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. 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. Калугін Олег Миколайович

2. Калугін Олег Миколайович

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

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.