

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U001839

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-04-2008

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Яблочкова Катерина Сергіївна

2. Yablochkova Kateryna Serhiivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.05

Назва наукової спеціальності: Оптика, лазерна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 14-04-2008

Спеціальність за освітою: 8.091101

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.001.23

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, 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: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.31.26

Тема дисертації:

1. Вплив ангармонізму нормальних коливань на девіацію хімічного зв'язку молекул симетрії C₂, C_{2V}, C_{3V}.
2. Influence of anharmonicity of normal vibrations on the deviation of chemical bond in molecules of symmetry C₂, C_{2V}, C_{3V}.

Реферат:

1. Дисертація на здобуття наукового ступеню кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 - оптика, лазерна фізика. - Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, 2007.

Дисертація присвячена дослідженню девіації хімічного зв'язку молекул симетрії C₂, C_{2V}, C_{3V}. Для кожної з молекул розв'язано обернену спектральну задачу коливальної спектроскопії методом 3N матриць. В роботі запропоновано 2-ступеневе врахування ангармонізму нормальних коливань молекули. Встановлено, що кут девіації хімічного зв'язку залежить від напрямку та величини зміщення обраного атому. Отримані результати, слугують наочною трактовкою фізичних причин взаємозв'язку коливань у молекулі. Оцінено потенціальний бар'єр (бар'єр лінеаризації) та величину інверсійного подвоєння частот для деформаційних коливань молекул. Отримані величини інверсійного розщеплення для збуджених коливальних станів молекул

симетрії C_{2v} та C_{3v} перевищують 10^{-3} см $^{-1}$ і можуть бути зареєстровані за допомогою техніки спектральних досліджень. Зазначена обставина є важливою при інтерпретації обертально-коливальних спектрів цих молекул.

2. Thesis submitted for the scientific degree of Candidate of Sciences in Physics and Mathematics in specialty 01.04.05. – Optics, laser Physics. – Kyiv National Taras Shevchenko University, Kyiv, 2007. Present thesis studies deviation of the chemical bond molecules of symmetry C_2 , C_{2V} , and C_{3V} . A reverse spectral problem was solved by means of $3N$ matrix method in the anharmonic approximation. The account of anharmonicity was taken into consideration of two steps. The direction of chemical bond was found to depend both on magnitude and direction of the displacement. These findings constitute a convenient representation of the physical causes of the interaction of vibrations in a molecule. Potential barriers (barriers to linearity) through which molecules can tunnel through when undergoing deformation vibrations were estimated. The findings show that doubling is significant (exceeding 10^{-3} cm $^{-1}$) for the highly excited states of molecules and thus should be taken into account when interpreting ro-vibrational spectra of such objects.

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. Охріменко Борис Андрійович
2. Okhrimenko Borys Andriyovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

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. Маломуж Микола Петрович
2. Маломуж Микола Петрович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02, 01.04.12

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. Пучковська Галина Олександрівна
2. Пучковська Галина Олександрівна

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

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**

Куліш Микола Полікарпович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Куліш Микола Полікарпович

