Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0499U000615

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-10-2000

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бойченко Інна Віталіївна
2. Bojchenko Inna Vitaliyivna

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: 04-03-1999

Спеціальність за освітою: 070301

Місце роботи здобувача: Харківський державний університет

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: 61006, Харків, площа 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 державний університет

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: 61006, Харків, площа Свободи, 4

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.03

Тема дисертації:

1. Багаточастинкові ефекти в процесах електронного збудження і фотоіонізаціє p- оболонок супряжених органічних молекул

2. Many-body effects in the p-shell electron excitation and photoionization processes of conjugated organic molecules

Реферат/анотація:

1. Деталізовано загальну багаточастинкову теорію фотоіонізаціє p-оболонок і багато- фотонних pp* переходів в супряжених молекулах. Основні об'їкти теоріє, такі як дайсонівські спін-орбіталі (ДО) та єх узагальнення досліджено з позицій коваріантноє квантовоє хіміє. Зокрема, для ДО вперше повністю розв'язано задачу відокремлення спінових змінних і проведено конкретні розрахунки на засадах теоріє повноє конфігураційноє взаімодіє. Показано, що ДО з'являються також при вивченні міжмолекулярного переносу заряду та іонізаціє зіткненням за Пеннінгом. Запропоновано нову обчислювальну процедуру розрахунку реактивного поля, що дії на молекулу та єє іонні форми в діелектричному континуумі, і дано спрощені схеми оцінки поляризаційних внесків до іонноє сольватаціє супряжених катіон- радикалів.

2. The general many-body theory of the p-shell photoionization and multiphoton pp*-transitions in conjugated hydrocarbons is examined in detail. The main entities of the theory such as the Dyson spin-orbitals (DOs) and their

generalizations are investigated within the covariant quantum chemistry. Specifically, for these objects the spin separation procedure is first solved completely and some concrete p-systems are calculated at the full-CI level. It is shown that the some DOs make their appearance when treating intermolecular charge transfer or collisional ionization processes such as the Penning effect. A new computational procedure for the reaction field acting on a molecule or its ions in dielectric medium is proposed and some simplified schemes for estimating polarization contributions into ion solvation of the conjugated cation-radicals are suggested as well.

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. Лузанов А.В.
2. Лузанов А.В.

Кваліфікація: д.ф.-м.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. Купріївич В.А.

2. Купріївич В.А.

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. Педаш Ю.Ф.

2. Педаш Ю.Ф.

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Лебідь В.І.
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Лебідь В.І.
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.