

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0512U000449

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-06-2012

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Баб'юк Дмитро Петрович

2. Babyuk Dmytro Petrovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор 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: 30-05-2012

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Код за ЄДРПОУ: 02071240

Місцезнаходження: 58012, м. Чернівці, вул. Коцюбинського, 2

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: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Код за ЄДРПОУ: 02071240

Місцезнаходження: 58012, м. Чернівці, вул. Коцюбинського, 2

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. Нестационарні квантові методи в дослідженні адиабатичної реакційної динаміки бімолекулярних зіткнень у газовій фазі
2. Time-dependent quantum methods in a study of adiabatic reactive dynamics of bimolecular collisions in gaseous phase

Реферат:

1. Об'єкт дослідження: елементарний акт адиабатичної бімолекулярної хімічної реакції у газовій фазі, внутрішні стани молекул. Мета дослідження: у рамках квантового підходу розробити та програмно реалізувати нові методики і ефективні алгоритми з наступним їх застосуванням до вивчення адиабатичної реакційної динаміки реальних та модельних систем. Методи дослідження: метод хвильового пакету, метод розщепленого оператора, метод сіток, спектральний метод, дискретне представлення змінної (DVR), бомівський метод, метод квантових траєкторій, метод Монте-Карло, гібридний метод, метод функції покриття. Теоретичні і практичні результати: Реалізований у роботі МКТ у поєднанні із розробленим оригінальним методом функції покриття відкриває шлях до вивчення квантової хімічної динаміки бімолекулярних реакцій, в яких загальне число атомів більше чотирьох. Використання запропонованого

гамільтоніану шляху реакції для систем із великим числом ступенів вільності, в яких кривизни вищих порядків близькі до нуля, суттєво спрощує дослідження реакційної динаміки. Розроблений пакет програм на основі комбінованого методу придатний для дослідження динаміки будь-яких реагуючих систем "атом - двоатомна молекула" шляхом інкорпорації у нього відповідної ППЕ, одержаної з квантово-хімічних розрахунків. З отриманого результату можна прогнозувати можливість використання дослідженої системи у хімічному лазері. Новизна: Уперше квантовими методами розраховано перерізи реакцій заміщення гідрогену $H + HCl = HCl + H$, $H + DCl = HCl + D$ та відщеплення гідрогену $H + HCl = HH + Cl$, $H + DCl = HD + Cl$ з використанням найточнішої на сьогодні ППЕ для такої системи. Уперше відкрито істинну природу феномену динамічного тунелювання, що проявляється у коливальних модах деяких молекул. Використовуючи бомівський підхід до квантової теорії доведено, що динамічне тунелювання є лише прихованим видом бар'єрного тунелювання. Розроблено альтернативне формулювання гамільтоніану шляху хімічної реакції, що відрізняється від традиційного гамільтоніану значно простішою у ньому формою оператора кінетичної енергії. Уперше квантовим методом розраховано ймовірності реакцій для модельної системи, що містить 200 коливальних ступенів вільності. Уперше показано можливість застосування до реальної реакційної системи чистого методу квантових траєкторій без будь-яких наближень. Розроблено два оригінальні методи для подолання проблеми вузлів у МКТ: гібридний метод та метод функції покриття. Другий метод знайшов подальше застосування та розвиток у працях інших дослідників. Ступінь упровадження: Деякі програмні коди використовуються у виконанні курсових, дипломних та магістерських проектів студентами хімічного факультету Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича

2. Objects of research: an elementary act of adiabatic bimolecular chemical reactions in the gas phase, the internal states of molecules. The purpose of research: within the quantum approach to develop software and implement new methods and efficient algorithms, followed by their application to study the adiabatic reaction dynamics of real and model systems. Research methods: the wave packet method, split-operator, grid methods, spectral method, discrete variable representation (DVR), Bohmian method, the quantum trajectory method (QTM), Monte Carlo method, hybrid method, covering function method (CFM). Theoretical and practical results: The QTM combined with developed in the dissertation the CFM makes possible to study quantum dynamics of bimolecular chemical reactions in which the total number of atoms exceeds four. Using the proposed reaction path Hamiltonian for systems with large number of degrees of freedom in which higher-order curvature close to zero, simplifies the study of reaction dynamics. The developed software package based on the combined method is suitable for studying the dynamics of any reacting system "atom - diatomic molecule" by incorporating in it the appropriate potential energy surface (PES) obtained from quantum-chemical calculations. The result may predict the possibility of the studied system in chemical laser. Novelty: For the first time the reaction cross sections for the exchange $H + HCl = HCl + H$, $H + DCl = HCl + D$ and abstraction $H + HCl = HH + Cl$, $H + DCl = HD + Cl$ reactions by means of quantum methods using the most accurate PES has been calculated. For the first time the true nature of the dynamical tunneling phenomenon, which appears in vibrational modes of some molecules. Using Bohmian approach to quantum theory proved that dynamic tunneling is only hidden type of barrier tunneling. An alternative formulation of the reaction path Hamiltonian, which differs from the traditional Hamiltonian by much simpler form of the kinetic energy operator, has been developed. For the first time the reaction probabilities have been calculated for the model system with 200 vibrational degrees of freedom. For the first time the possibility of application of pure QTM without any approximations to real reactive systems has been shown. Two original methods have been developed for coping with the node problem in QTM: hybrid method and covering function method. The second method found further application and development in the works of other researchers. Degree of implementation: Some software codes are implemented in course, diploma and master students' projects at the chemistry department of Chernivtsi National University.

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. Нечипорук Василь Васильович

2. Nechyporuk Vasyl Vasylyovych

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. Іванов Володимир Венедиктович

2. Іванов Володимир Венедиктович

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. Лобанов Віктор Васильович

2. Лобанов Віктор Васильович

Кваліфікація: д.х.н., 01.04.18

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. Глушков Віталій Миколайович

2. Глушков Віталій Миколайович

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**

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.