

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U001462

Державний реєстраційний номер: 0117U004860

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-04-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Теоретичне прогнозування властивостей низько розмірних комплексних сполук перехідних металів

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (057)705 12 47, 705 12 48

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 340
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Новітні наноструктуровані багатофункціональні комплекси перехідних металів для електроніки і медицини

Назва роботи англійською:

The newest nanostructured multifunction complexes of transitional metals are for electronics and medicine

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - сильно корельовані багатеелектронні решіткові моделі типу моделей Гейзенберга та Хабарда, що придатні для адекватного опису особливостей магнітних характеристик квазіодновимірних матеріалів з магнітною підрешіткою типу ланцюжків та драбин - наноструктурованих магнітних матеріалів. Мета роботи - Розробка нових методів моделювання особливостей магнітних властивостей квазіодновимірних моделей наноструктурованих магнетиків на основі сполук перехідних металів. Експериментальний пошук нових низькорозмірних магнетиків на основі ІРС перехідних металів. Методи дослідження - спіновий формалізм методу валентних зв'язків, теорія збурень і ефективні низько енергетичні гамільтоніани, чисельні методи розв'язання задачі на власні значення, аналітичні методи квантової теорії твердого тіла. У роботі побудовані ефективні теоретичні моделі, що описують низько енергетичні стани комплексних сполук перехідних металів з магнітною підрешіткою типу ланцюжка і драбини. Синтезовані монокристали КРС бісетендитетратіофульвалену (ЕТ) з аніонами $[8,8'-\text{Hal}_2-3,3'-\text{Fe}(1,2-\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{10})_2]$; де Hal - Cl, Br, I; монокристали КРС (ЕТ) $[\text{Re}_2\text{Br}_8]$ та (ЕТ) $[\text{Re}_2\text{Br}_6(\text{CH}_3\text{COO})] \cdot 0,5\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$. Для даних сполук визначена будова, провідні та магнітні властивості.

Реферат англійською:

The object of the study is strongly correlated multi-electron lattice models of the Heisenberg and Hubbard models that are suitable for an adequate description of peculiarities of the magnetic characteristics of quasi-one-dimensional materials with magnetic sublattices of ladder and chain type (nanostructured magnetic materials). Purpose - development of new methods for modeling the features of magnetic properties of quasi-one-dimensional models of nanostructured magnets on the basis of transition metal compounds. Experimental search for new low-dimensional magnetism based on IRS of transition metals. Methods of investigation are the spin formalism of the valence bond method, the perturbation theory and effective low energy Hamiltonians; numerical methods for solving the eigenvalue problem, analytical methods of quantum solid state theory. In this work, we construct effective theoretical models that describe the low-energy states of complex compounds of transition metals with magnetic sublattices of ladder and chain type. Synthesized single crystals of catalytic converters of bisethylenediotetraphyllulan (ET) with anions $[8,8'-\text{Hal}_2-3,3'-\text{Fe}(1,2-\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{10})_2]$; where Hal is Cl, Br, I; single crystals of CRC (ET) $[\text{Re}_2\text{Br}_8]$ and (ET) $[\text{Re}_2\text{Br}_6(\text{CH}_3\text{COO})] \cdot 0.5 \text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$. For these compounds, the structure, conductivity and magnetic properties are determined.

Індекс УДК: 621.38.01, 541.8

Коди тематичних рубрик: 47.03

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Черановський Владислав Олегович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Новітні наноструктуровані багатофункціональні комплекси перехідних металів для електроніки і медицини

Назва НТП англійською: The newest nanostructured multifunction complexes of transitional metals are for electronics and medicine

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У роботі побудовані ефективні теоретичні моделі, що описують низько енергетичні стани комплексних сполук перехідних металів з магнітною підрешіткою типу ланцюжка і драбини. Синтезовані монокристали КРС бісетилентитотетратіофульвалену (ЕТ) з аніонами $[8,8'-\text{Hal}_2-3,3'-\text{Fe}(1,2-\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{10})_2]$; де Hal - Cl, Br, I; монокристали КРС (ЕТ) $[\text{Re}_2\text{Br}_8]$ та (ЕТ) $[\text{Re}_2\text{Br}_6(\text{CH}_3\text{COO})] \cdot 0,5\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$. Для даних сполук визначена будова, провідні та магнітні властивості.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2019-2020 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ВНЗ України

Перспективні ринки: -

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Ground state spin of Hubbard ladder model with infinite electron repulsion / V.O. Cheranovskii, D.J. Klein, E.V. Ezerskaya, and V.V. Tokarev // Acta Physica Polonica A - 2017. -V.131- P.916-918. 2. Lowest energy states of

Hubbard ladder model with infinite electron repulsion / V.O. Cheranovskii, D.J. Klein, E.V. Ezerskaya, and V.V. Tokarev // Comput. Theor. Chemistry - 2017. -V.1116- P.112-116. 3. Finite size effects in anisotropic U=? Hubbard ladder rings / V.O. Cheranovskii, D.J. Klein, E.V. Ezerskaya, and V.V. Tokarev // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism -2017. - <https://doi.org/10.1007/s10948-017-4323-y> 4. Validity of t-J approximation for extended Hubbard model with strong repulsion / V.O. Cheranovskii, D.J. Klein, E.V. Ezerskaya, and V.V. Tokarev // Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur -2017. -V. 43- P.1622-1625

Х. Заключение відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

д. ф.-м. н., 01.04.03, 03.00.02

Перелік осіб-виконавців

Букриньов О

Вітушкіна Світлана Василівна

(к. х. н., 02.00.04)

Звягін Анатолій Іванович

(д. ф.-м. н.)

Комихов С.

Кравченко А.

Кравченко О.

Краснопольова А.

Нікітіна А.

Токарев В.

Чебанов В.

Черановський В

Чудак Д.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

