

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U000925

Державний реєстраційний номер: 0121U109813

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Експериментальне та теоретичне дослідження провідних та магнітних властивостей отриманих іон-радикальних солей

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Остаточний 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: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380577051247

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, буд. 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.): 300.000
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Координаційні сполуки та графенові нанокластери як компоненти новітніх багатофункційних матеріалів для вітчизняної електроніки і екологічної безпеки

Назва роботи англійською:

Coordination compounds and graphene nanoclusters as components of the latest multifunctional materials for domestic electronics and environmental safety

Реферат українською:

Мета роботи: експериментальне та теоретичне дослідження низьковимірних координаційних сполук перехідних металів, іон-радикальних солей органічних комплексонів гетерокумуленового та споріднених типів, а також графенових нанокластерів з вбудованими гетероатомами з метою подальшого створення на їх основі новітніх багатофункціональних матеріалів; пошук нових ефективних адсорбентів для вилучення радіонуклідів з об'єктів навколишнього середовища на основі сполук, що досліджуються. Вперше методом електрокристалізації було синтезовано катіон-радикальні солі (TMTTF)[3,3'-Cr(1,2-C₂B₉H₁₀)₂], (TMTTF)[3,3'-Fe(1,2-C₂B₉H₁₀)₂] та (TMTSF)₂[3,3'-Cr(1,2-C₂B₉H₁₀)₂], досліджено їх структуру та провідні властивості. Синтезовані нові координаційні сполуки Купруму(II) та Кобальту (II) та досліджена їх кристалічна структура. Запропоновані фрустровані спінові моделі періодичних ланцюжкових магнетиків, які не мають щілини в енергетичному спектрі навіть у випадку парної кількості спінів на елементарну комірку. За допомогою методу ренорм-групи у формалізмі матриці щільності та квантового методу Монте-Карло показано існування проміжного плато у профілю намагніченості

Реферат англійською:

The purpose of the work: experimental and theoretical research of low-dimensional coordination compounds of transition metals, ion-radical salts of organic complexons of heterocumulene and related types, as well as graphene nanoclusters with embedded heteroatoms with the aim of further creating the newest multifunctional materials based on them; search for new effective adsorbents for the removal of radionuclides from environmental objects based on the compounds under study. For the first time, radical cation salts (TMTTF)[3,3'-Cr(1,2-C₂B₉H₁₀)₂], (TMTTF)[3,3'-Fe(1,2-C₂B₉H₁₀)₂] and (TMTSF)₂[3,3'-Cr(1,2-C₂B₉H₁₀)₂], their structure and conductive properties were investigated. New coordination compounds of Copper (II) and Cobalt(II) were synthesized and their crystal structure was investigated. Frustrated spin models of periodic chain magnets are proposed, which do not have a gap in the energy spectrum even in the case of an even number of spins per unit cell. Using the renormalization group method in the formalism of the density matrix and the quantum Monte Carlo method, the existence of an intermediate plateau in the magnetization profile of composites based on graphene clusters and complex compounds of transition metals is shown.

Індекс УДК: 544 , 541.8

Коди тематичних рубрик: 31.15

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: експериментальне та теоретичне дослідження низьковимірних координаційних сполук перехідних металів, іон-радикальних солей органічних комплексонів гетерокумуленового та споріднених типів, а також графенових нанокластерів з вбудованими гетероатомами з метою подальшого створення на їх основі новітніх багатофункціональних матеріалів; пошук нових ефективних адсорбентів для вилучення радіонуклідів з об'єктів навколишнього середовища на основі сполук,

Назва НТП англійською: The purpose of the work: experimental and theoretical research of low-dimensional coordination compounds of transition metals, ion-radical salts of organic complexons of heterocumulene and related types, as well as graphene nanoclusters with embedded heteroatoms with the aim of further creating the newest multifunctional materials based on them; search for new effective adsorbents for the removal of radionuclides from environmental objects based on the compounds under study.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Фізична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Вперше методом електрокристалізації було синтезовано катіон-радикальні солі (TMTTF)[3,3'-Cr(1,2-C₂B₉H₁₀)₂], (TMTTF)[3,3'-Fe(1,2-C₂B₉H₁₀)₂] та (TMTSF)₂[3,3'-Cr(1,2-C₂B₉H₁₀)₂], досліджено їх структуру та провідні властивості. Синтезовані нові координаційні сполуки Купруму(II) та Кобальту (II) та досліджена їх кристалічна структура. Запропоновані фрустровані спінові моделі періодичних ланцюжкових магнетиків, які не мають щілини в енергетичному спектрі навіть у випадку парної кількості спінів на елементарну комірку. За допомогою методу ренорм-групи у формалізмі матриці щільності та квантового методу Монте-Карло показано існування проміжного плато у профілю намагніченості композитів на основі кластерів графену та комплексних сполук перехідних металів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції:

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

Cheranovskii V.O., Slavin, V.V. , Klein, D.J. Quantum phase transitions in frustrated 1D Heisenberg spin systems. Low Temperature Physics. 2021, 47, №6. 443-448. DOI: 10.1063/10.0004965

Cheranovskii V.O., Slavin, V.V. , Klein, D.J. Quantum phase transitions in 1D Heisenberg spin systems. Int. J. Quantum Chemistry. 2021, 121, №5. e26498. DOI: 10.1002/qua.26498.

Slavin, V. V. and Cheranovskii, V. O. Magnetic properties of 1D spin systems with compositional disorder of three-spin structural units. Zeitschrift für Naturforschung B. 2021 V. 76. No. 10-12., P. 797-802.
<https://doi.org/10.1515/znb-2021-0133>

Cheranovskii V.O., Ezerskaya E.V., Kabatova A.O., The energy spectrum and low-temperature magnetic properties of the decorated two-leg mixed spin ladder // Low Temperature Physics, 2023, 49, №4, C.438-442, DOI: <https://doi.org/10.1063/10.0017584>

Sakhno Ya.I., Radchenko O.V., Muravyova E.A., Sirko S.M., Shishkina S.V., Musatov V.I., Desenko S.M., Chebanov V.A. Synthesis of Isoxazolylypyrrolones by Three-component Reactions of α -Ketoglutaric Acid or Its Diethyl Ester with 3-Amino-5-methylisoxazole and Aromatic Aldehydes // Chemistry of Heterocyclic Compounds, 2021, 57, 261-265. DOI: 10.1007/s10593- 021-02902-w

Mazur M.O., Zhelavskiy O.S., Zviagin E.M., Shishkina S.V., Musatov V.I., Kolosov M.A., Shvets E.H., Andryushchenko A.Yu., Chebanov V.A. Effective Microwave-Assisted Approach to 1,2,3-triazolobenzodiazepinones via Tandem Ugi-Reaction / Catalyst-Free Intramolecular Azide- Alkyne Cycloaddition // Beilstein Journal of Organic Chemistry, 2021, 17, 678-687. DOI: 10.3762/bjoc.17.57

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Вітушкіна Світлана Василівна

(к. х. н., 02.00.04)

Звягін Андрій Анатолійович

Звягін Андрій Анатолійович

Кравченко Олексій Андрійович

(к. х. н.)

Краснопьорова Алла Петрівна

(к. х. н., 02.00.04)

Чебанов Валентин Анатолійович

(к.х.н., 02.00.03)

Черановський Владислав Олегович

(д. ф.-м. н., 01.04.07)

Юхно Галина Дмитрівна

(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку

Собран Н.

облікових документів

Телефон

+38 (066) 803-49-28

Реєстратор

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

