# Облікова картка ДіР

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0215U007739

**Державний реєстраційний номер:** 0112U007569

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 12-01-2016

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 1

**Назва етапу:** Теоретичне моделювання електронної будови і магнітніх властивостей квазіодновимірних сполук перехідних метадів і вуглецевих нанотрубок

**Початок етапу:** 01.2013

**Закінчення етапу:** 12.2015

**Вид звітного 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:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 705 12 47, (057)705 02431

## IV. Відомості про співвиконавців ДіР

## V. Відомості про замовника ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

**Код за ЄДРПОУ:** 00027677

**Місцезнаходження:** пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 0442048428

## 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)

**Напрям фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

#### 7713 - кошти держбюджету

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 2201020

| |
|---|
| **Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):** 708 |

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Теоретичне моделювання електронної будови і магнітніх властивостей квазіодновимірних сполук перехідних метадів і вуглецевих нанотрубок

### Назва роботи англійською:

Theoretical modeling of the electron structure and magnetic properties quasi-one-dimensional transition metal compounds carbon nanotubes

### Реферат українською:

Предмет дослідження: особливості магнітних характеристик квазіодновимірних матеріалів типу фрустрованих спінових спінових драбин та ферімагнітних нанотрубок, які можуть знайти застосування у електронних і спінтронних пристроях. Об'єкт дослідження: сильно корельовані багатоелектронні решіткові моделі типу моделей Гейзенберга та Хабарда, що придатні для адекватного опису низькоенергетичних станів квантовохімічних гамільтоніанів наноструктурованих матеріалів.Мета роботи - Розробка нових методів моделювання особливостей магнітних та електричних характеристик фрустрованих квазіодновимірних моделей наноструктурованих магнетиків на основі сполук перехідних металів. Зокрема, у роботі побудовані ефективні спінові моделі, що адекватно описують низькотемпературні магнітні властивості комплексних сполук (N-Me-2,6-di-Me-Py)(TCNQ)2. і [Mn(phen) 3](TCNQ)2 ·H2O - нових квазіодновимірних магнетиків. З метою дослідження впливу акцепторних домішок на магнітні стани фрустрованих магнетиків, був проведений аналіз точного енергетичного спектру моделі Хабарда з нескінченим відштовхуванням на деформованих діамантовому і квазі-діамантовому ланцюжках. За допомогою розробленого у попередніх дослідженнях методу cue-CCSD обчислена друга гіперполяризовність низки великих ?-спряжених олігомерів. Запропонований новий підхід до розрахунку поверхні потенційної енергії у рамках методу зв'язаних кластерів.Розраховано температурну та магнітопольову поведінку швидкості та поглинання звукових хвиль в магнітних фрустрованих системах в стані спінового льоду Dy2Ti2O7 та Ho2Ti2O7. Запропоновано новий сценарій появи Майоранових крайових станів топологічних надпровідників з сильною спін-орбітальною взаємодією в зовнішньому магнітному полі.

### Реферат англійською:

The object of study: Manyelectron strongly correlated lattice models such as Hubbard and Heisenberg models suitable for an adequate description of the low-energy states of the quantum Hamiltonians of nanostructured materials.Purpose is to develop new methods of modeling features of magnetic and electrical characteristics of frustrated quasi-models of nanostructured magnetic materials based on transition metal compounds.In particular, the effective spin models, adequately describing the low-temperature magnetic properties of complex compounds (N-Me-2,6-di-Me-Py) (TCNQ)2 and [Mn (phen)3] (TCNQ)2 o H2O - new quasi-magnets, were proposed in this work. In order to study the effect of acceptor impurities on the magnetic states of frustrated magnets, we analyzed the exact energy spectrum of the Hubbard model with infinite repulsion on the deformed diamond and quasi-diamond chains.Using the developed method in previous studies cue-CCSD calculated second hyper-polarizability of some large ?-conjugated oligomers. A new approach to the calculation of the potential energy surface in the framework of the coupled cluster was proposed. Temperature and field behavior of the velocity and absorption of sound waves in magnetic frustrated systems in the spin ice Dy2Ti2O7 and Ho2Ti2O7 were calculated. A new scenario of the appearance of Majorana edge states of topological superconductors with strong spin-orbit interaction in external magnetic field was proposed.

**Індекс УДК:** 544, 541.1+524.5+524.3

**Коди тематичних рубрик:** 31.15

**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:** Теорія моделювання електронної будови і магнітніх властивостей квазіодновимірних сполук перехідних метадів і вуглецевих нанотрубок

**Назва НТП англійською:** Theoretical modeling of the electron structure and magnetic properties quasi-one-dimensional transition metal compounds carbon nanotubes

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:**

**Галузь застосування:** 73.10.0 Дослідження та розробки в галузі природничих та технічних наук

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Розробка нових методів моделювання особливостей магнітних та електричних характеристик фрустрованих квазіодновимірних моделей наноструктурованих магнетиків на основі сполук перехідних металів.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:**

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 2016-2018 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 обгрунтування:**

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## IX. Бібліографічний опис

1.Zvyagin A.A. Pulse dynamics of quantum systems with pairing / A.A. Zvyagin // Phys. Rev. B. 2015. V. 92, No.18. 184507 (8 c) 2. Zvyagin A.A., Magnetization of a quantum spin system induced by a linear polarized laser / A.A. Zvyagin // Phys. Rev. B. 2015. V.92, No. 5. 054405 (6 c).

## X. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи** Катрич Віктор Олександрович

**Перелік осіб-виконавців**

Іванов В.

В'юник В.

Вітушкіна С.

Захаров А.

Звягін А.

Кравченко О.

Кузнецова Т

Лукащук Т.

Токарев В.

Черановський В.

**Відповідальний за підготовку облікових документів**

**Телефон**

**Реєстратор**

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