

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U100878

Державний реєстраційний номер: 0117U004860

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-03-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Теоретичне та експериментальне дослідження провідних і магнітних властивостей іон-радикальних солей перехідних металів.

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

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: 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

Розмір організації:

Телефон: 0577051247

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 - низькорозмірні магнетики на основі іон-радикальних сполук перехідних металів. Мета роботи - Синтез нових іон-радикальних солей з електричними та магнітними характеристиками чутливими до змін у навколишньому середовищі. Методи дослідження - електросинтез, рентгеноструктурний аналіз, резистивні виміри, Раман та ЕСР спектроскопія, спіновий формалізм методу валентних зв'язків, аналітичні методи квантової теорії твердого тіла. Синтезовані нові іон-радикальні похідні на основі тетратіофульвалена та досліджені їх будова і фізико-хімічні характеристики. Отримано п'ять нових змішано-лігандних комплексів Cu(II) та Co(II) на основі псевдогалогенідних лігандів (диціанаміду, нітрозодиціанметаніду та азид аніонів) та N-донорних лігандів (2-(2-піридил)бензімідазолу, 4-аміно-3,5-біс(піридин-2-іл)-1,2,4-триазолу та 2,2'-біхіноліну). Дослідження кристалічної структури координаційних сполук показало що структури стабілізується за допомогою π - π взаємодій та водневих зв'язків, як внутрішньо- так і міжмолекулярних. Для фрустрованого ланцюгового магнетика сформованого з трикутних графітних кластерів показано, що зростання величини фрустрованих взаємодій призводить до стрибкоподібного зменшення спіну основного стану магнетика на макроскопічну величину. Теоретично розраховано відгук квантового спінового ланцюжка на альтерноване змінне магнітне поле. Показано, що для закритої системи магнітні характеристики та характеристики сплутаності (важливі для квантових комп'ютерів) осцилюють з частотою зовнішнього змінного поля та з частотою типу Рабі. Запропоновано метод, що дозволяє систематично конструювати магнетики з заданими властивостями нижньої частини енергетичного спектру у наближенні лінійних спінових хвиль.

Реферат англійською:

The object of research is low-dimensional magnets based on ionic radical compounds of transition metals. Purpose - Synthesis of new ion-radical salts with electrical and magnetic characteristics sensitive to changes in the environment. Methods of research - electrosynthesis, X-ray diffraction analysis, resistive measurements, Raman and ESP spectroscopy, spin formalism of the valence bond method, analytical methods of quantum solid state theory. New ion-radical derivatives based on tetrathiofulvalene have been synthesized and their structure and physical and chemical characteristics have been studied. Five new mixed-ligand complexes Cu (II) and Co (II) were obtained on the basis of pseudohalide ligands (dicyanamide, nitrozodicyanmethane and azide anions) and N-donor ligands (2- (2-pyridyl) benzimidazole, 4-amino-3, 5-bis (pyridin-2-yl) -1,2,4-triazole and 2,2'-bichinolin). Investigation of the crystalline structure of coordination compounds showed that the structures are stabilized by π - π interactions and hydrogen bonds, both internally and intermolecular. For a frustrated chain magnet formed by triangular graphite clusters, it is shown that the growth of the magnitude of frustrated interactions leads to a jump-like decrease of the ground state spin of a magnet on a macroscopic value. The response of a quantum spin chains to an alternating magnetic field is calculated theoretically. It is shown that for a closed system, the magnetic characteristics and characteristics of the confusion (important for quantum computers) are oscillated with the frequency of the external alternating field and the frequency of the Rabi type. A method is proposed that systematically construct magnetics with given properties of the lower part of the energy spectrum in the approximation of linear spin waves.

Індекс УДК: 539.2;538.9-405;548, 541.8

Коди тематичних рубрик:29.19

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: Звіт про НДР

Назва НТП англійською:

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезовані нові іон-радикальні похідні на основі тетратіофульвалена та досліджені їх будова і фізико-хімічні характеристики. Отримано п'ять нових змішано-лігандних комплексів Cu(II) та Co(II) на основі псевдогалогенідних лігандів. Для фрустрованого ланцюгового магнетика сформованого з трикутних графітних кластерів показано, що зростання величини фрустрованих взаємодій призводить до стрибкоподібного зменшення спіну основного стану магнетика на макроскопічну величину. Теоретично розраховано відгук квантового спінового ланцюжка на альтерноване змінне магнітне поле. Показано, що для закритої системи магнітні характеристики та характеристики сплутаності (важливі для квантових комп'ютерів) осцилюють з частотою зовнішнього змінного поля та з частотою типу Рабі. Запропоновано метод, що дозволяє систематично конструювати магнетики з заданими властивостями нижньої частини енергетичного спектру у наближенні лінійних спінових хвиль.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Споживачі продукції: ВНЗ України

Перспективні ринки: ВНЗ України

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Синтез та властивості низькорозмірних магнетиків на основі APC

(Me)_x(TCNQ)_y. нові низькорозмірні напівпровідники та магнетики та основи іон-радикальних солей; нові методики ефективного теоретичного прогнозування будови та термодинамічних характеристик квазіодновимірних матеріалів типу іон-радикальних солей та комплексів перехідних металів.

Назва НТП англійською: Synthesis and properties of low-dimensional ARC (Me)_x(TCNQ)_y based magnets. new low-dimensional semiconductors and magnets and ion-radical salts; New methods for effective theoretical prediction of the structure and thermodynamic characteristics of quasi-one-dimensional materials such as ion-radical salts and transition metal complexes. R & D report

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезовані нові іон-радикальні похідні на основі тетратіофульвалена та досліджені їх будова і фізико-хімічні характеристики. Отримано п'ять нових змішано-лігандних комплексів Cu(II) та Co(II) на основі псевдогалогенідних лігандів. Для фрустрованого ланцюгового магнетика сформованого з трикутних графітних кластерів показано, що зростання величини фрустрованих взаємодій призводить до стрибкоподібного зменшення спіну основного стану магнетика на макроскопічну величину. Теоретично розраховано відгук квантового спінового ланцюжка на альтерноване змінне магнітне поле. Показано, що для закритої системи магнітні характеристики та характеристики сплутаності (важливі для квантових комп'ютерів) осцилюють з частотою зовнішнього змінного поля та з частотою типу Рабі. Запропоновано метод, що дозволяє систематично конструювати магнетики з заданими властивостями нижньої частини енергетичного спектру у наближенні лінійних спінових хвиль.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Споживачі продукції: ВНЗ України

Перспективні ринки: ВНЗ України

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович
д. ф.-м. н., 01.04.03, 03.00.02

Перелік осіб-виконавців

Вітушкіна Світлана Іванівна
(к. х. н.)

Звягін Андрій Федорович

Кравченко Андрій Євгенович
(к. філол. н., 10.01.01)

Чебанов Валентин Анатолійович
(д. х. н., 02.00.03)

Черановський Владислав Олегович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Собран Наталія Валентинівна

Телефон

+38 (066) 803-49-28

Реєстратор

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

