

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U001761

Державний реєстраційний номер: 0121U109813

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез нових іон-радикальних сполук перехідних металів. Розробка нових методів теоретичного моделювання термодинамічних властивостей наноманетиків.

Початок етапу: 04.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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, 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.): 494.645
--

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 – Синтез нових іон-радикальних солей з електричними та магнітними характеристиками чутливими до змін у навколишньому середовищі. Методи дослідження – електросинтез, рентгеноструктурний аналіз, резистивні виміри, спіновий формалізм методу валентних зв'язків, аналітичні методи квантової теорії твердого тіла. 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. Вперше синтезовано сорбційний матеріал на основі гідролізованого лігніну, модифікований 30% частинок MnO(OH). Запропоновані фрустровані спінові моделі періодичних ланцюжкових магнетиків, які не мають щілини в енергетичному спектрі навіть у випадку парної кількості спінів на елементарну комірку. Запропоновано методику, що дозволяє систематично конструювати магнетики з заданими властивостями нижньої частини енергетичного спектру у наближенні лінійних спінових хвиль та магнітні нанокластери з близькими значеннями нижньої частини точного енергетичного спектру.

Реферат англійською:

Research methods - electrosynthesis, X-ray diffraction analysis, resistive measurements, spin formalism of the valence bond method, analytical methods of quantum solid state theory. For the first time, cation-radical 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] were synthesized by electrocrystallization. Their structure and conductive properties were studied. Sorption material based on hydrolyzed lignin modified with 30% of MnO(OH) particles was synthesized for the first time. Frustrated spin models of periodic chain magnets were proposed, which do not have a gap in the energy spectrum even in the case of an even number of spins per unit cell. A technique is proposed that allows to systematically design magnets with given properties of the lower part of the energy spectrum in the approximation of linear spin waves and magnetic nanoclusters with similar values of the lower part of the exact energy spectrum.

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: Синтез нових іон-радикальних солей з електричними та магнітними характеристиками чутливими до змін у навколишньому середовищі.

Назва НТП англійською: Synthesis of new ion-radical salts with electric and magnetic characteristics sensitive to changes in the environment.

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 і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: 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. Вперше синтезовано сорбційний матеріал на основі гідролізного лігніну, модифікований 30% частинок MnO(OH).

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: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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

Chudak, D. M.; Kazheva, O. N.; Kosenko, I. D.; Shilov, G. V.; Sivaev, I. B.; Abashev, G. G.; Shklyayeva, E. V.; Buravov, L. I.; Pevtsov, D. N.; Starodub, T. N.; Bregadze, V. I.; Dyachenko, O. A. New Radical-Cation Salts Based on the TMTTF

and TMTSF Donors with Iron and Chromium Bis(Dicarbollide) Complexes: Synthesis, Structure, Properties. Crystals 2021, 11 (9), 1118. <https://doi.org/10.3390/cryst11091118>.

Kliuikov A., Bukrynov O., Čížmar E., Vahovska L., Vitushkina S., Samolova E., Potočňák I.. Syntheses, structures and magnetic properties of two isostructural dicyanamide-bridged 2D polymers. New Journal Chemistry, 2021, 45, 7117–7128. DOI: 10.1039/d1nj00726b

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

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 Isoxazolylpyrrolones 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

Zviagin E., Saraev V., Sysoiev D., Klepetářová D., Mazur M., Zhelavskiy O., Shliapkina Yu., Müller Th.J.J., Chebanov V. Synthesis of 1-(3-(1-substituted-1,2,3-triazol-4-yl)-1,2,4-triazol-5-yl)-tetrazoles by sequential assembly of azole fragments. Chemistry Select, 2021, 6, 12890–12894

Chebanov V.A., Desenko S.M., Lipson V.V., Gorobets N.Yu. Multicomponent-switched reactions in synthesis of heterocycles. Multicomponent Reactions towards Heterocycles: Concepts and Applications (Eds.: E.V. Van der Eycken, U.K. Sharma), Wiley-VCH, Weinheim, Germany 2021, 287–338

О.І. Збруєв, Н.О. Пінчукова, В.Є. Сараєв, Д.Ю. Мяснікова, Г.С. Власенко, Ю.В. Шляпкіна, Є.В. Євтушенко, В.А. Чебанов Супрамолекулярний комплекс 1- метилциклопрепену з кукурбіт[6]урилом як ефективний засіб обробки яблук. Нові функціональні речовини і матеріали хімічного виробництва, ВД «Академперіодика» НАН України, 2021, с. 26 – 38

О.І. Збруєв, Н.О. Пінчукова, В.Є. Сараєв, Д.Ю. Мяснікова, Г.С. Власенко, Ю.В. Шляпкіна, Є.В. Євтушенко, В.А. Чебанов Супрамолекулярний комплекс 1- метилциклопрепену з кукурбіт[6]урилом як ефективний засіб обробки яблук. Нові функціональні речовини і матеріали хімічного виробництва, ВД «Академперіодика» НАН України, 2021, с. 26 – 38

Cheranovskii V.O., Slavin, V.V. , Klein, D.J. Quantum phase transitions in frustrated 1D Heisenberg spin systems. Фізика низьких температур 2021, 47 №6, С. 477–482. DOI: 10.1063/10.0004965

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Вітушкіна Світлана Іванівна

(к. х. н.)

Звягін Анатолій Іванович

(д. ф.-м. н.)

Кравченко Олексій Андрійович

(к. х. н.)

Краснопьорова Ала Петрівна

(к. х. н.)

Чебанов Валентин Анатолійович

(к.х.н., 02.00.03)

Черановський Владислав Олегович

(д. ф.-м. н., 01.04.07)

Юхно Галина Дмитріївна

(к.х.н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Собран Н.В.

Телефон

+38 (066) 803-49-28

Реєстратор

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

