Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101539

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Токарєв Віктор Володимирович
2. Tokarev Victor V

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 29-04-2021

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: 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

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.051.14

Повне найменування юридичної 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

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної 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

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Квантово-хімічне моделювання магнітних властивостей квазіодновимірних магнетиків на основі сполук перехідних металів

2. Quantum-chemical simulation of magnetic properties of quasionedimensional magnets based on transition metal compounds

Реферат/анотація:

1. Роботу присвячено теоретичному дослідженню впливу структурних параметрів на магнітні властивості квазіодновимірних комплексних сполук перехідних металів з використанням ефективних гамільтоніанів квантовохімічного методу валентних зв'язків, розвитку і перевірці наближених методів моделювання низькотемпературних магнітних властивостей та нижньої частини енергетичного спектра цих сполук. Показано, що для моделі Хабарда з U ~1 на одновимірних фрагментах прямокутної решітки шириною n чергування донорів та акцепторів уздовж решітки збільшує стійкість основного стану з максимальним спіном відносно збільшення взаємодії між елементарними комірками при електронній густині n. Побудовано модифіковану поляронну теорію, що пояснює залежність зміни спіну основного стану моделі Хабарда з U ~ 1 на фрагментах з відкритими та періодичними граничними умовами при збільшенні взаємодії елементарних комірок та від розміру фрагмента. Для одновимірної двозонної моделі Хабарда з U À t показано, що

неврахування скорельованого руху електронів в ефективній t J моделі приводить до неправильного опису симетрії основного та нижніх збуджених рівнів скінченних циклічних фрагментів. Показано, що модель Ізінга адекватно відтворює термодинамічні властивості одновимірних біметалічних феримагнетиків, що описуються моделлю Гейзенберга, лише при екстремально малих чи великих значеннях позитивної одноіонної анізотропії.

2. The thesis is devoted to simulation of magnetic properties of quasi-one-dimensional transition metal complex compounds using effective hamiltonians in quantum-chemical valence bond method. The scope of this work also covers development and applicability checking of approximate methods for low-temperature magnetic properties simulation and calculation of lower energy spectrum of systems of this kind. For infinite repulsion Hubbard model defined on square lattice stripes with finite width n with alternation of single-electron energies □i of neighboring unit cells ground state and lower excitations were studied using degenerate perturbation theory and numerical calculations using exact diagonalization method. With help of spin permutation technique and second-order degenerate perturbation theory the low-energy effective Hamiltonians were derived for different electron densities and alternation strengths. It was shown that electron density gives maximal value of ground state total spin in limit of weak unit cell interactions. Moreover, it was shown that for this type of lattice electron filling corresponds to greater stability of maximal value of ground state spin regarding to increase of unit cells' interactions compared to systems without alternation of one-electron energies. For 2-leg ladder without orbital energy alternation it was shown that ground state cannot have maximal spin. Also, using numerical method of exact diagonalization of finite lattice Hamiltonian for width-3 lattice with □ it was demonstrated that decrease of electronic density accompanied with single-electron energy alternation can destroy ground state with maximal value of total spin. For density □ presence of□i alternation increases stability of maximumspin ground state regarding to small variations of □i.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Черановський Владислав Олегович

2. Cheranovsky Vladyslav O

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Жикол Олег Анатолійович
2. Zhykol Oleh A.

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сиркін Євген Соломонович
2. Syrkin Evgen S

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Дорошенко Андрій Олегович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Дорошенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.