Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0410U005647

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-10-2010

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кравченко Олексій Андрійович
2. Kravchenko Oleksii Andrijovych

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: 16-09-2010

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: Україна, 61022, м. Харків, майдан Свободи,4

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, 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: Україна, 61022, м. Харків, майдан Свободи,4

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.03

Тема дисертації:

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

2. Quantum chemical simulation of magnetic properties of low-dimensioned compounds, based on transition metals

Реферат:

1. Об'єкти дослідження: багатоелектронні моделі низькорозмірних магнетиків на основі сполук перехідних металів. Мета: виявлення особливостей енергетичного спектру та низькотемпературної термодинаміки низькорозмірних сполук перехідних металів, які становлять інтерес щодо прогнозування фізико-хімічних характеристик та шляхів синтезу нових перспективних магнітних матеріалів для наноелектроніки. Методи: теорія збурень, наближення спінових хвиль, метод трансфер-матриці, метод точної діагоналізації кінцевих граткових кластерів і чисельної групи перенормування Вайта (DMRG), метод циклічних спінових перестановок. Теоретичні та практичні результати: Проведено аналітичне та чисельне дослідження нижньої частини енергетичного спектру та низькотемпературної термодинаміки модельної ферімагнітної нанотрубки - тубулярного фрагменту декорованої прямокутної спінової решітки. Показано можливість використання такого магнетика у магнітних хемосенсорах. Аналогічні дослідження проведені для

ферімагнетика з магнітною підрешіткою типу "драбина-намисто". Досліджено вплив малого акцепторного допування на магнітні властивості драбини-"намисто". Для квазіодновимірних решіткових моделей типу "драбини" з сильним електронним відштовхуванням отримано умови утворення магнітних поляронів. Новизна: уперше запропоновано спінову модель нового гіпотетичного квазіодновимірного магнетика "ферімагнітної" нанотрубки. Показано існування квантових фазових переходів у одновимірних спінових моделях феррімагнетиків типу драбини -"намисто" та "ферімагнітної" нанотрубки. Ступінь впровадження: результати та чисельні алгоритми, розроблені під час дослідження, можуть бути використані при інтерпретації результатів експериментальних досліджень на кафедрі теоретичної хімії, НДІ хімії, та ФТІНТ НАНУ ім. Б.І Вєркіна. Ступінь (галузь) використання: магнітні матеріали для сучасної електроніки.

2. Investigation objects: many electrons models of low-dimensioned magnetics, based on transition metals compounds. Objectives: an investigation of peculiarities of energy spectrum and low temperature thermodynamic of low-dimensioned compounds , based on transition metals. It makes a perfect interest to prognoze physico-chemical characteristics and ways to create new perspective magnetics as a new materials for nanoelectronics. Methods: perturbative theory, spin-wave approximation, transfer-matrix method, method of precise diagonalization of finite lattice clusters and DMRG, method of cyclic spin permutation. Theoretical and practical results: An analytical and numerical investigation of the low part of energy spectrum and low temperature thermodynamic of model ferromagnetic nanotube-tubular fragment of decorated spin lattice was carried out. A possibility of use of the magnetic as a hemosensor was shown. Similar investigation was carried out for ferromagnetic with magnetic sublattice like "Necklace ladders". An influence of small acceptor dope on magnetic properties of "Necklace ladder" was investigated. For quasi one dimensioned ferromagnetic lattice model like "ladders" with strong electron repulsion conditions of formation of magnetic polarons were obtained. A sin model of new hypotetic quasi one dimensioned ferrimagnetic -ferrimagnetic tube was proposed. An existence of quantum phase-transition in one dimensional spin models of ferrimagnetics like "Necklace ladder" and ferrimagnetic namotube was shown. Results and numerical algoritms, developed at the research, can be used at interpretation of experimental data to Scientific institute of Chemistry, to theoretical chemistry department, to B. Verkin Institute fo Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Science of Ukraine.

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. Cheranovskii Vladyslav Olegovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07

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. Сахно Тамара Вікторівна
2. Сахно Тамара Вікторівна

Кваліфікація: д.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. Колісниченко Юрій Олексійович
2. Колісниченко Юрій Олексійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07

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	Орлов Валерій Дмитрович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Орлов Валерій Дмитрович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.