Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000569

Державний реєстраційний номер: 0121U113219

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Виконання завдань перспективного плану розвитку наукового напряму «Математичні науки та природничі науки»

Початок етапу: 08.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: бульвар Шевченка, буд. 81, м. Черкаси, Черкаський р-н., Черкаська обл., 18031, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380472372142, 380472354463

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: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201390

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 245.400

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Виконання завдань перспективного плану розвитку наукового напряму «Математичні науки та природничі науки»

Назва роботи англійською:

Development of a long-term plan for the development of a scientific direct "Mathematical Sciences and Natural Sciences"

Реферат українською:

Виконання завдань перспективного плану розвитку наукового напряму «Математичні науки та природничі науки»

Реферат англійською:

Development of a long-term plan for the development of a scientific direct "Mathematical Sciences and Natural Sciences"

Індекс УДК: 53 , 54

Коди тематичних рубрик: 29, 31

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Гусак Андрій Михайлович

Науковий ступінь: д.ф.-м.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Мінаєв Борис Пилипович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Виконання завдань перспективного плану розвитку наукового напряму «Математичні науки та природничі науки»

Назва НТП англійською: Development of a long-term plan for the development of a scientific direct "Mathematical Sciences and Natural Sciences"

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології, Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: Природничі науки та математичні науки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Визначено провідність для серії гетероциркуленів. Встановлено, що O/NH заміщення та бензоанеляція сприяють зменшенню енергій реорганізації та збільшують інтеграли переносу в межах шляхів транспортування зарядів. Для тіациркуленів послідовне заміщення периферійних атомів сірки атомами селену сприяє покращенню параметрів провідності. Окрім того, S/Se заміщення викликає інверсію провідності; тобто октатіа[8]циркулен демонструє переважаючу діркову провідність і більшою мірою належить до матеріалів p-типу, тоді як тетратіатетраселена[8]циркулен та октаселена[8]циркулен демонструють домінуючу мобільність електронів і можуть розглядатися як матеріали n-типу. Проведено молекулярний дизайн серії нових гетероструктур карбонових і нітридних матеріалів, їх кристалічнгих структур та фізико-хімічних властивостей. Зокрема, змодельовано нові потенційно привабливі форми азоту N4 як у вигляді алотропу, так і його солей з лужними, лужноземельними металами та алюмінієм. Визначено найбільш перспективні нітрогеновмісні прямозонні напівпровідникові матеріали з варіативною шириною забороненої зони в широкому діапазоні 1-5 еВ. Встановлено фактори, що впливають на спін-орбітальну взаємодію між синглетними і триплетними станами з перенесення заряду та їх подальшою апробацією у генерації та детектуванні синглетного кисню. Зокрема, бензантрон як планарний фрагмент з високою жорсткістю та сильними електрон-акцепторними властивостями, було застосовано для розробки нових TADF-емітерів з випромінюванням в близькій ІЧ області, що є перспективними для застосування в OLEDax та оптичних сенсорах. Показано, що металоорганічні координаційні сполуки цинку з 1-феніл-3-метил-4-форміл-5-піразолон азометинами демонструють інтенсивну небесно-блакитну флуоресценцію як в розчині (квантовий вихід до 12%), так і в твердому стані (квантовий вихід до 55%).

Соціально-економічна спрямованість НТП: Розширення сучасних знань із природничих та математичних наук

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 08.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Розробка власної модифікації схеми отримання і дослідження нанопоясів ванадій(V) оксиду.

Назва НТП англійською: Development of the scheme for the production and study of vanadium(V) oxide nanobelts.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Вироби технічні, Технології, Методи, теорії

Галузь застосування: Електроніка (літієві батареї та акумулятори)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено власну модифікацію схеми отримання і дослідження нанопоясів ванадій(V) оксиду шляхом інтенсивного перемішування суспензій. Встановлено, що залежність в'язкості від часу є немонотонною, вказуючи на можливість оптимізації режиму отримання наноструктур. Максимум в'язкості пов'язаний з вичерпанням вихідних порошків як джерела нановолокон і коалесцненцією нановолокон у відкритій системі при інтенсивному перемішуванні. Показано, що поведінка кислотності розчину корелює з еволюцією в'язкості. Нами також виділені основні стадії формування ансамблів нановолокон ванадій(V) оксиду. Запропоновано узагальнення відомої середньопольової моделі Хіллерта на випадок росту зерен у відкритих системах, з урахуванням подрібнення зерен внаслідок інтенсивної пластичної деформації. У цій моделі асимптотичний розмір зерна виявляється обернено пропорційним інтенсивності перемелювання.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: На стадії вдосконалення.

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1.

Гусак А. М., Запорожець Т. В., Ляшенко Ю. О., Пасічна В. М., Пасічний М. О., Сторожук Н. В. Моделі твердофазних реакцій – нові результати. Монографія. – Видавець СГ НТМ «Новий курс», вул. Манізера, 3, м. Харків, 61002, Україна, 2021. – 392 с. ISBN 978-617-7886-17-3

Опубліковано великий огляд у міжнародному виданні у – 1 (Спецвипуск з хімії на честь проф. В. Занасі). Aromaticity of heterocirculenes. Chemistry / N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev. – Multidisciplinary Digital Publishing Institute, Ed. by Claire Gao : 2021. – P. 1-27.

Karaush-Karmazin N. N., Baryshnikov G. V., Kuklin A. V., Saykova D. I., Ågren H., Minaev B. F. Impact of molecular and packing structure on the charge-transport properties of hetero[8]circulenes / Journal of Materials Chemistry C. – 2021. – Vol. 9, № 4. – P. – 1451–1466.

Minaeva V., Minaev B., Panchenko A., Pasychnik V. Computational study of IR, Raman, and NMR spectra of 4-methylmethcathinone drug / Journal of Molecular Modeling. – 2021. – Vol. 27, № 1. – P. 1–15.

Minaeva V. A., Karaush-Karmazin N. N., Panchenko O. O., Heleveria D. N., Minaev B. F. Hirshfeld Surfaces Analysis And DFT Study Of The Structure And Ir Spectrum of N-Ethyl-2-Amino-1-(4-Chlorophenyl) Propan-1-One (4-CEC) Hydrochloride / Computational and Theoretical Chemistry. – 2021. – Vol. 1205. – P. 113455.

Dianthracenylazatrioxa[8]circulene: synthesis, characterization and application in OLEDs / Pedersen S. K., Pedersen V. B., Kamounah F. S., Broløs L. M., Baryshnikov G. V., Valiev R. R., Ivaniuk K., Stakhira P., Karaush-Karmazin N., Minaev B., Ågren H., Pittelkow M. // Chemistry – A European Journal. – 2021. – Vol. 27, № 45. – P. 11609–11617.

Khudyakov I. V., Minaev B. F. Electron Spin Resonance Spectra of Dioxygen and Nitric Oxide / Archives of Organic and Inorganic Chemical Sciences. – 2021. – Vol. 5, № 1. – P. 646–653.

Khudyakov I. V., Minaev B. F. Molecular Terms of Dioxygen and Nitric Oxide / Physchem. – 2021. – Vol. 1, № 2. – P. 121–132.

Gužauskas M., Narbutaitis E., Volyniuk D., Baryshnikov G. V., Minaev B. F., Ågren H., Chao Y.-C., Chang C.-C., Rutkis M., Grazulevicius J. V. Polymorph acceptor-based triads with photoinduced TADF for UV sensing / Chemical Engineering Journal. – 2021. – Vol. 425. – P. 131549.

Gusev A. N., Kiskin M. A., Braga E. V., Kryukova M. A., Baryshnikov G. V., Karaush-Karmazin N. N., Minaeva V. A., Minaev B. F., Ivaniuk K., Stakhira P., Ågren H., Linert W. Schiff Base Zinc (II) Complexes as Promising Emitters for Blue Organic Light-Emitting Diodes / ACS Applied Electronic Materials. – 2021. – Vol. 3, № 8. – P. 3436–3444.

Bondarchuk S. V. Structure Enhancement of Energetic Materials: A Theoretical Study of the Arylamines to Arylpentazoles Transformation / S. V. Bondarchuk // FirePhysChem – 2021. – Vol. 1, N 3. – P. 190-197.

Bondarchuk S. V. Diazoamination: A Simple Way to Enhance Detonation Performance of Aminoaromatic and Aminoheterocyclic Energetic Materials / S. V. Bondarchuk // FirePhysChem – 2021. – Vol. 1, N 2. – P. 97-102.

Bondarchuk S. V. Recoverability of N4x– Anions to Ambient Pressure: A First-Principles Study of cyclo- and syn-Tetranitrogen Units / S. V. Bondarchuk // J. Phys. Chem. C – 2021. – Vol. 125, N 13. – P. 7368-7377.

Bondarchuk S. V. Radical pair formation due to compression-induced electron transfer in crystals of energetic salts / S. V. Bondarchuk // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2021. – Vol. 23, N 2. – P. 1520-1526.

Gusak, A. M., Chen, K. J., Tu, K. N., & Chen, C. (2021). Modeling of abnormal grain growth in (111) oriented and nanotwinned copper. Scientific Reports, 11(1), 1-11. https://doi.org/10.1038/s41598-021-99992-5

Liu, H. C., Gusak, A. M., Tu, K. N., & Chen, C. (2021). Interfacial void ripening in CuCu joints. Materials Characterization, 181, 111459. https://doi.org/10.1016/j.matchar.2021.111459

A kinetic model of copper-to-copper direct bonding under thermal compression. / K. C.Shie, A. M.Gusak, K. N.Tu, C.Chen// Journal of Materials Research and Technology– 2021. – Vol. 15. – P. 2332-2344.

Pasichna V., Gusak A. Alternative algorithms for simultaneous modeling of ordering and intermediate compound growth during reactive diffusion. /V.Pasichna, A.Gusak // Computational Materials Science – 2021. – Vol. 187. – P. 110114.

A.M. Gusak, N.V. Storozhuk. Modeling of Phase Formation in Solid-Solid and Solid-Liquid Interactions – New Developments. Progress in Physics of Metals,22, No. 4: 481–510 (2021)https://doi.org/10.15407/ufm.22.04.481

Д. І. Коломієць, М. О. Пасічний. Синтез нанопоясків оксиду ванадію та використання концепції балістичних стрибків для опису їх утворення. Вісник Черкаського Університету. Серія Фізико-Математичні науки. Випуск 1. 2021. С. 12-30.

Н. В. Сторожук, А. М. Гусак. Застосування методу skmf до моделювання взаємної та реакційної дифузії в потрійних сплавах. Вісник Черкаського Університету. Серія Фізико-Математичні науки. Випуск 1. 2021. С. 31-43.

Liu, H. C., Gusak, A. M., Tu, K. N., & Chen, C. (2021, October). Void ripening in Cu-Cu bonds. In 2021 7th International Workshop on Low Temperature Bonding for 3D Integration (LTB-3D) (pp. 24). IEEE. DOI: 10.1109/LTB-3D53950.2021.9598384

Карауш-Кармазін Н. М. Аналіз поверхонь Гіршфельда та провідність гетероциркуленів / Н. М. Карауш-Кармазін, Г. В. Баришніков, Б. П. Мінаєв // Всеукраїнська конференція наукових дослідників 19-25 вересня 2021 р.: тези доповідей. – Львів, 2021. – С. 79.

Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G., Minaev B. Crystal Structure and Hirshfeld Surfaces Analysis of Heterocyclic [9]- and [10]Circulenes / International Conference on Mathematics, Modeling, Simulation, Optimization and Computation, June 29–30, 2021: theses of report. – Chengdu, China, 2021. – P. 1–7.

Панченко О. О. Аналіз поверхні Гіршфельда та квантово-хімічне дослідження наркотичного засобу 4-хлоретилкатінону гідрохлориду / О. О. Панченко, Н. М. Карауш-Кармазін, В. О. Мінаєва, Б. П. Мінаєв // Всеукраїнська конференція наукових дослідників 19-25 вересня 2021 р.: тези доповідей. – Львів, 2021. – С. 99.

Карауш-Кармазин Н.Н. Анализ поверхностей Хиршфельда молекулы тетраселенатетратиа[8]циркулена / Н.Н. Карауш-Кармазин, А.В. Бабий, Б.Ф. Минаев // Міжнародний конгрес по хімії гетероциклічних сполук (KOST-2021) 12-16 жовтня 2021 р.: тези доповідей. – м. Сочі, 2021 – с. 683–684.

Theoretical and Experimental Investigation of Mobilities of Tetraoxa[8]circulene / S. Kutsiy, I. Danyliv, P. Stakhira, N. Karaush-Karmazin, G. Baryshnikov, B. Minaev // 23rd International Conference-School “Advanced Materials and Technologies August 23–27, 2021: theses of report. – Palanga, Lithuania, 2021, C. 140. https://www.ebooks.ktu.lt/eb/1561/advanced-materials-and-technologies-book-of-abstracts-of-23rd-international-conference-school/

Andriy Gusak, Yaroslav Korol, Marek Danielewski, Marta Gajewska. Formation and Ripening of Nanobelts/Nanofibers under Stirring of aqueous Solution – Experiment and Modeling. 11th International Conference on Diffusion in Materials (DIMAT), July 4-9, 2021, University of Debrecen, Hungary. https://konferencia.unideb.hu/sites/default/files/file_uploads/dimat2021_program0708.pdf

Andriy Gusak. Modeling of Phase Formation in Solid-Solid and Solid-Liquid Interactions 11th International Conference on Diffusion in Materials (DIMAT), July 4-9, 2021, University of Debrecen, Hungary https://konferencia.unideb.hu/sites/default/files/file_uploads/dimat2021_program0708.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Черевко Олександр Володимирович
д. е. н., 08.00.05

Перелік осіб-виконавців

Бондарчук Сергій Вікторович

Дерев'янко Сергій Ігорович

Запорожець Тетяна Василівна
(д.ф.-м.н., 01.04.07, 01.04.07)

Карауш-Кармазін Наталія Миколаївна
(к. х. н.)

Коломієць Денис Ігорович

Мінаєва Валентина Олександрівна

Пасічний Микола Олександрович
(к. ф.-м. н., 01.04.07)

Відповідальний за підготовку облікових документів Пасічна Юлія Григорівна

Телефон +38 (097) 211-15-37

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності