Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U001120

Державний реєстраційний номер: 0121U113219

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

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

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

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.): 50.900

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:

Об'єкт дослідження – органічні світловипромінювальні гетероструктури з термоактивованою довготривалою флуоресценцією та наноструктурні перетворення у відкритих неоднорідних середовищах. Метою роботи є виконання завдань відповідно до пріоритетних тематичних напрямів, зазначених на 2023 рік у розділі 2 Перспективного плану розвитку Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького за науковим напрямом «Математичні науки та природничі науки» за період з 2021 по 2025 роки (Додаток 1 до Договору № БФ/46-2021 від 02.08.2021 р.), а саме у 2023 році «Дослідження органічних світловипромінювальних гетероструктур з термоактивованою довготривалою флуоресценцією та наноструктурних перетворень у відкритих неоднорідних середовищах». Результати роботи та їх наукова новизна: Отримано дані щодо електронної будови ексиплексів, ролі локальних триплетних станів та впливу спін-орбітальної взаємодії на ефективність термічно активованої уповільненої флуоресценції в органічних світловипромінювальних гетероструктурах. Розроблено метод передбачення густини кристалічної фази молекулярних кристалів на основі розрахунків базису кристалу у вакуумі напівемпіричним методом PM7. Розроблена нова аналітична модель одночасного росту зерен проміжних фаз із бамбуковою наноструктурою і товщин цих фаз у процесах реакційної дифузії; продовжена розробка узагальненого середньопольового стохастичного методу моделювання кристалізації дво- та багатофазних евтектичних та біляевтектичних сплавів із рідкого стану (направлена евтектична кристалізація) та газового стану. Встановлено кореляцію між кінетикою структурних перетворень і фізико-хімічними характеристиками суспензії при гідромеханічному синтезі нанопоясів пентаоксиду ванадію у процесі інтенсивного перемішування водних суспензій порошків вихідної речовини. Проведено опис технологічних процесів для покращення структури консолідованих методом електроіскрового спікання порошків міді в результаті їх покриття оловом.

Реферат англійською:

Research object is organic light-emitting heterostructures with thermally activated long-lived fluorescence and nanostructural transformations in open heterogeneous environments. The goal of the work is to accomplish tasks in accordance with the priority thematic directions outlined for the year 2023 in Section 2 of the Prospective Development Plan of Bohdan Khmelnytskyi Cherkasy National University in the scientific field "Mathematical Sciences and Natural Sciences" for the period from 2021 to 2025 (hereinafter referred to as the Prospective Plan), as indicated in Appendix 1 to Contract No. БФ /46-2021 dated August 2, 2021. Specifically, in 2023, the focus is on the priority thematic direction "Investigation of organic light-emitting heterostructures with thermally activated long-lived fluorescence and nanostructural transformations in open heterogeneous environments," as outlined in the mentioned document. Results and novelty. Obtained data on the electronic structure of exciplexes, the role of local triplet states, and the influence of spin-orbital interaction on the efficiency of thermally activated delayed fluorescence in organic light-emitting heterostructures. Developed a method for predicting the density of the crystalline phase of molecular crystals based on calculations of the crystal lattice in a vacuum using the semi-empirical PM7 method. Developed a new analytical model for simultaneous grain growth of intermediate phases with bamboo nanostructure and the thickness of these phases in reactive diffusion processes. Established a correlation between the kinetics of structural transformations and the physico-chemical characteristics of the

suspension during hydro-mechanical synthesis of vanadium pentoxide nanobelts through intensive mixing of aqueous suspensions of starting material powders. Conducted a description of technological processes to improve the structure of powders consolidated by spark plasma sintering through tin immersion coating.

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: Методи, теорії

Галузь застосування: Природничі науки та математичні науки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Результати дослідження електронної структури ексиплексів, ролі локальних триплетних станів та впливу спін-орбітальної взаємодії на ефективність термічно активованої уповільненої флуоресценції методами сучасного квантово-хімічного моделювання можуть бути застосовані для вирішення проблеми низької ефективності термічно активованої уповільненої флуоресценції в органічних світловипромінювальних гетероструктурах OLEDs. Результати прогнозування густини кристалічної фази на основі розрахунків ізольованих у вакуумі молекул можуть бути застосовані для вирішення проблеми визначення енергетичних характеристик молекулярних кристалів для створення нових енергоємних матеріалів з підвищеними детонаційними характеристиками. Результати дослідження синергії реакційної дифузії та росту зерен при твердофазних реакціях, прогнозування еволюції нано- та мікроструктур бінарних сплавів при евтектичній кристалізації та контактному плавленні в великих градієнтах концентрації, а також еволюції наноструктур при співнапиленні компонентів із газової фази з одночасною сепарацією фаз в наростаючій плівці можуть бути застосовані для вирішення проблем прогнозування еволюції нано- та мікроструктур у великих градієнтах концентрації. Результати дослідження кореляції між кінетикою структурних перетворень і фізико-хімічними характеристиками суспензії при гідромеханічному синтезі нанопоясів пентаоксиду ванадію у процесі інтенсивного перемішування водних суспензій порошків вихідної речовини можуть бути застосовані для вирішення проблем оптимізація процесу синтезу нанорозмірних матеріалів з наперед заданими властивостями. Результати дослідження росту фаз та пороутворення в контактних зонах в результаті консолідації мідних порошків з імерсійним покриттям оловом методами електроіскрового спікання можуть бути застосовані для вирішення проблем створення композитних матеріалів зі специфічними властивостями та розробки нових технологій у сфері електроіскрового спікання.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 04.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Науковий і технічний персонал

Перспективні ринки: Країни Європи

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

Minaev B., Stakhira P., Panchenko O., Minaeva V., Kutsiy S., Melnykov S., Danyliv I., Volyniuk D., Grazulevicius J. V., Kudelko A., Olesiejuk M., Ågren H. Theoretical and experimental investigation of exciplex-forming and electroluminescent properties of 4-ethyl-3,5-bis[40-(N, N-diphenylamine)biphenyl-4-yl]-4H-1,2,4-triazole. Optical Materials. 2024. Vol. 147. P. 114606. URL: https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114606

Minaeva V., Panchenko A., Karaush-Karmazin N., Nycz J. E., Minaev B. Manifestation of Intermolecular Interactions in the IR Spectra of 2- and 4-Methylmethcathinones Hydrochlorides: DFT Study and Hirshfeld Surfaces Analysis. Biointerface Research in Applied Chemistry. 2023. Vol. 13, no. 3. P. 202. URL: https://doi.org/10.33263/briac133.202

Liu Y., Xiao Z., Liu Y., Minaev B., Panchenko A., Yan B. Spectroscopic constants and transition properties of the SnH+ ion excited states including spin-orbit coupling. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2022. P. 108461. URL: https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2022.108461

Minaeva V., Karaush-Karmazin N., Panchenko O., Minaev B., Ågren H. Hirshfeld and AIM Analysis of the Methylone Hydrochloride Crystal Structure and Its Impact on the IR Spectrum Combined with DFT Study. Crystals. 2023. Vol. 13, no. 3. P. 383. URL: https://doi.org/10.3390/cryst13030383

Xiao L., Yan B., Minaev B. F. Near-Infrared Transitions from the Singlet Excited States to the Ground Triplet State of the S2 Molecule. Physchem. 2023. Vol. 3, no. 1. P. 110–124. URL: https://doi.org/10.3390/physchem3010009

Jiang W., Li R., Ding L., Xue J., Yan B., Minaev B. F. Theoretical study on low-lying states of silicon iodide: MRCI+Q calculation including spin-orbit coupling. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2023. P. 108713. URL: https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2023.108713

Minaev B., da Silva R. S., Panchenko O., Ågren H. Prediction of a new spin-forbidden transition in the N2 molecule - C□□5Пu □ B3Пg. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2023. P. 108701. URL: https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2023.108701

Minaev B., da Silva R. S., Panchenko O., Ågren H. Prediction of new spin-forbidden transitions in the N2 molecule - the electric dipole A□5□g+ □ A3□u+ and magnetic dipole a□1□u□ □ A3□u+ transitions. The Journal of Chemical Physics. 2023. Vol. 158. P. 084304. URL: https://doi.org/10.1063/5.0136465

Ghasemi M., Mahmoudi M., Gudeika D., Leitonas K., Simokaitiene J., Dabuliene A., Panchenko A., Minaev B.F., Volyniuk D., Grazulevicius J. V. Effects of the change of isomers on room-temperature phosphorescence, thermally activated delayed fluorescence, and long persistent luminescence of organic hole-transporting materials with the selective potential for the application in electronic devices and optical sensors of oxygen. Chemical Engineering Journal. 2023. Vol. 473. P. 145004. URL: https://doi

Volyniuk, L., Gudeika, D., Panchenko, A., Minaev, B.F., Mahmoudi, M., Simokaitiene, J., Bucinskas, A., Volyniuk, D., Grazulevicius J.V. Single-Molecular White Emission of Organic Thianthrene-Based Luminophores Exhibiting

Efficient Fluorescence and Room Temperature Phosphorescence Induced by Halogen Atoms. ACS Sustainable Chemistry & Engineering. 2023. Vol. 11, no. 48. P. 16914–16925 URL: https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c04011

Wei C., Xiao L., Xue J., Minaev B.F., Yan B. Ab initio investigation on predissociation of the A2□+ state of the SeH radical induced by spin-orbit coupling. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2023. Vol. 311. P. 108783. URL: https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2023.108783

Xiao L., Yang Y., Li X., Minaev B.F., Yan B. Theoretical study of the spectroscopy and radiative transition probabilities of Si2 from visible to infrared. Physical Chemistry Chemical Physics. 2023. Vol. 25. P. 28350–28362. URL: https://doi.org/10.1039/d3cp02512h

Minaev B. F. Singlet-excited dioxygen O2(a1Δg) and organic pollutants in marine waters beneath the Sun. Annals of Marine Science. 2023. Vol. 7, no. 1. P. 25–33. URL: https://doi.org/10.17352/ams.000035

Chapran M., Sahalianov I., Karaush-Karmazin N.N., Wiosna-Salyga G., Glowacki I., Luszczynska B., Pander P., Baryshnikov G.V. Electronic Structure of Exciplexes and the Role of Local Triplet States on Efficiency of Thermally Activated Delayed Fluorescence. ACS Applied Electronic Materials. 2023. Vol. 5, no. 3. P. 1489–1501. URL: https://doi.org/10.1021/acsaelm.2c01518

Nycz J. E., Karaush-Karmazin N., Minaev B., Minaeva V.A. Małecki G. J., Książek M., Swoboda D., Kusz J. Syntheses and Spectroscopic Characterization of Selected Methyl Quinolinylphosphonic and Quinolinylphosphinic Acids; Rationalized Based on DFT calculation. Curr. Organic Chemistry. 2023. (In Press).

Bondarchuk S. V. Pyrrole and Pyrimidine Derivatives as Possible Electron Donors for Colored Charge-Transfer Complexes with a Weakly Electrophilic Energetic Material, FOX-7: A Theoretical Stud. Chinese Journal of Explosives & Propellants. 2023. Vol. 46, no. 5. P. 390–398.

Bondarchuk S. V. Theoretical study of the Meisenheimer and charge-transfer complexes formed upon colorimetric determination of nitroaromatic explosives. FirePhysChem. 2023. Vol. 3, no. 2. P. 164–172. URL: https://doi.org/10.1016/j.fpc.2022.09.004

Bondarchuk S. V. Prediction of aquatic toxicity of energetic materials using genetic function approximation. FirePhysChem. 2023. Vol. 3, no. 1. P. 23–28. URL: https://doi.org/10.1016/j.fpc.2022.07.001

Gusak A., & Titova, A. Eutectic crystallization and melting in sharp concentration gradients. The Journal of Chemical Physics. 2023. Vol. 158. P. 164701 URL: https://doi.org/10.1063/5.0147658

Gusak, A. M., Titova, A., & Chen, Z. Flux-driven transformations in open systems revisited-crystallization of amorphous Ni-P driven by reaction with Sn. Acta Materialia. 2023. Vol. 261. P. 119366. URL: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.119366

Gusak, A., & Titova, A. (2023). Synergy of grain boundary and interface diffusion during intermediate compound formation. Philosophical Magazine. 2023. Vol. 103, no. 8. P. 713–732. URL: https://doi.org/10.1080/14786435.2023.2169381

Мінаєв Б. П., Панченко О. О. TD DFT дослідження ізомер-залежної фосфоресценції при кімнатній температурі // II Міжнародно наукова конференція “Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів” 20 травня 2023 р. Матеріали конференції. Дніпро, 2023. С. 139–142.

Мінаєва В. О., Карауш-Кармазін Н. М., Панченко О. О., Мінаєв Б. П. Аналіз кристалічної структури метилону методом поверхнонь Хіршфельда // VII Міжнародна науково-практична інтернет-конференція "Хімія, біотехнологія, екологія та освіта" 17–18 травня 2023 р.: тези доповідей. Полтава, 2023. С. 29–32.

Чернюк М. В., Панченко О. О. Застосування методу поверхонь Гіршфельда для аналізу міжмолекулярних взаємодій у кристалічній структурі (3-флуорофеніл)(тіантрен-2-іл)метанону // XXV Всеукраїнська наукова конференція молодих учених «Актуальні проблеми природничих і гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених» (м. Черкаси, 10–11 травня 2023 року). Матеріали конференції. Черкаси, 2023. С. 1101–1104.

Minaev B. F. Rubisco, as cofactor-free oxygenase, provides oxygen activation by spin torque in the superoxide open shell // Міжнародна наукова інтернет конференція «Молекулярна інженерія та комп'ютерне моделювання для нано- і біотехнологій: від наноелектроніки до біополімерів» (м. Черкаси, 27–28 вересня 2023 року). Матеріали конференції. Черкаси, 2023. С. 18–20.

Karaush-Karmazin N., Swoboda D., Nycz J. E., Minaev B., Książek M., Kusz J., Podsiadły R. DFT study of the 5,5-dimethyl-2-(10H-phenothiazin-10-yl)-1,3,2-dioxaphosphinane 2-oxide // Міжнародна наукова інтернет конференція «Молекулярна інженерія та комп'ютерне моделювання для нано- і біотехнологій: від наноелектроніки до біополімерів» (м. Черкаси, 27–28 вересня 2023 року). Матеріали конференції. Черкаси, 2023. С. 30–32.

Minaeva V., Minaev B., Stakhira P., Panchenko O. Theoretical study of IR spectrum of 4-ethyl-3,5-bis[40-(N,N-diphenylamine)biphenyl-4-yl]-4H-1,2,4-triazole // Міжнародна наукова інтернет конференція «Молекулярна інженерія та комп'ютерне моделювання для нано- і біотехнологій: від наноелектроніки до біополімерів» (м. Черкаси, 27–28 вересня 2023 року). Матеріали конференції. Черкаси, 2023. С. 40–43.

O. Panchenko Activity of quintet oxygen O2(5Пg) in the atmosphere // Міжнародна наукова інтернет конференція «Молекулярна інженерія та комп'ютерне моделювання для нано- і біотехнологій: від наноелектроніки до біополімерів» (м. Черкаси, 27–28 вересня 2023 року). Матеріали конференції. Черкаси, 2023. С. 44–46.

Xiao L., Xue J., Ding L., Li R., Minaev B.F., Yan B. Spin-orbit coupling in spectroscopy and photonics of heavy diatomic molecules // Міжнародна наукова інтернет конференція «Молекулярна інженерія та комп'ютерне моделювання для нано- і біотехнологій: від наноелектроніки до біополімерів» (м. Черкаси, 27–28 вересня 2023 року). Матеріали конференції. Черкаси, 2023. С. 63–65.

Karaush-Karmazin N.M., Debata S., Baryshnikov G.V., Sahu S. Molecular engineering of bowl-shaped perylene-derivatives: from unipolar (p-type or ntype) to ambipolar charge transport type // XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених, студентівта аспірантів з актуальних питань хімії» (м. Харків, 10–12 жовтня 2023 року). Матеріали конференції. Харків, 2023. С. 60.

Bondarchuk S. V. Calculation of detonation properties of chno explosives using mopac archive files as inputs // VI Міжнародна наукова конференція студентів та молодих вчених «Хімічні проблеми сьогодення» (м. Вінниця, 21–23 березня 2023 року). Матеріали конференції. Вінниця, 2023. С. 20.

Bondarchuk S. V. Prediction of electrostatic discharge sensitivity of nitrogen-rich energetic materials using PM7 archive files as inputs // Міжнародна наукова інтернет конференція «Молекулярна інженерія та комп'ютерне моделювання для нано- і біотехнологій: від наноелектроніки до біополімерів» (м. Черкаси, 27–28 вересня 2023 року). Матеріали конференції. Черкаси, 2023. С. 21.

Mykola Pasichnyy. Classical nucleation theory and Stochastic Kinetic Mean Field approach // Сучасні проблеми механіки та математики – 2023: збірник наукових праць / за заг. ред. акад. НАН України Р.М. Кушніра та чл.-кор. НАН України В.О. Пелиха // Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України. – 2023. – 454 с.

Ніколенко Ю.В., Морозович В.В. Вплив температури на процес спікання високовольтним електроіскровим методом модифікованого порошку міді // Актуальні проблеми природничих і гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених «Родзинка – 2023» / XXV Всеукраїнська наукова конференція молодих учених. Матеріали конференції. – Черкаси : ЧНУ ім. Б. Хмельницького, 10-11 травня 2023 р. - С. 1066.

Ніколенко Ю.В., Морозович В.В., Гонда А.Р., Ляшенко Ю.О. Дослідження контактної зони отриманої методом електроіскрового спікання мідних порошків покритих оловом / Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки». – 2023. – № 1. – С.3-14.

Коломієць Д.І., Пасічний М.О., Король Я.Д. Кореляція між кінетикою структурних перетворень і фізико-хімічними характеристиками суспензії при гідромеханічному синтезі нанопоясів пентаоксиду ванадію / Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки». – 2023. – № 1. – С. 15-24.

A. Titova, H. Zapolsky, A. Gusak. Memory Effects During Co-Deposition of Binary Alloys / Scripta Materialia. – 2023. – Volume 241. – P. 115897. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2023.115897

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Черевко Олександр Володимирович
д. е. н., 08.00.05

Перелік осіб-виконавців

Бондарчук Сергій Вікторович
(к. х. н.)

Гонда Андрій Романович

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

Король Ярослав Дмитрович
(к. ф.-м. н.)

Ляшенко Юрій Олексійович
(д.ф.-м.н., 01.04.07)

Морозович Владислав Володимирович

Мінаєва Валентина Олександрівна
(к. х. н.)

Панченко Олександр Олександрович

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

Тітова Анастасія В'ячеславівна
(015)

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

