Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U001376

Державний реєстраційний номер: 0122U000760

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження кінетичних, люмінесцентних та напівпровідникових властивостей новосинтезованих органічних та металоорганічних емітерів та їх застосування в конструкції органічних світловипромінюючих діодів.

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітного документа: Остаточний 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): 2201 040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1455.033

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив спін-орбітальної взаємодії на сенсори молекулярного кисню та органічні світловипромінювальні гетероструктури з термоактивованою довготривалою флуоресценцією

Назва роботи англійською:

Impact of spin-orbit coupling on molecular oxygen sensors and organic light-emitting heterostructures with thermoactivated long-term fluorescence

Реферат українською:

Метою роботи є розробка і синтез нових повноколірних електро-емісійних матеріалів та їх подальше застосування у конструкції сенсорів кисню та високоефективних органічних світловипромінюючих діодів з урахуванням результатів аналізу ефектів спін-орбітальної взаємодії (СОВ) в молекулах люмінофорів. Ці органічні світлодіоди долають обмеження яскравості світіння від 1000 Кд/м2 для стандарту вимірювання передачі кольору IES TM-30-15 та демонструють при цьому широку колірну гаму, яка відтворює динамічний діапазон із глибоким чорним (менше 0,0005 Кд/м²) і найяскравішими світлими кольорами для дисплейних технологій WCG. Напрямлений синтез нових люмінофорів із застосуванням прогнозу СОВ і нових технологічних підходів дозволив отримати світловипромінювальні структури різної колірної температури від теплого білого (2700–3000 К) до білого (5000–7000 К) випромінювання для систем освітлення. Встановлено взаємозв'язок між електронною будовою і фотофізичними характеристиками серії нових синтезованих емісійних матеріалів та реалізовано ергономічні і енергоефективні донорно-акцепторні (Д-А) органічні матеріали з трансфером енергії від ексиплексів, які відповідають стандартам IES. Для виконання завдань проєкту було залучено широкий арсенал сучасних фізико-хімічних методів досліджень, включаючи УФ-видиму та ІЧ-спектроскопію, метод ЯМР, мас-спектрометрію, фотоелектронну спектроскопію, порошкову рентгенівську дифрактометрію, рентгеноструктурний аналіз, лінійну та циклічну вольтамперометрію, термогравіметричний аналіз, високоточні методики вакуумного напилення матеріалів у мультишарових структурах світлодіодів. Для прогнозування і аналізу експерниментальних даних були використані методи сучасних квантовохімічних розрахунків, такі як теорія функціоналу густини. Були також використані сучасні OLED технології, такі як контрольоване осадження з розчину та термовакуумне осадження тонких плівок органічних сполук.

Реферат англійською:

This project aims to develop and synthesize of new full-color electroluminescent materials and their subsequent application in the design of oxygen sensors and high-efficiency organic light-emitting diodes (OLEDs), taking into account the results of analyzing spin-orbit coupling (SOC) effects in luminophore molecules. These organic LEDs overcome the limitations of the luminance of 1000 cd/m2 for the IES TM-30-15 color rendering standard and demonstrate a wide color gamut that reproduces the dynamic range with deep black (less than 0.0005 cd/m²) and the brightest light colors for WCG display technologies. The directed synthesis of new phosphors using SOE prediction and new technological approaches made it possible to obtain light-emitting structures of different color temperatures from warm white (2700–3000 K) to white (5000–7000 K) radiation for lighting systems. The relationship between the electronic structure and photophysical characteristics of a series of new synthesized emitters was established and ergonomic and energy-efficient donor-acceptor (DA) organic materials with energy transfer from exciplexes that meet IES standards were implemented. To fulfill the project tasks, a wide arsenal of modern physicochemical research methods was involved, including UV-visible and IR spectroscopy, NMR, mass spectrometry, photoelectron spectroscopy, powder X-ray diffractometry, X-ray structural analysis, linear and cyclic voltammetry, thermogravimetric analysis, high-precision methods of vacuum deposition of materials in multilayer LED structures. Modern quantum chemical calculation methods, such as density functional theory,

were used to predict and analyze experimental data. Modern OLED technologies such as controlled solution deposition and thermal vacuum deposition of thin films of organic compounds were also used.

Індекс УДК: 547:544.18;547:544.16;547:544.12, 547.52/.59, 547.52/.68, 547.7/.8, 547.1'147, 547

Коди тематичних рубрик: 31.21.15, 31.21.15.11, 31.21.25, 31.21.27, 31.21.29.05, 31.21.01

Керівники роботи

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: Підхід щодо посилення фосфоресценції при кімнатній температурі

Назва НТП англійською: Approach to enhancing phosphorescence at room temperature

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Природничі науки та математичні науки, органічна електроніка

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Явище посилення фосфоресценції при кімнатній температурі для складних молекул, отриманих шляхом кросс-синтезу донорних (D) (триазатруксен) та акцепторних (A) (фенотіазин) сполук, може бути досягнуто завдяки індукованій зміні типів конформерів. У результаті збудження молекули в триплетний стан (Tп) із донорно-акцепторним перенесенням заряду, її конформація зазнає змін, що впливає на спін-орбітальну взаємодію та сталу швидкості інтеркомбінаційної конверсії. Це призводить до підсилення фосфоресценції за кімнатної температури. Цей фотодинамічний конформаційний ефект суттєво відрізняється від статичного, де перенесення енергії відбувається між різними рівноважними конформерами.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Розширення сучасних знань щодо принципів свічення в органічних гетероструктурах

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

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

Патент на корисну модель u202401725 «Датчик кисню», дата отримання 08.04.2024

Патент на корисну модель u202402041 «Спосіб виготовлення органічного фотоприймача для реєстрації сигналів низької інтенсивності в ближній інфрачервоній області спектра», дата отримання 01.01.2025.

Теоретичні основи молекулярної спектроскопії: Курс лекцій для студентів вищих навчальних закладів за спеціальністю 102–Хімія / уклад. Б. П. Мінаєв, В. О. Мінаєва, Н. М. Карауш-Кармазін, М. С Сухина. – Дніпро : Середняк Т.К., 2024. – 220 с. ISBN 978-617-8489-24-3

Skuodis E., Leitonas K., Panchenko A., Volyniuk L., Simokaitienė J., Keruckienė R., Volyniuk D., Minaev B. F., Gražulevičius J. V. Very Sensitive Probes for Quantitative and Organoleptic Detection of Oxygen Based on Conformer-induced Room-temperature Phosphorescence Enhancement of the Derivative of triazatruxene and phenothiazine / Sensors and Actuators B: Chemical. – 2022. – Vol. 373. – P. 132727. https://doi.org/10.1016/j.snb.2022.132727 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G., Minaeva V., Panchenko O., Minaev B. IR, UV-Visible, NMR Spectra and Aromaticity of The Covalent Organic Tetraoxacirculene Frameworks / Computational and Theoretical Chemistry. – 2022. – Vol. 1217. – P. 113900. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2022.113900 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q3)

Debata S., Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G., Sahu S. Theoretical Investigation of Charge Transport and Optoelectronic Properties of Bowl-Shaped Dicyclopenta[ghi,pqr]perylene Derivatives / ACS Appl. Electron. Mater. – 2022. – Vol. 4, № 8. – P. 4146–4159. https://doi.org/10.1021/acsaelm.2c00778 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

Swoboda D., Nycz J. E., Karaush-Karmazin N., Minaev B., Książek M., Kusz J., Podsiadły R. Synthesis and Spectroscopic Characterization of Selected Phenothiazines and Phenazines Rationalized Based on DFT Calculation / Molecules. – 2022. – Vol. 27, № 21. – P. 7519. https://doi.org/10.3390/molecules27217519 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q2)

Minaev B. F., Panchenko O. O., Minaeva V. A., Ågren H. Triplet state harvesting and search for forbidden transition intensity in the nitrogen molecule / Front. Chem. – 2022. – Vol. 10. https://doi.org/10.3389/fchem.2022.1005684 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1).

Tsiko U., Bezvikonnyi O., Volyniuk D., Minaev B. F., Keruckas J. et al. TADF quenching properties of phenothiazine or phenoxazine-substituted benzanthrones emitting in deep-red/near-infrared region towards oxygen sensing. Dyes and Pigments 197, 109952 (2022) https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109952 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1).

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.

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, N 48. – P. 16914–16925. https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c04011 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

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. – P. 383. https://doi.org/10.3390/cryst13030383 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q2)

Minaev B., da Silva R. S., Panchenko O., Ågren H. Prediction of a new spin-forbidden transition in the N2 molecule-Cпп 5Пu п B3Пg / Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2023. – Vol. 309. – P. 108701.

https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2023.108701 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

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, № 8. – P. 084304. https://doi.org/10.1063/5.0136465 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

Bondarchuk S. V. Theoretical study of the Meisenheimer and charge-transfer complexes formed upon colorimetric determination of nitroaromatic explosives / FirePhysChem. – 2023. – Vol. 3(2). – P. 164–172. https://doi.org/10.1016/j.fpc.2022.09.004 (Scopus)

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 Study / Chinese Journal of Explosives & Propellants. – 2023. - Vol. 46(5). – P. 390–398. (Scopus, Web of Science, Квартиль Q3)

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 / B. Minaev, P. Stakhira, O. Panchenko, V. Minaeva, S. Kutsiy, S. Melnykov, I. Danyliv, D. Volyniuk, J. V. Grazulevicius, A. Kudelko, M. Olesiejuk, H. Ågren // Optical Materials – 2024. – Vol. 147. – P. 114606. (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1) https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114606

Bondarchuk S. V. Prediction of aquatic toxicity of energetic materials using genetic function approximation / FirePhysChem. – 2023. – Vol. 3(1). – P. 23–28. https://doi.org/10.1016/j.fpc.2022.07.001 (Scopus)

Minaeva V.A., Karaush-Karmazin N.N., Panchenko O.O., Chernyk M.V., Simokaitiene J., Volyniuk D., Grazulevicius J.V., Minaev B. F., Reshetnyak O.V. Structure and Spectral Properties of Thianthrene and Its Benzoyl-Containing Derivatives / Eurasian Journal of Chemistry. – 2023. – Vol. 111(3). – P. 89–103. https://doi.org/10.31489/2959-0663/3-23-7 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q4)

Minaev B. F. Singlet-excited dioxygen O2(a1Δg) and organic pollutants in marine waters beneath the Sun / Annals of Marine Science. – 2023. – Vol. 7. – P. 25–33. https://doi.org/10.17352/ams.000035 (Publons)

Zhang Z., Ma Y., Chen C., Bondarchuk S.V., Liu Y. A General Model of Impact Sensitivity for Nitrogen□Rich Energetic Materials: A Combined Incremental Theory and Genetic Function Approximation Study / ChemPhysChem. – 2024. – Vol. 25. – P. e202400014 https://doi.org/10.1002/cphc.202400014 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

Karaush-Karmazin N. M., Minaev B. F., Minaeva V. A., Panchenko O. O., Ågren H. Hirshfeld Surfaces Analysis of Intermolecular Interaction in the Series of Steroid Hormone Molecular Crystals / Eurasian Journal of Chemistry. – 2024. – Vol. 113. 43–55. https://doi.org/10.31489/2959-0663/3-23-7 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q3)

Stanitska M., Volyniuk D. Y., Minaev B., Ågren H., Grazulevicius J. V. Molecular design, synthesis, properties, and applications of organic triplet emitters exhibiting blue, green, red and white room temperature phosphorescence / Journal of Materials Chemistry C. – 2024. – Vol. 12. – P. 2662–2698. https://doi.org/10.1039/d3tc04514e (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

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 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q2)

Deva L., Mariia Stanitska, Minaev B., Minaeva V., Panchenko O., Stakhira P., et al. Anthraquinone-based tandem of the acceptor-donors A-D-D' compounds for photodetector application.] – 2024 (in press).

Xiao L., Wei Q., An S., Minaev B. F., Yan B. Transition properties of the spin- forbidden a4 Π-X2 Π systems in the NO, PO and PS molecules / Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2024. – Vol. 320. – 108979 URL: https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2024.108979 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

Xiao L., Wei Q., Li C., Minaev B. F., Yan B. Theoretical calculation of infrared band transitions of the Pb2 molecule / Chemical Physics. – 2024. – Vol. 580. – 112210. URL: https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2024.112210 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q2)

Xiao L., Xue J., Minaev B. F., Yan B. MRCI Study of the Electronic Structure and Transition Properties of a Tin Dimer / J. Phys. Chem. A – 2024, 128, 10, 1776–1792. URL:https://doi.org/10.1021/acs.jpca.3c07185 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q2)

Xiao L., Minaev B. F., Agren H., Yan B. Ab initio calculations of the spectra and lifetimes of the lead dimer / Phys. Chem. Chem. Phys. – 2024. – Vol. 26. – P. 11023–11036 URL: https://doi.org/10.1039/d3cp05990a (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

Nycz J. E., Karaush-Karmazin N., Minaev B., Minaeva V., Małecki J. G., Książek M., Swoboda D. and Kusz J. Syntheses and Spectroscopic Characterization of Selected Methyl Quinolinylphosphonic and Quinolinylphosphinic Acids; Rationalized based on DFT Calculation / Current Organic Chemistry – 2024. – 28. P. 545–557. URL: DOI: 10.2174/0113852728292818240301052024 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q3)

Karaush-Karmazin N. M., Nycz J. E. Advances in Molecular Photoswitches: From Azobenzenes to Azoquinolines / Current Organic Chemistry – 2024. – DOI: 10.2174/0113852728344412241008083512 (In Press). (Scopus, Web of Science, Квартиль Q3)

Xu X., Deng X., Li Yi, Xia S., Baryshnikov G., Bondarchuk S. V., Ågren H., Wang X., Liu P., Tan Y., Huang T., Zhang H., Wei Y. Applications of Boron Cluster Supramolecular Frameworks as Metal□Free Chemodynamic Therapy Agents for Melanoma / Small – 2024. – 20 (4), P. 2307029. https://doi.org/10.1002/smll.202307029 (Scopus, Web of Science, Квартиль Q1)

Minaev B. The spin of dioxygen as the main factor in pulmonology and respiratory care / Arch. Pulmonol. Respir. Care. – 2022. – Vol. 8, № 1. – P. 28–33. https://doi.org/10.17352/aprc.000081

Minaev B. Dioxygen and reactive oxygen species' paramagnetic properties are important factors in dermatology / Int. J. Dermatol. Clin. Res. – 2022. – Vol. 8, № 1. – P. 16–23. https://doi.org/10.17352/2455-8605.000046

Minaev B. F. Singlet-excited dioxygen O2(a1Δg) and organic pollutants in marine waters beneath the Sun / Annals of Marine Science. – 2023. – Vol. 7. – P. 25–33. https://doi.org/10.17352/ams.000035

Molecular engineering in optoelectronics : monograph / B. Minaev et al. 2024. (In Press)

Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G., Minaev B. Crystal structure and Hirshfeld surfaces analysis of Heterocyclic- and circulenes / MATEC Web of Conferences (2021 International Conference on Physics, Computing and Mathematical (ICPCM2021)). – 2022. – Vol. 355. – P. 01020. https://doi.org/10.1051/matecconf/202235501020

Minaev B. F., Panchenko O. O. Calculations of forbidden transitions intensity in nitrogen molecule / IV Міжнародна наукова конференція «Розвиток наукової думки постіндустріального суспільства: сучасний дискурс» (м. Вінниця, 1 липня 2022 року). – Вінниця, 2022. – С. 127–130.

Мінаєва В. О., Мінаєв Б. П., Карауш-Кармазін Н. М., Панченко О. О., Baryshnikov G. V. Аналіз ІЧ спектру полімеру на основі тетраокса[8]циркулену методом функціоналу густини / VI Міжнародна науково-практична інтернет-конференція "Хімія, біотехнологія, екологія та освіта" 16–17 травня 2022 р.: тези доповідей. – Полтава, 2022. – С. 7.

Мінаєва В. О., Мінаєв Б. П., Карауш-Кармазін Н. М., Чернюк М. В. Застосування методу поверхонь Хіршфельда для аналізу кристалічної структури прогестерону / VI Міжнародна науково-практична інтернет-конференція "Хімія, біотехнологія, екологія та освіта" 16-17 травня 2022 р.: тези доповідей. – Полтава, 2022. – С. 10.

Vissurkhanova Ya. A., Soboleva E. A., Ivanova N. M., Panchenko O. O. Electrochemical reduction, heating treatment of copper-zinc ferrite and organic-inorganic framework / XXIV Всеукраїнська наукова конференція молодих учених «Актуальні проблеми природничих і гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених» (м Черкаси,

27-28 квітня 2022 року). Матеріали конференції. – Черкаси, 2022. – С. 763–764.

Vissurkhanova, Ya. A., Ivanova, N. M., Minaev, B. F., Soboleva, E. A. Structural-phase changes of copper-zinc ferrite during heat treatment and electrochemical reduction. In: VI всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи», 5 жовтня 2022. – Житомир, 2022. – С. 73–74

Volyniuk L., Skuodis E., Leitonas K., Panchenko A., Simokaitienė J., Keruckienė R., Volyniuk D., Minaev B. F., Gražulevičius J. V. Investigation of photophysical properties of a derivative of triazatruxene and phenothiazine for quantitative and organoleptic detection of oxygen / BALTIC POLYMER SYMPOSIUM. – 2022. – P. 73.

Panchenko O. O. Comparative analysis of IR spectra of 2-, 3- and 4-methylmetcatinones with density functional method / XXIV Всеукраїнська наукова конференція молодих учених «Актуальні проблеми природничих і гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених» (м Черкаси, 27-28 квітня 2022 року). Матеріали конференції. – Черкаси, 2022. – С. 772–774.

Swoboda D., Nycz J., Karaush-Karmazin N., Minaev B., Książek M., Kusz J., Podsiadły R. Synthesis and spectroscopic characterization of selected phenothiazines rationalized based on DFT calculation / Vegyészkonferencia-2022, Eger, 2022. Június 15-17. – O. 26.

Swoboda D., Nycz J. E., Karaush-Karmazin N., Minaev B., Książek M., Kusz J., Podsiadły R. Synthesis and Spectroscopic Characterization of selected Phenazines Rationalized Based on DFT calculation / XXIII International Symposium on “Advances in Chemistry of Heteroorganic Compounds” 28 October 2022: Conference Materials. – Łódź, Poland, 2022: – С. 33-35.

Мінаєв Б. П., Панченко О. О. TD DFT дослідження ізомер-залежної фосфоресценції при кімнатній температурі / II Міжнародна 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.

Віссурханова Я. А., Панченко О. О. Нові відкриття у спектроскопії квінтетного азоту / 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. 1084–1086.

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(5Πg) 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.

Vissurkhanova Ya.A., Abulyaissova L.K., Ivanova N.M., Minaev B.F. Theoretical simulating the local structure of the copper (II)oxide surface / 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. 60–62.

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.

Панченко О. О. Обмінний спін-каталіз в рамках методу конфігураційної взаємодії / XXVI Всеукраїнська наукова конференція молодих учених «Актуальні проблеми природничих і гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених» (м. Черкаси, 22–23 травня 2024 року). Матеріали конференції. – Черкаси, 2024. – С. 148–150.

Мінаєва В. О., Карауш-Кармазін Н. М., Панченко О. О., Мінаєв Б. П. Аналіз міжмолекулярних взаємодій методом поверхонь Гіршфельда у кристалі тестостерону / VIII Міжнародна науково-практична інтернет-конференція "Хімія, біотехнологія, екологія та освіта" 15–16 травня 2024 р.: тези доповідей. – Полтава, 2024. – С. 35–38.

Панченко О. О., Мінаєв Б. П. Спін орбітальна взаємодія в супероксиді та проблема урожайності зернових / VIII Міжнародна науково-практична інтернет-конференція "Хімія, біотехнологія, екологія та освіта" 15–16 травня 2024 р.: тези доповідей. – Полтава, 2024. – С. 187–191.

Quantum-chemical calculations in cathinone investigations. O. Panchenko N. Karaush-Karmazin, V. Minaeva, J. Nycz, B. Minaev. International Conference on Recent Advances on Green Catalysis and Drug Discovery (ICRAGCDD-2024), 4th-6th September, 2024. – Talwandi Sabo, India. – P. 261.

Milewski F., Kolińska J., Karaush-Karmazin N., Nycz J. New tools in heavy metal detection: synthesis and spectroscopic characterization of selected water-soluble styryls derivatives of quinolines and 1,10-phenanthrolines / XXV International Symposium “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” and XXII International Symposium on Selected Problems of Chemistry of Acyclic and Cyclic Heteroorganic Compounds, 21–22 November 2024 Łódź, Poland. – P.2-052.

Milewski F., Karaush-Karmazin N., Nycz J. Synthesis and spectroscopic characterization of water-soluble 1,10-phenantroline derivatives rationalized based on DFT calculation / Summer School on Organic Chemistry under Non-Classical Conditions, 6–7 September 2024 Warsaw, Poland. – P.79.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Черевко Олександр Володимирович
д. е. н., 08.00.05

Перелік осіб-виконавців

Бондарчук Сергій Вікторович
(к. х. н.)

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

Мінаєва Валентина Олександрівна
(к. х. н.)

Новочуб Ксенія Василівна
(-)

Панченко Олександр Олександрович
(-)

Стахіра Павло Йосипович
(д.т.н., 05.27.06)

Чернюк Мар'яна Віталіївна
(-)

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

