Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U001777

Державний реєстраційний номер: 0121U107533

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Проведення досліджень кінетичних та люмінесцентних властивостей новосинтезованих органічних напівпровідників та неорганічних матеріалів та їх застосування в конструкції органічних світловипромінюючих діодів

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2023

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: бульв. 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: просп. Перемоги, буд. 10, м. Київ, Київська обл., 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.): 2244.460

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Тандемні органічні світлодіоди з високою квантовою ефективністю на основі ультратонких емісійних шарів із трансфером енергії від ексиплексу

Назва роботи англійською:

Tandem organic LEDs with high quantum efficiency based on ultra-thin emission layers with energy transfer from the explex

Реферат українською:

Об’єкт дослідження – ультратонкі плівки органічних емісійних матеріалів з наперед заданим властивостями, які характеризуються високим значенням квантового виходу фотолюмінесценції, вузьким спектром фото- та електролюмінісценції, чистотою кольору та доготривалими часами загасання фотолюмінесценції; неорганічні плівки на основі колоїдних наночастинок в якості транспортних та емісійних шарів. Метою роботи є встановлення взаємозв'язку між електронною будовою та фотофізичними характеристиками нових емісійних матеріалів та реалізація ергономічних та енергоефективних органічних та гібридних тандемних гетероструктур на основі ультратонких емісійних шарів з трансфером енергії від ексиплексу, які б відповідали стандартам ТСО та Energy Star. Результати роботи та їх наукова новизна: Встановлено закономірності зв'язку електронної будови і структури кристалічної упаковки та спектральними властивостями і анізотропією транспорту носіїв зарядів для серії структур гетероциркуленів. Вперше продемонстровано новий тип донорно-□-акцепторного випромінювача з використанням сульфобензімідного фрагмента як акцепторної одиниці, що показує термічно активовану уповільнену флуоресценцію. Встановлено, що молекулу 9-(2,3,5,6-тетрафтор-4-вінілфеніл)карбазол можна використовувати як багатофункціональну структуру, зокрема, як флуоресцентний випромінювач, матеріал-хост для органічних світловипромінюючих діодів а основі квантових точок. Розроблено підходи функціоналізації серії похідних периленів методами квантової хімії з метою покращення їх транспортних та оптоелектронних властивостей. Встановлено природу ароматичності, електронних, коливальних та ЯМР-спектрів нових ковалентних органічних каркасів на основі тетраокса[8]циркулену, які вперше були передбачені нами на основі квантово-хімічного моделювання у 2014 році та синтезовані лише у 2022 році. Запропоновано механізм триплет-синглетного перенесення енергії в органічних світлодіодах на основі дифеніламін-похідних карбазолу.

Реферат англійською:

The research object is ultra-thin films of organic emissive materials with predetermined properties, which are characterized by a high photoluminescence quantum yield, a narrow photo- and electroluminescence spectrum, color purity, and long photoluminescence decay times; inorganic films based on colloidal nanoparticles as transport and emission layers. The aim is to establish the relationship between the electronic structure and photophysical characteristics of new emission materials and to implement ergonomic and energy-efficient organic and hybrid tandem heterostructures based on ultra-thin emission layers with energy transfer from exciplex that would meet TSO and Energy Star standards. Results and novelty. The regularities of the relationship between the electronic structure and the structure of the crystal packing and the spectral properties and anisotropy of the transport of charge carriers for a series of heterocirculene structures have been established. A new type of donor-□-acceptor emitter using a sulfobenzimide moiety as an acceptor unit is demonstrated for the first time, showing thermally activated delayed fluorescence. It was established that the 9-(2,3,5,6-tetrafluoro-4-vinylphenyl)carbazole molecule can be used as a multifunctional structure, in particular, as a fluorescent emitter, a host material for organic light-emitting diodes, and based on quantum dots. Functionalization approaches of a series of perylene derivatives using quantum chemistry methods have been developed in order to improve their transport and optoelectronic properties. The aromaticity nature, electronic, vibrational and NMR spectra of new

covalent organic frameworks based on tetraoxa[8]circulene, which were first predicted by us based on quantum chemical modeling in 2014 and synthesized only in 2022, were established. The mechanism of triplet-singlet energy transfer in organic light-emitting diodes based on diphenylamine-carbazole derivatives is proposed.

Індекс УДК: 547.52/.68, 547.7/.8, 547.1'1, 547, 554.135

Коди тематичних рубрик: 31.21.25, 31.21.27, 31.21.29, 31.21.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Баришніков Гліб Володимирович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

Патент України на корисну модель № 145855 «Портативний пристрій для визначення вольт-амперних та яскравісних характеристик органічних світлодіодів» Х. Б. Іванюк, П. Й. Стахіра, М. С. Івах, заявн. Національний університет "Львівська політехніка". – № u.202004580 Заявл. 06.01.2021.

Karaush-Karmazin N. N., Baryshnikov G. V., Minaev B. F. Aromaticity of Heterocirculenes. Chemistry. 2021. Vol. 3, no. 4. P. 1411–1436. URL: https://doi.org/10.3390/chemistry3040102

Gužauskas M., Narbutaitis E., Volyniuk D., Baryshnikov G. V., Minaev B. F., Ågren H., Chao Yu-Chiang, 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. https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.131549

Minaeva V. A., Karaush-Karmazin N. N., Panchenko A. A., 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. P. 113455. URL: https://doi.org/10.1016/j.comptc.2021.113455

N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, H. Ågren and B. F. Minaev, Comprehensive Heterocyclic Chemistry IV, ed. H. N. C. Wong, Chapter Furans and Their Benzo Derivatives: Structure, Elsevier, 2021, 190–232. (Available online 23 November 2021, Version of Record 23 November 2021) https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780124095472147687?via%3Dihub

Nucleotide Interaction with a Chitosan Layer on a Silica Surface: Establishing the Mechanism at the Molecular Level / T. M. Budnyak, N. N. Vlasova, L. P. Golovkova, O. Markitan, G. Baryshnikov, H. Ågren, and A. Slabon Langmuir. 2021. Vol. 37, no. 4. P. 1511–1520. URL: https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.0c03050

Danyliv Y., Ivaniuk K., Danyliv I., Bezvikonnyi O., Volyniuk D., Sych G., Lazauskas A., Skhirtladze L., Ågren H., Stakhira P., Karaush-Karmazin N., Ali A., Baryshnikov G., Grazulevicius J. V. Carbazole-□-sulfobenzimide derivative exhibiting mechanochromic thermally activated delayed fluorescence as emitter for flexible OLEDs: Theoretical and experimental insights. Dyes and Pigments. 2022. P. 110841. URL: https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2022.110841

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, no. 8. P. 4146–4159. URL: https://doi.org/10.1021/acsaelm.2c00778

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. P. 113900. URL: https://doi.org/10.1016/j.comptc.2022.113900

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, no. 21. P. 7519. URL: https://doi.org/10.3390/molecules27217519

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 Received 27 September 2022, Revised 29 October 2022, Accepted 5 December 2022, Available online 7 December 2022, Version of Record 15 December 2022.

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

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, no. 3. P. 89–103. URL: https://doi.org/10.31489/2959-0663/3-23-7

Danyliv I., Ivaniuk K., Danyliv Y., Helzhynskyy I., Andruleviciene V., Volyniuk D., Stakhira P., Baryshnikov G. V., Grazulevicius J. V. Derivatives of 2-Pyridone Exhibiting Hot-Exciton TADF for Sky-Blue and White OLEDs. ACS Applied Electronic Materials. 2023. Vol. 5, no. 8. P. 4174–4186. URL: https://doi.org/10.1021/acsaelm.3c00443

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

Huang Y., Zhu B., Li Q., Baryshnikov G., Li C., Sha F., Wu X.Y., Ågren H., Xie Y. Syntheses and coordination of linear and macrocyclic pentapyrroles possessing a fused moiety: Confusion modulated structural diversity. Dyes and Pigments. 2024. P. 111948. (Received Date: 19 November 2023 Revised Date: 24 December 2023 Accepted Date: 3 January 2024) URL: https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2024.111948

Go´rski K., Kusy D., Ozaki S., Banasiewicz M., Valiev R., Sahoo S. R., Kamada K., Baryshnikov G., Gryko D. T. The interplay of intersystem crossing and internal conversion in quadrupolar tetraarylpyrrolo[3,2-b]pyrroles. J. Mater. Chem. C. 2024. (Received 21st October 2023, Accepted 26th December 2023) URL: https://doi.org/10.1039/d3tc03851c

Szymaski B., Sahoo S. R., Valiev R., Valulyuk O., Laski P., Jarzembska K., Kaminski R., Baryshnikov G., Teimouri M. B., Gryko D. T. The effect of rigidity on the emission of quadrupolar strongly polarized dyes. New J. Chem. 2023. (Received 28th November 2023, Accepted 3rd January 2024 First published on 4th January 2024) URL: https://doi.org/10.1039/d3nj05467e

Helzhynsky I., Kutsiy S., Veryha A., Ivaniuk K., Dudok T. Development of portable device for measurement of dynamic and static light-emission WOLED characteristics. Technology audit and production reserves. 2021. Vol. 1, no. 1(57). P. 30–33. URL: https://doi.org/10.15587/2706-5448.2021.225239

Panchenko A.A., Minaev B.F., Minaeva V.A. Interaction of quintet oxygen O2 (5Πg) with benzene in the rarefied gas phase / Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences – 2021. – Volume 1. – P. 55-63. https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-55-63

F. Ivashchyshyn, V. Maksymych, D. Calus, M. Klapchuk, G. Baryshnikov, R. Galagan, V. Litvin, P. Chabecki, I. Bordun / Mechanisms of electrical conductivity, quantum capacity and negative capacitance effects in InSe nanohybrid // Bull. Pol. Acad. Sci. Tech. Sci. 2022, 70, 1, 1–8. (SNIP = 0.543) DOI: 10.24425/bpasts.2021.139958

Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G., Minaev B. Crystal Structure and Hirshfeld Surfaces Analysis of Heterocyclic [9]- and [10]Circulenes / MATEC Web of Conferences. – 2022. – Vol. 355. – P. 01020.

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, N 3. – P. 202. https://doi.org/10.33263/BRIAC133.202

Nycz J. E., Karaush-Karmazin N., Minaev B., 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).

Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G., Minaev B. Crystal Structure and Hirshfeld Surfaces Analysis of Heterocyclic [9]- and [10]Circulenes / MATEC Web of Conferences (2021 International Conference on Physics, Computing and Mathematical (ICPCM2021)). December 29-30, 2021: online report. Xiamen, China – P. 01020. URL: https://doi.org/10.1051/matecconf/202235501020

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 (Június 15-17). Eger, 2022. P. 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. P. 33–35.

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.

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.

Kutsiy S., Danyliv I., Stakhira P., Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G., Minaev B. Theoretical and Experimental Investigation of Mobilities of Tetraoxa[8]circulene // 23rd International Conference-School “Advanced Materials

and Technologies“ August 23–27, 2021: theses of report. Palanga, Lithuania, 2021. P. 140. URL: https://www.ebooks.ktu.lt/eb/1561/advanced-materials-and-technologies-book-of-abstracts-of-23rd-international-conference-school/

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

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.

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.

Cekaviciute M., Simokaitiene J., Grazulevicius J.V., Volyniuk D., Ivanyuk K. Synthesis and properties of phenylethenyl-substituted phenoxazine and phenothiazine derivatives for OLEDs // Baltic polymer symposium (Lithuania, September 21, 2022). Матеріали конференції. Lithuania, 2022. P. 47.

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, September 21, 2022: abstracts. Lithuania, 2022. C. 73.

Stanitska M., Pokhodylo N., Lytvyn R., Urbonas E., Volyniuk D., Ivaniuk K., Stakhira P., Keruckiene R., Obushak M., Grazulevičius J. V. A Very Simple Host-Free Organic Light-Emitting Diode with Blue Emitting Layer of the Derivative of 1H-1,2,3-triazole Reaching External Quantum Efficiency of 4,6% // Advanced Materials and Technologies. Book of 25th International Conference-School (21-25 August 2023). Palanga, Lithuania, 2023. P. 85. https://doi.org/10.5755/e01.2669-1930.2023

Karaush-Karmazin N.N. Analysis of Hirschfeld surfaces of the tetraselena-tetrathia[8]circulene crystal / N.N. Karaush-Karmazin, A.V. Babiy, B.F. Minaev // 11th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics July 20-23, 2021: poster. – Warsaw, Poland, 2021 – p. 32.

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

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Черевко Олександр Володимирович

Перелік осіб-виконавців

Іванюк Христина Богданівна
(к. т. н., с.н.с.)

Бабій Альона Валентинівна
(-)

Гелеверя Дмитро Миколайович
(-)

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

Панченко Олександр Олександрович
(-)

Чернюк Мар'яна Віталіївна
(-)

Відповідальний за підготовку облікових документів Карауш-Кармазін Наталія Миколаївна

Телефон +38 (093) 647-57-39

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна