Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U103502

Державний реєстраційний номер: 0117U003908

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-02-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Молекулярний дизайн матеріалів для органічних світловипромінюючих діодів з альтернативними механізмами електролюмінесценції

Початок етапу: 10.2017

Закінчення етапу: 09.2020

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

Код за ЄДРПОУ: .37536162

Місцезнаходження: пр-т Перемоги, 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 406-82-00, 406-83-80

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1512.540

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Молекулярний дизайн матеріалів для органічних світловипромінюючих діодів з альтернативними механізмами електролюмінесценції

Назва роботи англійською:

Molecular design of materials for organic light-emitting diodes with alternative mechanisms of electroluminescence

Реферат українською:

Основні наукові результати: 1. Структуру молекул гетеро[n]циркуленів можна охарактеризувати на основі енергії напруженості макроциклу як основного дескриптору для оцінки стабільності їх молекул. Встановлено, що збільшення розміру макроциклу (n = 10–30) для вищих гетероциркуленів приводить до поступового перетворення їх структури від сідлоподібної до спіралеподібної, а потім до крилоподібної форми. У той же час нижчі представники з n = 4, 6 демонструють чашеподібну структуру через високу енергетичну напруженість їх макроциклу. У 2020 році представлено синтез перших «вищих» гетероциркуленів – діазатріокса[9]циркулену та тетрагідро[10]циркулену. При цьому діазатріокса[9]циркулен є абсолютно плоским, в той час як тетрагідро[10]циркулен має V-подібну форму. Чергування радіальних (коротких) та ендоциклічних (довгих) зв'язків в структурі діазатріокса[9]циркулену вказує на значний вклад радіаленової структури. 3. На основі аналізу провідності нових синтезованих циркуленів встановлено, що тетрагідро[10]циркулен є напівпровідником р-типу. 4. Для серії тіа[7]циркуленів та нових змодельованих Se-, Te-, S/Te- та Se/Te-заміщених [8]циркуленів поведено дослідження ароматичності методом незалежних від ядер хімічних зсувів та методом магнітно-індукованих кільцевих струмів. Встановлено, що всі досліджувані гетеро[7]циркулени та гетеро[8]циркулени складаються з двох концентричних підсистем: внутрішнього антиароматичного семи- або восьмичленного ядра та зовнішньої ароматичної системи з бензенових та гетероаренових циклів. Загалом, більшість досліджуваних гетеро[7]циркуленів можна вважати слабко антиароматичними через незначне домінування паратропного кільцевого струму, тоді як гетеро[8]циркулени є ароматичними сполуками. 5. Топологія магнітно-індукованого кільцевого струму є досить нечутливою до типу гетероатома у зовнішньому макроциклі молекул гетероциркуленів, кількості гетаренових циклів та розміру внутрішнього циклу, це чітко показує особливу електронну структуру циркуленів.

Реферат англійською:

Main results: 1. The structure of the molecules of hetero[n]circulenes can be characterized based on the strain energy of the macrocycle as the main descriptor for assessing the stability of their molecules. It was established that the increase in the macrocycle size (n = 10–30) for higher heterocirculenes leads to a gradual transformation of their structure from saddle-shaped to spiral, and then to wing-shaped structure. At the same time, the lower representatives with n = 4, 6 show a bowl-shaped structure due to the high strain energy of their macrocycle. 2. In 2020, the synthesis of the first "higher" heterocirculenes - diazatrioxa[9]circulene and tetrahydro[10]circulene was presented. In this case, diazatrioxa[9]circulene is absolutely planar, while tetrahydro[10]circulene has a V-shaped structure. The alternation of radial (short) and endocyclic (long) bonds in the structure of the diazatrioxa[9]circulene indicates a significant contribution of the radial structure. 3. Based on the analysis of the conductivity of the newly synthesized circulenes, it was found that tetrahydro[10]circulene is a p-type semiconductor. 4. For a series of thia[7]circulenes and newly modeled Se-, Te-, S/Te- and Se/Te-substituted [8]circulenes, we have studied the aromaticity by the nucleus-independent chemical shift (NICS) method and by the method of magnetically-induced ring currents. It was established that all the studied hetero[7]circulenes and hetero[8]circulenes consist of two concentric subsystems: internal antiaromatic seven- or eight-membered ring

and external aromatic system of benzene and heteroarene rings. In general, most of the studied [7]circulenes can be considered as weakly antiaromatic, while hetero[8]circulenes are aromatic. 5. It was found that the topology of the magnetically induced ring current is quite insensitive to the heteroatom type in the outer macrocycle of molecules, the number of heteroarenes and the size of the inner ring.

Індекс УДК: 547, 554.135

Коди тематичних рубрик: 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)

Назва НТП українською: Розробка рекомендацій та виготовлення дослідних зразків органічних світлодіодів.

Назва НТП англійською: Recommendations and manufactured of prototypes of organic light-emitting diodes.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Вироби технічні, Методи, теорії

Галузь застосування: Світлотехніка

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблені рекомендації та пропозиції: 1) щодо напрямленого синтезу нових органічних екологічно безпечних матеріалів, які б виконували функції транспорту та інжекції носіїв зарядів, люмінесцентних шарів та 2) щодо формування інтерфейсу між окремими шарами емітерів. Сфабриковано діод, в якому в якості допанта використано азатриокса[8]циркулени, він демонструє високу яскравість (23700 Кд/м2 при 15 В) та струмову ефективність (4.2 Кд/А при яскравості 1000 Кд/м2). Отримані значення світлових показників майже не залежать від густини струму в діапазоні від 30 до 500 мА/см2, що робить можливим використання даного типу діодів в технології виготовлення дисплеїв та джерел освітлення.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: У масове виробництво ще не впроваджено.

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

Electronic structure and spectral properties of heterocirculenes: monograph / B. F. Minaev, N. M. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva. – Cherkasy : Publishing dept. Chabanenko Yu. A., 2018. – 300 p.

N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, H. Ågren and B. F. Minaev, In Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering, ed. H. N. C. Wong, Chapter Furans and Their Benzo Derivatives: Structure, Elsevier, 2019, 1–43.

Спосіб виготовлення органічного світлодіода / З. Ю. Готра, Г. І. Барило, П. Й. Стахіра, В. В. Вірт, Х. Б. Іванюк; заявн. Національний університет "Львівська політехніка". – u201812743; заявл. 21.12.2018; опубл. 10.05.2019; Бюл. № 9.

Anti-Aromatic versus Induced Paratropicity: Synthesis and Interrogation of a Dihydro-diazatrioxa[9]circulene with a Proton Placed Directly above the Central Ring / S. K. Pedersen, K. Eriksen, N. N. Karaush-Karmazin, B. Minaev, H. Ågren, G. V. Baryshnikov, M. Pittelkow // Angewandte Chemie. International Edition – 2020. – Vol.59. – P. 5144–5150.

Structure, stability and electronic properties of one-dimensional tetrathia-and tetraselena [8] circulene-based materials: a comparative DFT study / N. N. Karaush-Karmazin, A.V. Kuklin, G. V. Baryshnikov, L. V. Begunovich, B. F. Minaev // New Journal of Chemistry – 2020. Vol. 44. – P. 6872–6882.

Can attachment of tert-butyl substituents to methoxycarbazole moiety induce efficient TADF in diphenylsulfone-based blue OLED emitters? / A. Bucinskas, K. Ivaniuk, G. Baryshnikov, O. Bezvikonnyi, P. Stakhira, D. Volyniuk, B. Minaev, H. Ågren, Y. Zhydachevskyy, J. V Grazulevicius // Organic Electronics – 2020. – Vol. 86. – P. 105894.

A fully conjugated planar heterocyclic[9]circulene / S. K. Pedersen, K. Eriksen, H. Ågren, B. F. Minaev, G. Baryshnikov, N. N. Karaush-Karmazin // J. Am. Chem. Soc. – 2020. – Vol. 142. – P. 14058–14063.

Bondarchuk S. V. Theoretical evaluation of hexazinane as a basic component of nitrogen-rich energetic onium salts / S. V. Bondarchuk // Mol. Syst. Des. Eng. – 2020. – N 5. – P. 1003-1011.

Structure and tuneable luminescence in polymeric zinc compounds based on 3-(3-pyridyl)-5-(4-pyridyl)-1, 2, 4-triazole / A. Gusev, E. Braga, Y. Baluda, M. Kiskin, M. Kryukova, N. Karaush-Karmazin, G. Baryshnikov, A. Kuklin, B. Minaev, H. Ågren, W. Linert // Polyhedron – 2020. – Vol. 191 – P. 114768.

Impact of heteroatoms (S, Se, and Te) on the aromaticity of heterocirculenes / N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, L. I. Valiulina, R. Valiev, H. Ågren, B. F. Minaev // New Journal of Chemistry. – 2019. – Vol. 43, N 30. – P. 12178–12190.

Aromaticity and photophysics of tetrasila- and tetragerma-annelated tetrathienylenes as new representatives of the hetero[8]circulene family / G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, V. N. Cherepanov, N. N. Karaush-Karmazin, V. A. Minaeva, B. F. Minaev, H. Ågren // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2019. – Vol. 21. – P. 9246–9254.

Minaeva V. A complete characterization of vibrational IR and Raman spectra of the highly-symmetrical octathia[8]circulene / V. Minaeva, N. Karaush-Karmazin, G. Baryshnikov, B. Minaev // Vibrational Spectroscopy – 2019. – Vol. 100. – P. 107-116.

Gusev A.N. Novel zinc complex with an ethylenediamine schiff base for high-luminance blue fluorescent OLED applications / A.N. Gusev, M.A. Kiskin, E.V. Braga, M. Chapran, G. Wiosna-Salyga, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva, B. F. Minaev, K. Ivaniuk, P. Stakhira // The Journal of Physical Chemistry C. – 2019. – Vol. 123, N 18. – P. 11850–11859.

Bondarchuk S. V. A unified model of impact sensitivity of metal azides / S. V. Bondarchuk // New J. Chem. – 2019. – Vol. 43, N 3. – P. 1459-1468.

Pidluzhna A. Multi-channel electroluminescence of CdTe/CdS core-shell quantum dots implemented into a QLED device / A. Pidluzhna, K. Ivaniuk, P. Stakhira, Z. Hotra, M. Chapran, J. Ulanski, O. Tynkevych, Y. Khalavka, G.V. Baryshnikov, B.F. Minaev, H. Ågren // Dye Pigm. – 2019. – Vol. 162. – P. 647–653.

Li X. A three-dimensional ratiometric sensing strategy on unimolecular fluorescence–thermally activated delayed fluorescence dual emission / X. Li, G. Baryshnikov, C. Deng, X. Bao, B. Wu, Y. Zhou, H. Ågren, L. Zhu // Nat. Commun. – 2019. – Vol. 10. – Article number: 731.

Strong topological states and high charge carrier mobility in tetraoxa[8]circulene nanosheets / A. V. Kuklin, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, N. Ignatova, H. Ågren // J. Phys. Chem. C. – 2018. – Vol. 122, N 38. – P. 22216–22222.

Bondarchuk S. V. Significance of crystal habit sphericity in the determination of the impact sensitivity of bistetrazole-based energetic salts / S. V. Bondarchuk // CrystEngComm. – 2018. – Vol. 20, N 38. – P. 5718-5725.

Spontaneous disproportionation of lithium biphenyl in solution. A combined experimental and theoretical study / S. V. Bondarchuk, M. Carrera, M. de la Viuda, A. Guijarro // New J. Chem. – 2018. – Vol. 42, N 7. – P. 5168-5177.

Bondarchuk S. V. Quantification of impact sensitivity based on solid-state derived criteria / S. V. Bondarchuk // J. Phys. Chem. A – 2018. – Vol. 122, N 24. – P. 5455-5463.

A theoretical study of new representatives of closed- and open-circle benzofuran and benzocyclopentadienone oligomers / N. N. Karaush, G. V. Baryshnikov, H. Ågren, B. F. Minaev // – New J. Chem. – 2018. – Vol. 42, N 14. – P. 11493–11505.

Contribution of TADF and exciplex emission for efficient “warm-white” OLEDs / G. Grybauskaite-Kaminskiene, K. Ivaniuk, G. Bagdziunas, P. Turyk, P. Stakhira, G. Baryshnikov, D. Volyniuk, V. Cherpak, B. Minaev // Journal of Materials Chemistry C. – 2018. – Vol. 6. – P. 1543–1550.

Benzo[b]carbazole and indole derivatives as emitters for non-doped deep-blue organic light emitting diodes / R. Keruckienė, D. Volyniuk, O. Bezvikonnyi, N. Masimukku, Kh. Ivaniuk, P. Stakhira, J. V. Gražulevičius // Dyes and Pigments – 2018. – Vol. 154. – P. 145-154.

Synthesis and characterisation of carbazole-based bipolar exciplex-forming compound for efficient and color-tunable OLEDs / T. Deksnys, J. Simokaitiene, J. Keruckas, D. Volyniuk, O. Bezvikonnyi, V. Cherpak, P. Stakhira, K. Ivaniuk, I. Helzhynskyy, G. Baryshnikov, B. Minaev, J. V. Grazulevicius // New J. Chem. – 2017 – Vol. 41, N 2. – P. 559–568.

Zhou Y. Anti-Kasha’s Rule Emissive Switching Induced by Intermolecular H-Bonding / Y. Zhou, G. Baryshnikov, X. Li, M. Zhu, H. Ågren, L. Zhu // Chem. Mater. – 2018. – Vol. 30, N 21. – P. 8008–8016.

Zhao P. One-step solvothermal synthesis of high-emissive amphiphilic carbon dots via rigidity derivation / P. Zhao, X. Li, G. Baryshnikov, B. Wu, H. Ågren, J. Zhang, L. Zhu // Chem. Sci. – 2018. – Vol. 9. – P. 1323–1329.

Baryshnikov G. V. The Electronic Structure and Spectra of Triphenylamines Functionalized by Phenylethynyl Groups / G. V. Baryshnikova, V. A. Minaeva, B. F. Minaev, M. Grigoras // Opt. Spectrosc. – 2018. – Vol. 124, N. 1. – P. 57–64.

Погребняк О. С. Спектрофотометрическое определение иодатов п-анизидином / О. С. Погребняк, С. В. Бондарчук // Вопросы химии и химической технологии. – 2018. – № 5. – С. 53-61.

Karaush N. N. Recent progress in quantum chemistry of hetero[8]circulenes N. N. Karaush, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva, H. Ågren, B. F. Minaev // Mol. Phys. – 2017. – P. 1-13.

Ivaniuk K. BaZrO3 perovskite nanoparticles as emissive material for organic/inorganic hybrid light-emitting diodes / K. Ivaniuk, V. Cherpak, P. Stakhira, G. Baryshnikov, B. Minaev, Z. Hotra, P. Turyk, Y. Zhydachevskii, D. Volyniuk, O. Aksimentyeva, B. Penyukh, A. Lazauskas, S. Tamulevičius, J. V. Grazulevicius, H. Ågren // Dyes Pigm. – 2017. – 2017. – Vol. 145. – P. 399-403.

Ivaniuk K. B. New WOLEDs based on p-extended azatrioxa[8]circulenes / K. B. Ivaniuk, G. V. Baryshnikov , P. Y. Stakhira , S. K. Pedersen, M. Pittelkow, A. Lazauskas, D. Volyniuk, J. V. Grazulevicius, B. F. Minaev, Ågren H. // J. Mat. Chem. C. – 2017. – Vol. 5, N 17. – P. 4123-4128.

Bezuglyi M. An approach to discovering novel exciplex supramolecular complex based on carbazole-containing 1,8-naphthalimide / M. Bezuglyi, K. Ivaniuk, D. Volyniuk, J. V Gražulevičius, G. Bagdžiūnas // Dyes and Pigments – 2018. – P. 298–305.

Bondarchuk S. V. Two isomeric solid carbon nitrides with 1 : 1 stoichiometry which exhibit strong mechanical anisotropy / S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // New J. Chem. – 2017. – Vol. 41. – P. 13140–13148.

Lut H., Galagan R., Petrova T., Karaush N., Minaev B. Development of the Cyclic Reciprocal Derivative Chronopotentiometry with Alternating Current of Different Frequencies – Electroanalysis – 2018. – Volume 30, Issue 11. – P. 2575–2579.

Karaush-Karmazin N. N. S, Se, Te-Heteroatom impact on the aromaticity of hetero[8]circulenes / N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, R. Valiev, H. Ågren, B. F. Minaev // 1th International Conference on Excited State Aromaticity and Antiaromaticity, July 30th – August 2nd, 2019: theses of report. – Sigtuna, Sweden, 2019. – P-02.

Pidluzhna A. InP/ZnS quantum dots application in inverted solar cell / A. Pidluzhna, P. Stakhira, G. Baryshnikov // 20th International Conference on the Science and Application of Nanotubes and Low-Dimensional Materials NT19, – 21–26 July 2019. – Würzburg, Germany, 2019. – p.442.

Ivaniuk K. A new interface engineering method is demonstrated for the preparation of an efficient white organic light-emmitting diode (WOLED) / K. Ivaniuk, S. Kutsiy, I. Helzhynskyy, H. Kuchmiy, P. Stakhira, Z. Hotra // Матеріали VIII Міжнародної науково-практичної конференції "Фізико-технологічні проблеми передавання, оброблення та зберігання інформації в інфокомунікаційних системах". 3-5 жовтня, 2019.: тези доповідей. – Чернівці-Вижниця, 2019. – P. 38.

Ivaniuk K. Deep blue fluorescence organice light-emitting diode // K. Ivaniuk, S. Kutsiy, I. Helzhynskyy, A. Fechan, P. Stakhira, Z. Hotra // Матеріали VIII Міжнародної науково-практичної конференції "Фізико-технологічні проблеми передавання, оброблення та зберігання інформації в інфокомунікаційних системах", 3-5 жовтня, 2019.: тези доповідей. – Чернівці-Вижниця, 2019. – P. 37.

Карауш-Кармазін Н. М. Ароматичність тіациркуленів з різним числом конденсованих тіофенових циклів / Н. М. Карауш-Кармазін, Г. В. Баришніков, Б. П. Мінаєв // XX Міжнародна конференція студентів та аспірантів «Сучасні проблеми хімії» 15-17 травня 2019 р.: тези доповідей. – Київ, 2019. – С. 105.

Kh. Ivaniuk High-efficiency WOLED based on double emission layers/ Kh. Ivaniuk, P. Turyk , I. Duplaik , I. Helzhynskyy, P. Stakhira, X. Tan, D. Volyniuk, J. V. Grazulevicius // 11th International Conference «Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials» (ICEPOM-11), May 21–25, 2018: theses of report. – Ivano-Frankivsk, Ukraine, 2018, P. 208.

Karaush-Karmazin N. N. Charge-transport properties of tetraaza- and tetraoxa[8]circulenes / N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, H. Ågren // Круглий стіл «Наука та інноватика: вітчизняний і зарубіжний досвід – 2020» 13 травня 2020 р.: тези доповідей. – Черкаси, 2020 – С. 58.

Karaush-Karmazin N. N. Impact of molecular and packing structure on charge-transport properties of tetrathia- and tetraselena[8]circulenes / N. N. Karaush-Karmazin, G. V. Baryshnikov // Хімія, Агрохімія, Екологія та Освіта: Збірник матеріалів IV Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції (м. Полтава, 21–22 травня 2020 року). – Полтава: ПДАА, 2020. – С. 10–13.

Keruckiene R. On-doped blue emitters based on novel indole and benzo[b]carbazole derivatives / Keruckiene R., Ivaniuk Kh., Stakhira P., Volyniuk D., Grazulevicius J. V. // 5-th workshop on organic electronics and nanophotonics (WOREN) Wisla, Poland, 11-15.02.2018. – P. 29.

Bondarchuk S. V. Spectral properties of single- and double-bonded solid form of nitrogen / S. V. Bondarchuk // Optics & High Technology Material Science SPO 2017: 18th International Young Scientists Conference, 26-29 October 2017: abstracts. – Kyiv, 2017. – P. 53-54.

Bondarchuk S. V. DFT Study of the Decomposition Pathways of 5,5'-bitetrazole-1,1'-diide as a Parent Anion in the Family of Highly Energetic Green Explosives / S. V. Bondarchuk // ECSOC-21 : 21th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, 1-30 November 2017 : abstracts. – Sciforum Electronic Conference Series, Vol. 21, 2017; doi:10.3390/ecsoc-21-04781.

Karaush N. N. Photophysical properties of the benzoannelated and NH/O-substituted hetero[8]circulenes / N. N. Karaush, G. V. Baryshnikov, M. Pittelkow, B. F. Minaev , H.Ågren // International scientific internet-conference «Electronics and Photonics of Organic Nanomaterials», June 6-7, 2017 – theses of report. – Cherkasy, Ukraine, 2017. – P. 107–113.

Bondarchuk S. V. A new member in the family of single-bonded nitrogen allotropes: insight from first principles crystal structure prediction / S. V. Bondarchuk // Фізичні явища в твердих тілах : XIII Міжнародна конференція, 5-8 грудня 2017 : тези допов. – Харків, 2017. – С. 57.

Minaeva V. Analysis of IR and Raman vibrational spectra for the highly-symmetrical octathia[8]circulene / V. Minaeva, N. Karaush-Karmazin, B. Minaev, G. Baryshnikov, H. Agren // International MECM Conference dedicated to the 75th anniversary of professor Boris F. Minaev «Molecular Engineering and Computational Modelling for Nano- and Biotechnology: From Nanoelectronic to Biopolymers», September 26–26, 2018: theses of report. – Cherkasy, Ukraine, 2018. – P. 86.

Litvin V. Quantum-chemical modeling for formation of silver clusters, stabilized by products of alizarin oxidation / Valentina Litvin, Boris Minaev, Roger Njoh, Tetyana Petrova, Iryna Kalashnyk // International MECM Conference dedicated to the 75th anniversary of professor Boris F. Minaev «Molecular Engineering and Computational Modelling for Nano- and Biotechnology: From Nanoelectronic to Biopolymers», September 26–26, 2018: theses of report. – Cherkasy, Ukraine, 2018. – P. 108.

Пат. 123817 України на корисну модель Спосіб одержання біметалічного нанокомпозиту на основі міді та срібла, утримуваних на карбоновому носієві / Литвин В. А., Галаган Р. Л.; заявник і власник Черкаський національний університет ім. Богдана Хмельницького. – № u 2017 09217; заявл. 18.09.2017; опубл. 12.03.2018, Бюл. № 5.

Заявка на корисну модель України Спосіб одержання синтетичних фульвокислот з таніну / Литвин В. А., Галаган Р. Л.; заявник і власник Черкаський національний університет ім. Богдана Хмельницького. – № u 2018 08341; заявл. 08.07.2018.

Baryshnikov G. V. A computational study of structural and magnetic properties of bi- and trinuclear Cu(II) complexes with extremely long Cu---Cu distances / G. V. Baryshnikov, B. F. Minaev, A.T. Baryshnikova, H. Ågren // Chem. Phys. – 2017. – Vol. 491. – P. 48–55.

Дерев'янко В. Ю. Спектральні властивості тетрасіла- і тетрагерма[8]-циркуленів як нових представників класу гетеро[8]циркуленів / Кваліфікаційна робота на здобуття освітнього ступеня магістра. Спеціальність 102 – Хімія // 2019. – Черкаси. – 55 с.

Мінаєв Б. П., Панченко О. О. Спін електрона й нові квантові концепції у науці. Біологія і хімія в рідній школі. 2018. – No 6. – С.2–7.

Пікалов І.О. Передбачення структури титан(IV) гідриду методом самоузгодженого поля / І. О. Пікалов // XX Всеукраїнська наукова конференція молодих учених Актуальні проблеми природничих та гуманітарних наук у дослідженнях молодих учених «Родзинка – 2018» квітень 19-20, 2018: тези доповідей. – Черкаси, Україна, 2018. – P. 484.

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

Іванюк Христина Богданівна

Баришнікова Аліна Тарасівна

Бондарчук Сергій Вікторович

Дерев'янко Вікторія Юріївна

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

Литвин Валентина Анатоліївна

Панченко Олександр Олександрович

Петрова Тетяна Вячеславівна

Пікалов Іван Олександрович

Відповідальний за підготовку облікових документів — Карауш-Кармазін Н.М.

Телефон — +38 (093) 647-57-39

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

